

Outils de modélisation et de simulation dédiés aux mesures dans le cycle du combustible.

fanny.jallu@cea.fr

Laboratoire de Mesures Nucléaires, CEA Cadarache



Plan de l'exposé

- **Introduction :**
 - **qu'est-ce que la modélisation ?**
 - **à quoi sert la modélisation ?**
 - **les étapes à respecter**
- **Les deux grandes méthodes de résolution numérique**
- **Des outils de modélisation dans le cycle du combustible**
- **Exemples**
- **Etude de cas**



energie atomique • énergies alternatives

Qu'est-ce que la modélisation ?



- **Modélisation**, n.f. ,,Conception d'un **modèle** théorique``

Réf. TV5.org, Dictionnaires MediaDICO

- **Modélisation**, n.f. ,,Opération qui formalise, à l'aide d'un **modèle**, la manière dont les éléments qui interviennent dans un processus, une réalité complexe, s'organisent les uns par rapport aux autres, agissent les uns sur les autres``

Réf. Dictionnaire de l'Académie Française, neuvième édition

- **Modèle**, n.m. 1953 «système représentant les structures essentielles d'une réalité» (P. DE LATIL, *loc. cit.*)

Réf. TLFi Trésor de la Langue Française Informatisé



Domaine réel

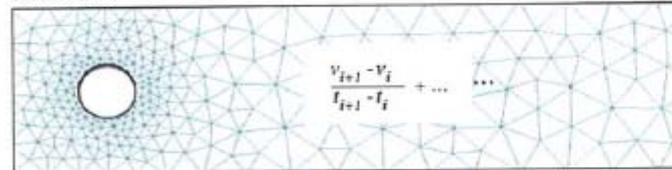


Modélisation

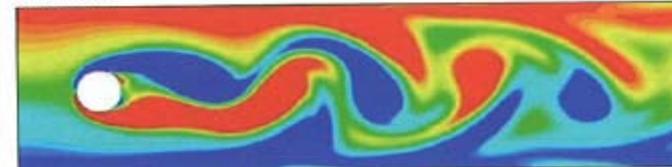


$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 v$$

Résolution



Simulation



Expérimentation



© D. Durieux/CEA

ÉTUDE DE L'ÉCOULEMENT D'UN FLUIDE AUTOUR D'UN CYLINDRE

Les phénomènes physiques sont souvent complexes. Leur analyse nécessite la recherche d'un modèle mathématique représentatif de leur comportement.

Chaque loi physique est traduite par des équations mathématiques. Exemple : la vitesse.

Les équations obtenues sont souvent complexes. Il faut alors procéder à une résolution numérique qui passe par :

- une discrétisation du domaine physique (maillage),
- une discrétisation des équations $\Delta v \hat{=} (v_{i+1} - v_i)$

Les équations discrétisées sont résolues numériquement. Les résultats sont représentés graphiquement en tous points du maillage.

L'expérimentation reste nécessaire afin :

- de valider les modèles,
- d'en mesurer les paramètres d'entrée.

L'influence de certains paramètres physiques peut ainsi être analysée virtuellement sans avoir recours à un nombre important d'essais.



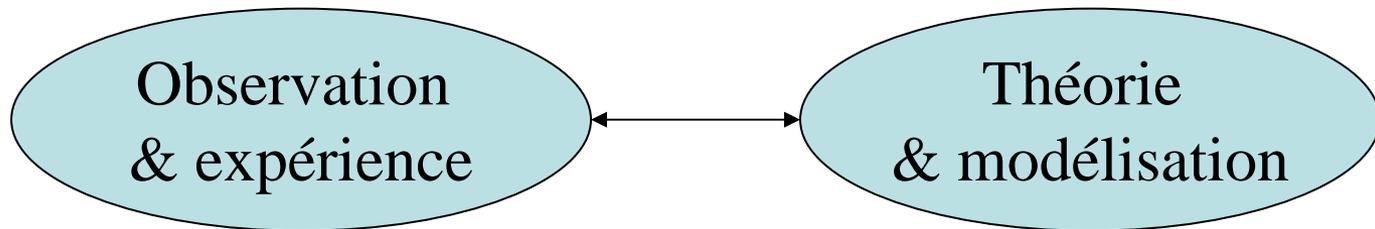
energie atomique • énergies alternatives

A quoi sert la modélisation ?

A quoi sert la modélisation ?

La connaissance scientifique progresse grâce à la recherche d'explications logiques des phénomènes naturels observés (**observation**), et à l'élaboration de la logique idéalisée qui en rend compte (**théorie**).

Ces schémas mentaux, *simplifiés* par rapport à la réalité, peuvent être appelés « **modèles** » : ils sont suscités par des observations expérimentales, et/ou suscitent eux-mêmes des expériences.

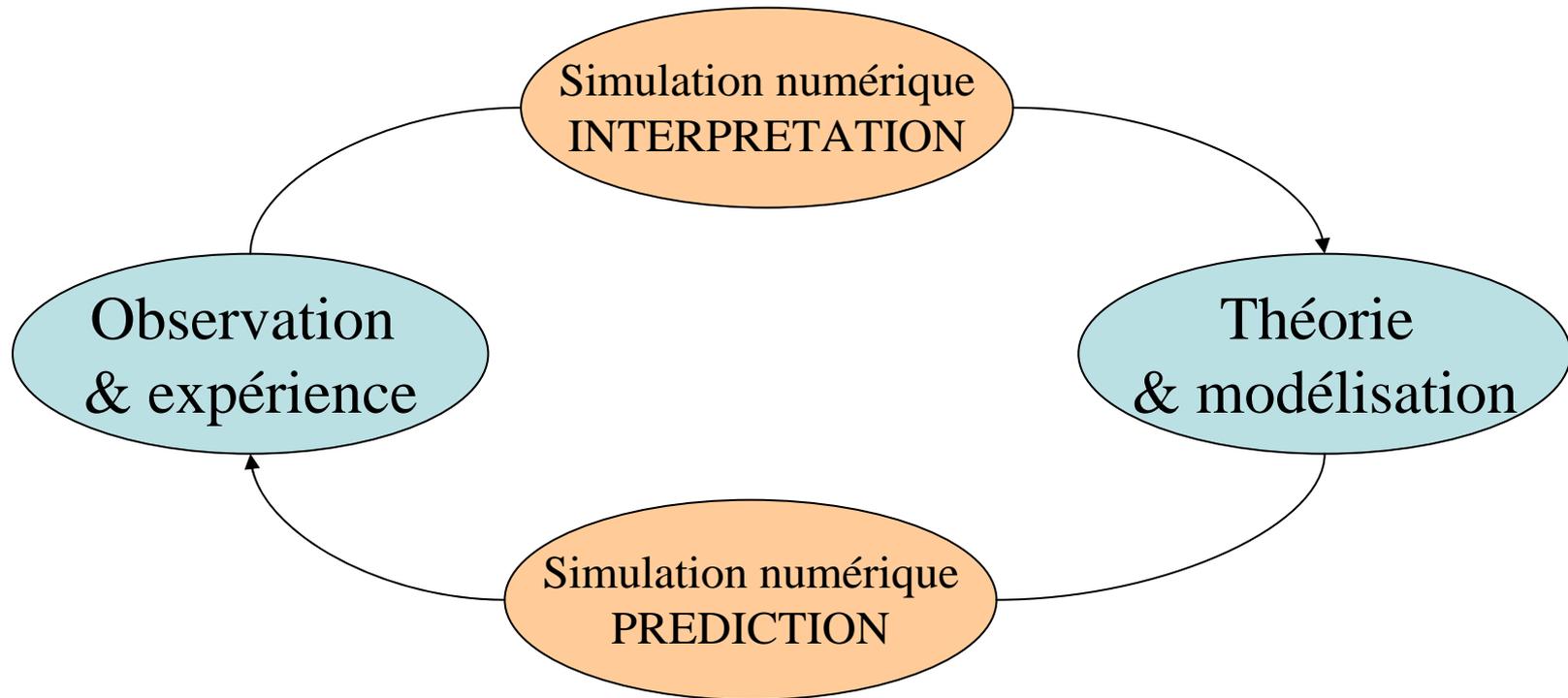


Le couple théorie-observation, fondement de la démarche scientifique.

A quoi sert la modélisation ?

Les **modèles** sont le plus souvent décrits sous forme d'**équations**, qui nécessitent une **résolution numérique**.

⇒ irruption de la **simulation** dans le couple théorie/observation



*Irruption de la **simulation numérique** dans le couple théorie-observation.*

A quoi sert la modélisation ?

Qu'apporte la simulation ?

→ elle démultiplie la capacité d'investigation dans le champ de la connaissance scientifique, par **itérations successives** entre **théorie, modélisation** (ou simulation numérique) et **vérification expérimentale**.

Comment procède-t-on ?

→ en mettant au point des **logiciels** pour résoudre les équations des **modèles**

L'étape indispensable de validation

→ le processus physique dont on pense qu'il a donné lieu au phénomène observé est simulé

→ si les résultats de la **comparaison calcul/expérience** sont cohérents avec le degré d'incertitude toléré, le **modèle (logiciel)** est déclaré valide

Cette validation peut demander des **itérations successives** pour un processus global, itérations au cours desquelles le modèle est affiné.

Elle peut également être scindée en **validations partielles**, notamment dans le cas où les processus physiques mis en jeu sont nombreux et complexes. Dans ce cas, une **validation globale** reste nécessaire lorsque chaque étape intermédiaire est validée.

A quoi sert la modélisation ?

Logiciel validé \equiv puissant outil de travail

Outil d'analyse pour le physicien, l'ingénieur...

- identification, dans un système complexe, des processus les plus importants \Rightarrow meilleure compréhension du système
- identification, quantification (relative ou absolue) de sources d'erreur
- compréhension de phénomènes physiques
- prédiction de résultats expérimentaux \Rightarrow allègement des outils/dispositifs de mesure/expérience

Logiciel de
simulation validé

Les logiciels ne sont pas figés :

- ils sont continuellement enrichis de modèles plus précis, de données physiques ré-actualisées liés aux progrès scientifiques et à une instrumentation de plus en plus pointue et perfectionnée
- ils sont implantés sur des ordinateurs de plus en plus puissants qui encouragent justement cet enrichissement



energie atomique • énergies alternatives

Les étapes à respecter

Les étapes à respecter

1. La modélisation géométrique
2. La modélisation physique
3. La simulation numérique
4. La validation expérimentale

La modélisation géométrique est l'ensemble des outils mathématiques, numériques et informatiques qui combinés permettent de construire un modèle virtuel (ou modèle informatique) d'un objet réel. Cet objet peut être plus ou moins complexe, plus ou moins schématisé.

La modélisation géométrique sous-entend d'être en mesure de réaliser la construction de formes élémentaires ou l'assemblage de formes élémentaires pour créer des objets de plus en plus complexes en respectant des contraintes topologiques.

Barrière de péage du viaduc de Millau



Photo 1
Vue d'ensemble
de l'ouvrage

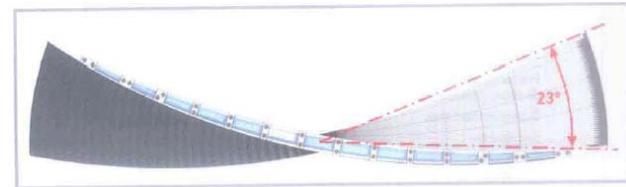


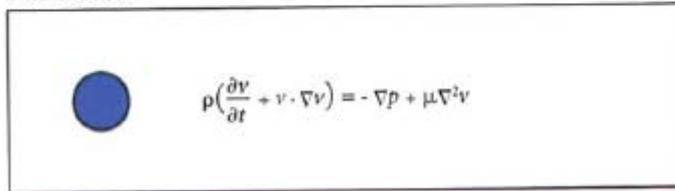
Figure 1
Rotation
de la section transversale

Le fonctionnement d'un ensemble implique l'enchaînement de nombreux **processus physiques** : **modéliser** l'un de ces processus revient à le décrire, de façon *approchée**, au travers d'un **système d'équations**. C'est la modélisation physique.

Domaine réel



Modélisation



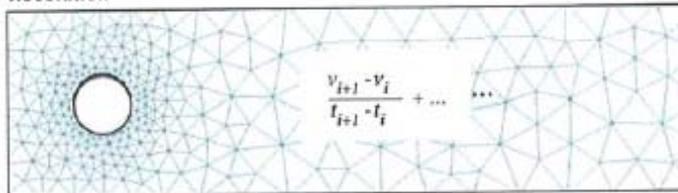
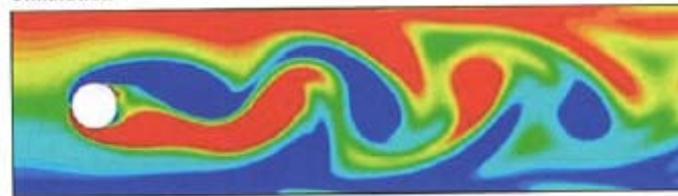
ÉTUDE DE L'ÉCOULEMENT D'UN FLUIDE AUTOUR D'UN CYLINDRE

Les phénomènes physiques sont souvent complexes. Leur analyse nécessite la recherche d'un modèle mathématique représentatif de leur comportement.

Chaque loi physique est traduite par des équations mathématiques.
Exemple : la vitesse.

* mais aussi précise que possible ! : en pratique, un **modèle** est une image approchée de la réalité, l'approche étant traduite en terme d'**incertitude**, qui doit alors être compatible avec la garantie de bon fonctionnement de l'arme.

- L'étape de simulation numérique :
une fois les **modèles physiques** mis au point → **code(s) de calcul** pour résoudre sur ordinateur les équations correspondantes
⇒ développements spécifiques en **analyse numérique** et **informatique**, augmentation de la **puissance de calcul** des ordinateurs permettant une meilleure prise en compte des phénomènes physiques en nombre et précision de description

Résolution**Simulation**

Les équations obtenues sont souvent complexes. Il faut alors procéder à une résolution numérique qui passe par :

- une discrétisation du domaine physique (maillage),
- une discrétisation des équations $\Delta v \approx (v_{i+1} - v_i)$

Les équations discrétisées sont résolues numériquement. Les résultats sont représentés graphiquement en tous points du maillage.

- L'étape de validation expérimentale :
comparaison(s) calcul / expérience
- Validation des schéma de calcul, c'est-à-dire :
 - le code ou logiciel utilisé
 - les données physiques
 - la modélisation géométrique du dispositif
 - la modélisation physique

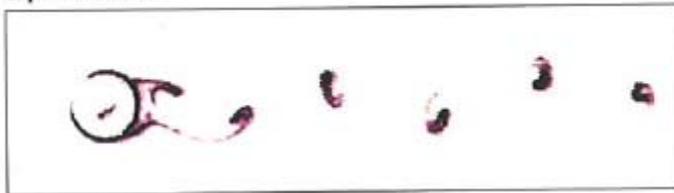
Possibilité de validation par itérations successives (validations partielles) :

- en utilisant des moyens expérimentaux pour valider les différentes étapes d'un processus physique

Nécessité d'une validation globale :

- en reproduisant l'intégralité des étapes physiques simulées en une seule expérience

Expérimentation



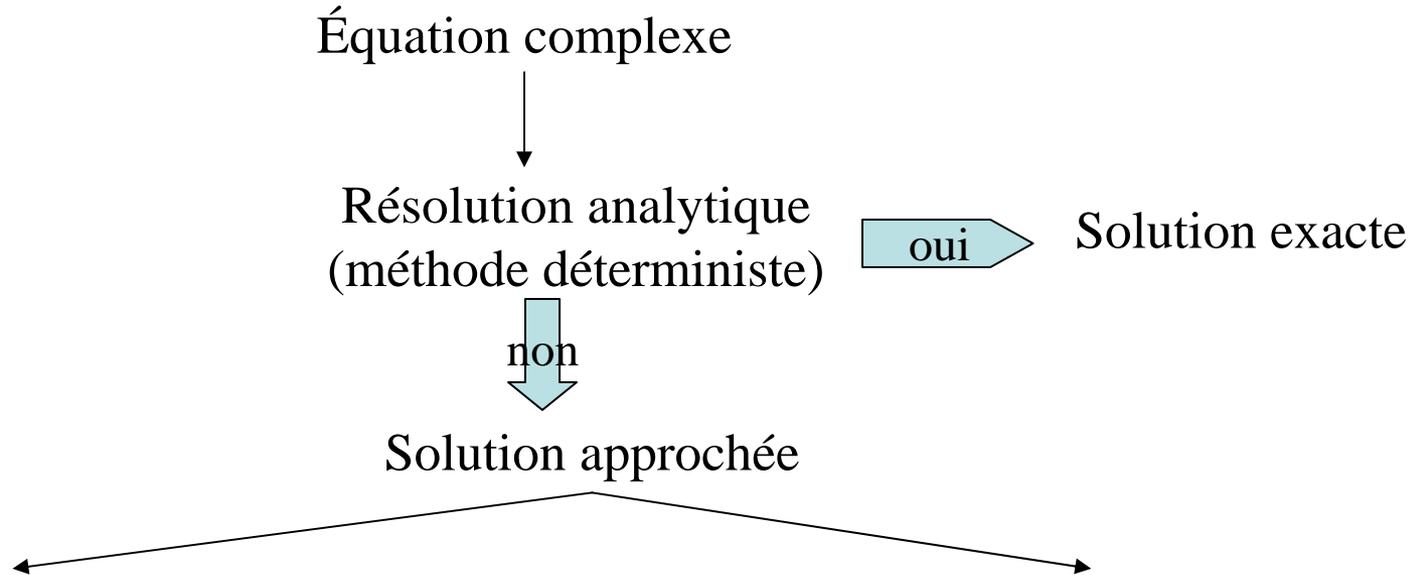
L'expérimentation reste nécessaire afin :
- de valider les modèles,
- d'en mesurer les paramètres d'entrée.
L'influence de certains paramètres physiques peut ainsi être analysée virtuellement sans avoir recours à un nombre important d'essais.



energie atomique • énergies alternatives

Méthodes de résolution numérique

Méthodes de résolution numérique



Résolution numérique par
méthodes déterministes :

- hypothèses simplificatrices au préalable
- maillage

Solution approchée d'une équation « approchée »

Résolution par méthodes
probabilistes (stochastiques,
Monte Carlo) :

permet de simuler des
configurations complexes en 3D
en conservant tous les paramètres

Solution approchée d'une équation restée exacte

Méthodes de résolution numérique

Résolution numérique par méthodes déterministes :

Sol. 1 : réduction du nombre de paramètres dans l'équation de base

on retire le temps ----> études en régime stationnaire (<> transitoire, dynamique)

on retire une coordonnée spatiale : passage de 3D en 2D, ou 2D en 1D

on peut se placer en linéaire ou non linéaire, continu ou discontinu...

Sol. 2 : discrétisation (maillage)

Le domaine dans lequel l'équation est définie et bornée est subdivisé spatialement en régions appelées *mailles* (ou points de calcul) dans lesquelles l'équation est intégrée spatialement (ex : méthodes aux différences finies ou aux éléments finis)

Attention : le choix de la taille de chaque maille conditionne la précision du résultat : un maillage trop large ne permet pas de suivre des variations rapides d'un paramètre, tandis qu'un maillage trop serré (augmentation du nombre de mailles) introduit des instabilités numériques qui augmentent le nombre d'itérations (problème de convergence).

Qu'est-ce qu'une maille ?

Soit Ω un domaine donné :

- Si Ω est un volume : les mailles seront des volumes
- Si Ω est une surface bornée : les mailles seront des surfaces bornées
- Si Ω est une portion de ligne : les mailles seront des portions de ligne portées par Ω .

Les mailles disponibles

Certains logiciels permettent de faire des maillages, mais ils ne disposent en général que de trois sortes de maille :

- **La maille linéique** : elle sert à mailler une courbe qui peut représenter un domaine linéique Ω (qui peut lui-même être plongé dans un espace physique à deux ou trois dimensions)

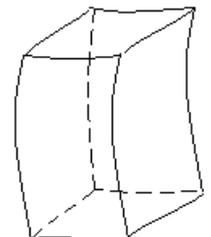
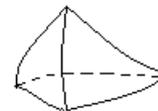
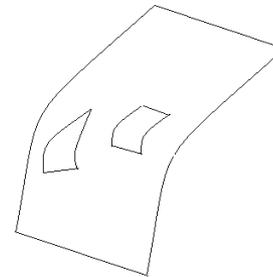
Exemples : maille droite, circulaire, ovale...

- **La maille surfacique** : elle sert à mailler une surface pouvant représenter un domaine surfacique Ω

Exemples : triangles ou quadrangles curvilignes ou rectilignes portés par la surface

- **La maille volumique** : les mailles sont des volumes

Exemples : tétraèdres, pentaèdres ou hexaèdres curvilignes



Les méthodes de maillage

La plupart des logiciels proposent des algorithmes pour générer plus ou moins automatiquement un maillage. La phase de maillage, lorsqu'elle est nécessaire, est sans doute celle où on passe le plus de temps pour la résolution d'un problème. Elle **conditionne** en effet le **résultat** et la **convergence du calcul**.

Obtenir un bon maillage résulte d'une certaine expérience et d'une certaine intuition sur le résultat du calcul. On peut cependant dégager quelques règles simples :

- **Les mailles doivent être bien proportionnées** (rapport de la plus grande dimension à la plus petite $\rightarrow 1$). Ce rapport, appelé **distorsion**, ne devrait jamais dépasser 5.

\Rightarrow Maillage surfacique : mailles idéales = triangles équilatéraux ou carrés

\Rightarrow Maillage volumique : mailles idéales = tétraèdres réguliers ou cubes

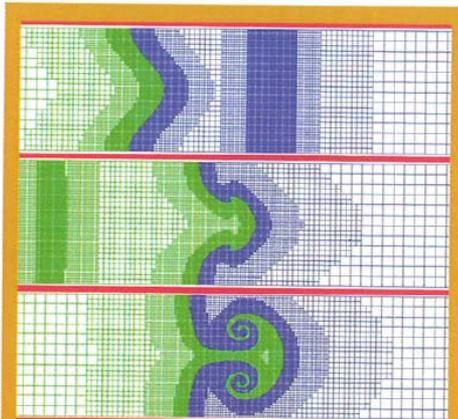
- **Le maillage ne doit pas être inutilement fin** : plus il est fin, plus le calcul est coûteux (\Rightarrow compromis entre la finesse de la représentation géométrique et le coût du calcul). Lorsque l'on a une intuition du résultat, on peut décider de mailler grossièrement dans certaines régions de moindre importance ou influence, et plus finement dans les autres.

Certains experts pensent qu'on obtient de meilleurs résultats avec des quadrangles pour les maillages surfaciques, et avec des hexaèdres pour les maillages volumiques.

Exemples d'algorithmes de maillage

- **Maillage de Delaunay** : maille en triangle pour un maillage surfacique, et en tétraèdre pour un maillage volumique \Rightarrow garantie d'une faible distorsion
- **Maillage topologique** : le contour d'une surface est divisé en 4 lignes, chaque ligne étant maillée de manière à ce que deux lignes opposées aient le même nombre de mailles. Cet algorithme est transposable en version volumique, mais ne présente pas de garantie sur la distorsion.
- **Maillage par déplacement** : on impose à une ligne maillée de se déplacer le long d'un chemin maillé ou suivant un mouvement simple (translation ou rotation). Cet algorithme est transposable en version volumique (on déplace une surface maillée), mais ne présente pas de garantie sur la distorsion.
- **Maillage par sous-domaines** : le domaine initial est sub-divisé en sous-domaines plus simples dans lesquels on applique l'une des méthodes ci-dessus \Rightarrow les maillages aux interfaces entre sous-domaines doivent coïncider, ce qui n'est pas évident lorsqu'on emploie des algorithmes différents dans des sous-domaines voisins.
- **Maillage manuel** : dernier recours !!!

Le maillage - Exemples



© CEA/CEA-M

UN MAILLAGE ADAPTABLE

Un raffinement progressif du maillage, le « remaillage adaptatif », consiste à ajuster la taille des mailles, par exemple en les rendant plus petites et plus serrées là où les phénomènes physiques sont les plus complexes et où les variations sont les plus importantes.

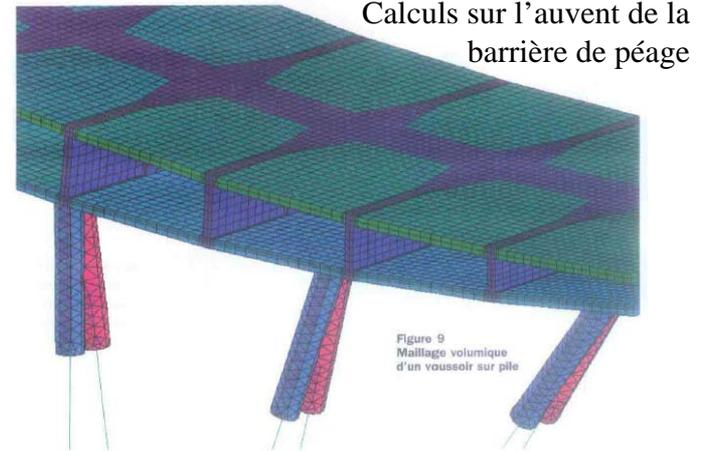
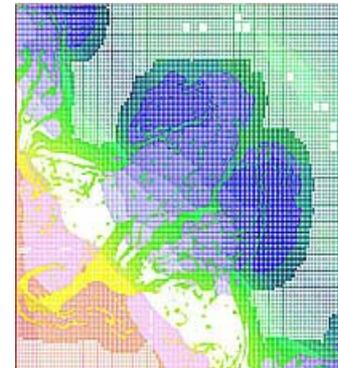
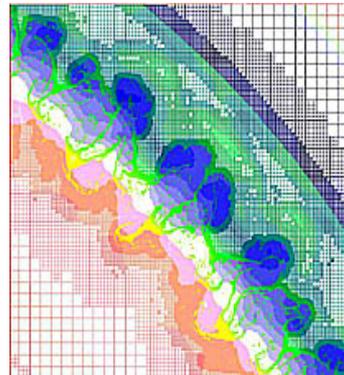


Figure 9
Maillage volumique
d'un voûsoir sur pile



Simulation numérique de phénomènes d'instabilité à l'interface entre 2 milieux. Le domaine de calcul est divisé en mailles dont les dimensions dépendent de la finesse nécessaire à une description précise de chaque zone.

Le maillage, principale application : résolution d'équations aux dérivées partielles

De nombreux problèmes s'expriment sous forme **d'équations aux dérivées partielles** soumises à des **conditions aux limites** particulières. Deux principales méthodes sont utilisées pour résoudre ces équations : les différences finies et les éléments finis.

Méthodes aux différences finies : elle consiste à **approximer**, le plus précisément possible, la solution d'une équation différentielle en un certain nombre de points (**nœuds ou points de collocation**). En ces points, les dérivées intervenant dans l'équation de base sont remplacées par des **approximations au premier ou au second ordre** (développement de Taylor). On construit ainsi un système linéaire liant les valeurs nodales (solution numérique aux nœuds) entre elles, résolu en tenant compte des conditions aux limites. Le résultat est d'autant mieux approché que le nombre de nœuds est grand, sachant qu'un nombre trop élevé de nœuds peut conduire à des difficultés de convergence.

Méthode des éléments finis : elle consiste à **recouvrir**, aussi fidèlement que possible, un **domaine continu par un nombre fini d'éléments** (mailles) dont le comportement est représenté par un nombre fini de paramètres. Le problème est alors résolu dans un espace de dimension finie obtenu par assemblage des éléments. Le résultat est d'autant mieux approché que le nombre d'éléments est grand, sachant qu'un trop grand nombre d'éléments peut conduire à des difficultés de convergence.

Domaines d'application : RDM, calcul de structures, mécanique des fluides, électricité...

Résolution numérique par méthode Monte Carlo

tous les paramètres de l'équation de départ à résoudre sont conservés

⇒ permet de lever certaines incertitudes liées à une résolution numérique par méthode déterministe

Principe : résolution de problèmes mathématiques par utilisation de tirages aléatoires pour simuler les phénomènes physiques, de manière à ce que la moyenne des résultats de ces tirages converge vers la solution (assimilables à des techniques d'échantillonnage au hasard)

Soit $f(x)$ une densité de probabilité d'avoir un résultat x : $f(x) \geq 0$ et $\int f(x).dx = 1$ sur $[a,b]$

moyenne vraie $E(x) = \int x.f(x).dx$

estimateur $S_x \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$

variance $\sigma^2 = E(x^2) - (E(x))^2$

estimateur $S_x^2 = \frac{1}{N(N-1)} \sum_1^N (x_i - \bar{x})^2 \approx \overline{x^2} - (\bar{x})^2$

écart-type $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_1^N x_i$ valable si Théorème Central Limite respecté :

« Lorsque N est grand et lorsque les variables aléatoires x_i sont indépendantes et ont des moyennes et variances finies, la distribution des \bar{x} suit une loi normale »

Indicateurs de confiance en Monte Carlo :

Incertitude relative d'origine statistique : $\sigma \equiv \frac{S_x}{x}$

Figure Of Merit : $FOM \equiv \frac{1}{\sigma^2 t}$ où t est le temps de calcul \Rightarrow FOM grand (σ , $t \ll$) et constant

Limites :

données physiques de base

temps de calcul (puissance de calcul disponible)

géométrie complexe

convergence

nombre aléatoires et pseudo-aléatoires

Nombres aléatoires : à partir de tables

26099	65801	69870	84446	58248	21282
71874	61692	80001	21430	02305	59741
08774	29689	42245	51903	69179	96682
37294	92028	56850	83380	05912	29830
33912	37996	78967	57201	66916	73998

Nombres pseudo-aléatoires : à partir de calculateurs

Suite de nb pseudo-aléatoires à distribution uniforme : $x_i = a x_{i-1} + c$ (modulo m) où x_i est égal au reste de la division de $a x_{i-1} + c$ par m (a , c , m étant des constantes)

Ex : $m = 16$, $a = 3$, $c = 1$, $x_0 = 2$

séquence périodique 2, 7, 6, 3, 10, 15, 14, 11, 2, 7, 6, ...

Ex : distribution $x_i = a x_{i-1}$ (modulo 2^N) : si $N \approx 30 - 40$, a puissance impaire de 5, x_0 impair \Rightarrow période longue 2^{N-2}

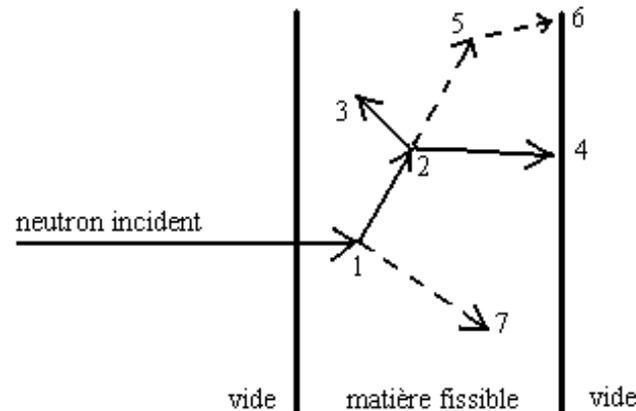
Les nombres pseudo-aléatoires sont **utiles pour tester des codes Monte Carlo** (répétabilité)

Principales applications : calculs d'intégrales multiples et problèmes de diffusion et collisions

Calculs d'intégrales multiples : intérêt de Monte Carlo → temps de calcul \pm proportionnel à l'ordre N de l'intégrale (contre t^N pour les méthodes classiques)

Simulation du transport de particules : intérêt de Monte Carlo → caractère statistique du comportement d'un ensemble de particules en interaction entre elles ou avec d'autres (gaz, plasma, composants électroniques, physique subatomique...)

Parcours d'un neutron simulé par Monte Carlo : à chaque collision, le devenir de l'entité est déterminé en fonction des sections efficaces des différentes réactions qui sont susceptibles d'intervenir et qui sont traitées au sens des probabilités



- 1 diffusion inélastique
- 2 fission
- 3 capture neutronique
- 4 fuite d'un neutron
- 5 diffusion photonique
- 6 fuite d'un photon
- 7 capture photonique

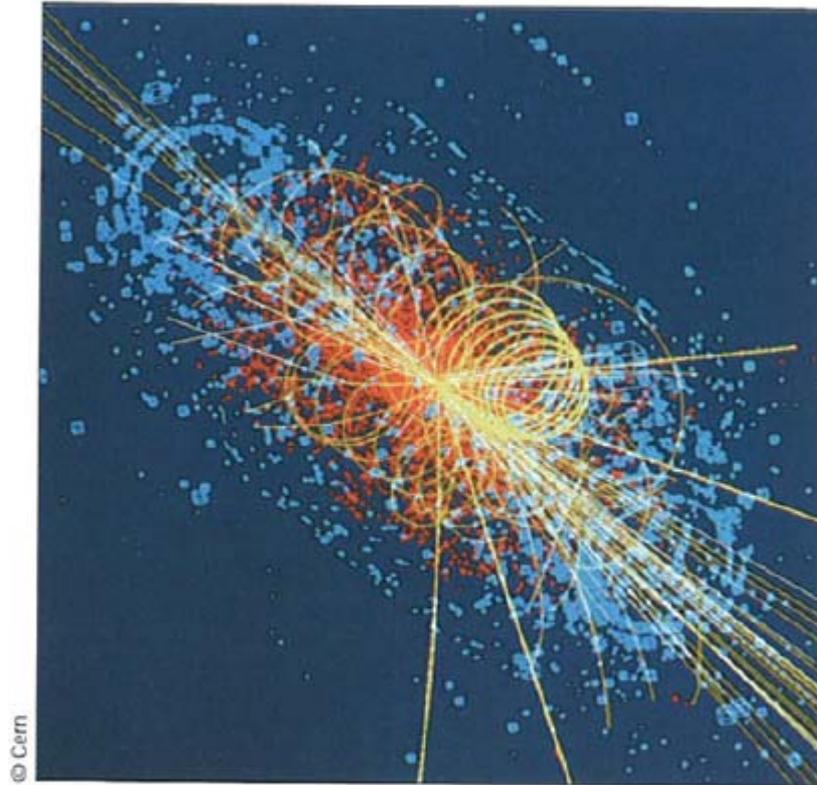
—→ neutron

- - → photon

Dans cet exemple, le neutron incident subit d'abord une diffusion inélastique en 1. Un photon est émis. Le traitement ayant lieu sur une seule particule à la fois, le photon est placé dans une « banque » (sorte de « réserve de particules »), tandis que le neutron diffusé est poursuivi et crée une fission en 2. Deux neutrons sont créés, ainsi qu'un photon. Un des deux neutrons et le photon sont ajoutés dans la banque. Le second neutron est traité. Il disparaît par fuite en 4. Son traitement est alors stoppé. Le neutron de la banque est alors poursuivi, et disparaît par capture en 3. Le photon issu de 1 est alors retiré de la banque et traité, et disparaît également par capture en 7. Il reste un photon à traiter, qui subit une diffusion en 5 puis disparaît par fuite en 6.

Méthodes de résolution numérique

Résolution numérique par méthode Monte Carlo



© Cern

Simulation de la désintégration d'un boson de Higgs calculée par la méthode de Monte-Carlo.

Puissance de calcul – exemple de développement

Augmentation de la puissance numérique au CEA/DAM :

But : disposer en 2010 d'une puissance de calcul 2000 fois supérieure à celle disponible en 1996
calculateurs massivement « parallèles » (milliers de processeurs reliés par un réseau d'interconnexion de haute performance) \Rightarrow acquisition successive d'ordinateurs performants

1. 2001 : supercalculateur TERA (5 **teraflops**, soit 5 000 milliards d'opération par seconde ; 2560 processeurs) – capacité de stockage \times 30 depuis 1996)
2. 2005 : plusieurs dizaines de teraflops
3. 2010 : plusieurs centaines de teraflops



Processeurs
2000 m²



parallélisation

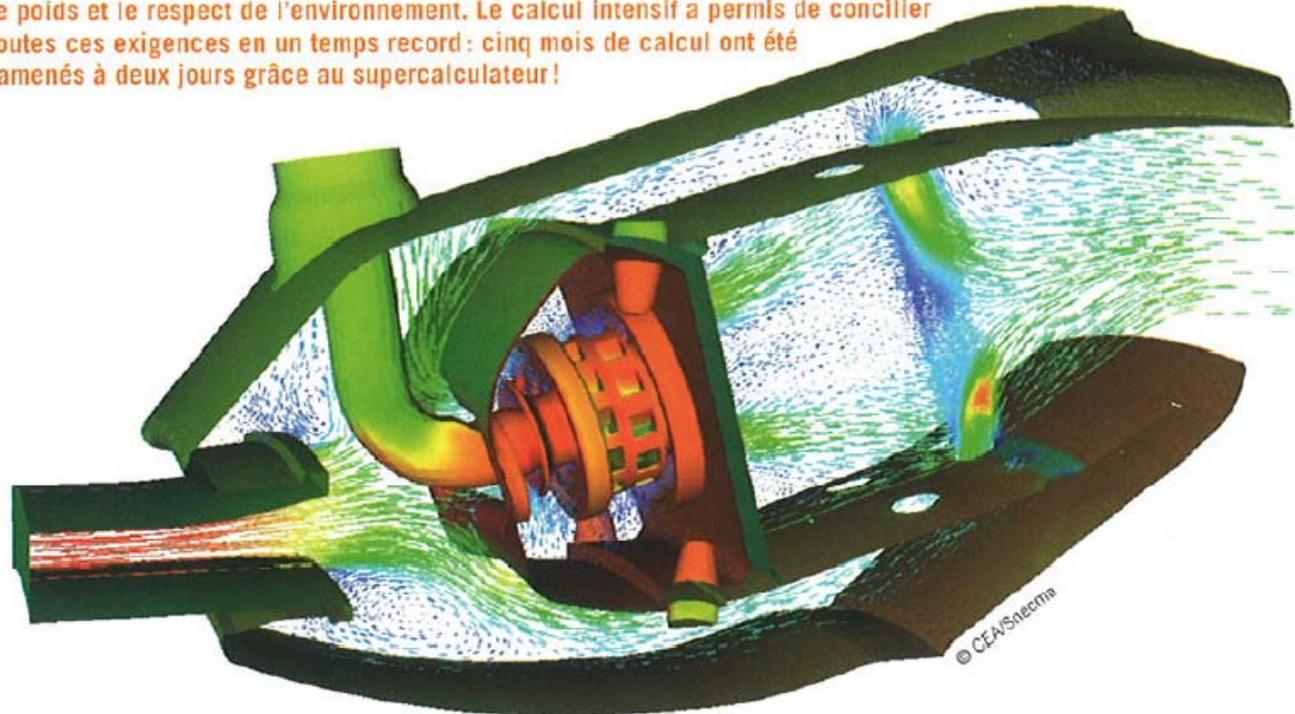


salle informatique

**Supercalculateur
TERA**

LE CCRT : CENTRE DE CALCUL POUR LE CEA ET SES PARTENAIRES

Tous les chercheurs du CEA bénéficient des moyens du Centre de calcul recherche et technologie, qui sont aussi mis à disposition de la communauté scientifique et de partenaires industriels tels EDF, le groupe Safran (Snecma, Turbomeca, Techspace Aero), l'Onera, le Cerfacs... À titre d'exemple, un turboréacteur conçu par la Snecma est un système très complexe dont les comportements mécaniques, aérodynamiques et thermiques doivent répondre à plusieurs contraintes aussi différentes que la performance, la fiabilité, la sécurité, le coût, le poids et le respect de l'environnement. Le calcul intensif a permis de concilier toutes ces exigences en un temps record : cinq mois de calcul ont été ramenés à deux jours grâce au supercalculateur !



Simulation d'une chambre de combustion de moteur d'avion. Visualisation de la vitesse d'écoulement des fluides.



énergie atomique • énergies alternatives

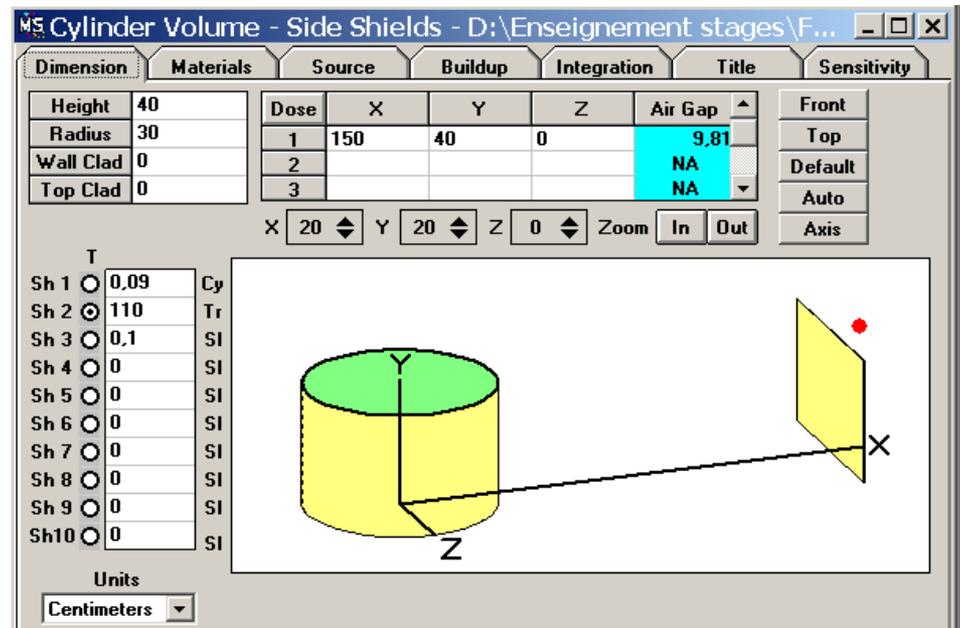
Les outils de modélisation dans le cycle du combustible

MICROSHIELD® 6.02

- distributeur : GROVE SOFTWARE, INC., Virginia, USA (<http://www.radiationsoftware.com>)
- applications : calcul de **fonction de transfert** en spectrométrie gamma, dimensionnement **d'écrans gamma**, **calcul de dose/DdD** avec prise en compte du « **build-up** », estimation de termes source après mesure de dose/DdD
- caractéristiques principales : 16 géométries 3D prédéfinies, 10 écrans standard, spectres source prédéfinis ou créés sur 25 bins entre [15 keV – 10 MeV]
- déterministe (résolution eq° de transport γ (atténuation) en **ligne droite**)

Cas étudié :

- *fût_source* ≈ 200 l de CH_2 $d = 0,25$, rempli à mi-hauteur ($H = 40$ cm, $R = 30$ cm), ép. acier 0,9 mm,
- écran de cadmium d'ép. 1 mm placé à 140 cm de l'axe du fût
- pt de calcul à 150 cm de l'axe du fût
- source 4 raies (^{241}Am , ^{239}Pu)
- calcul F_T



Material	Source 1.13e+05 cm ²	Shield 1 0.09 cm	Transition 110 cm	Shield 3 0.1 cm	Air Gap
Air			0.00122		0.00122
Aluminum					
Carbon					
Concrete					
Iron		7.86			
Lead					
Nickel					
Tin					
Tungsten					
Uranium					
Water					
Zirconium					
Cadmium				8.65	
CH2	0.25				

Source

- Standard Indices
- Linear Energy
- Logarithmic
- Exponential
- Source Inference (PPS)
- User Defined
- User Defined at Standard Energies

Default

Ext Source

Nuclides

Decay

Group #	Energy (MeV)	Activity Photons/sec	Volume Source Photons/sec/cm ²	% Energy Activity
1	0.059	1.0000e+000	8.8419e-006	5.501
2	0.1486	1.0000e+000	8.8419e-006	13.852
3	0.414	1.0000e+000	8.8419e-006	38.599
4	0.451	1.0000e+000	8.8419e-006	42.049
5				
6				
7				

Group #	Energy (MeV)	Activity photons/sec	Fluence Rate photons/cm ² /sec	Energy Fluence MeV/cm ² /sec	Exposure Rate mR/hr
1	0.059	1.000e+000	2.320e-009	1.369e-010	2.779e-013
2	0.1486	1.000e+000	8.484e-007	1.260e-007	2.071e-010
3	0.414	1.000e+000	1.655e-006	6.851e-007	1.338e-009
4	0.451	1.000e+000	1.700e-006	7.668e-007	1.503e-009
TOTALS:		4.000e+000	4.206e-006	1.578e-006	3.047e-009

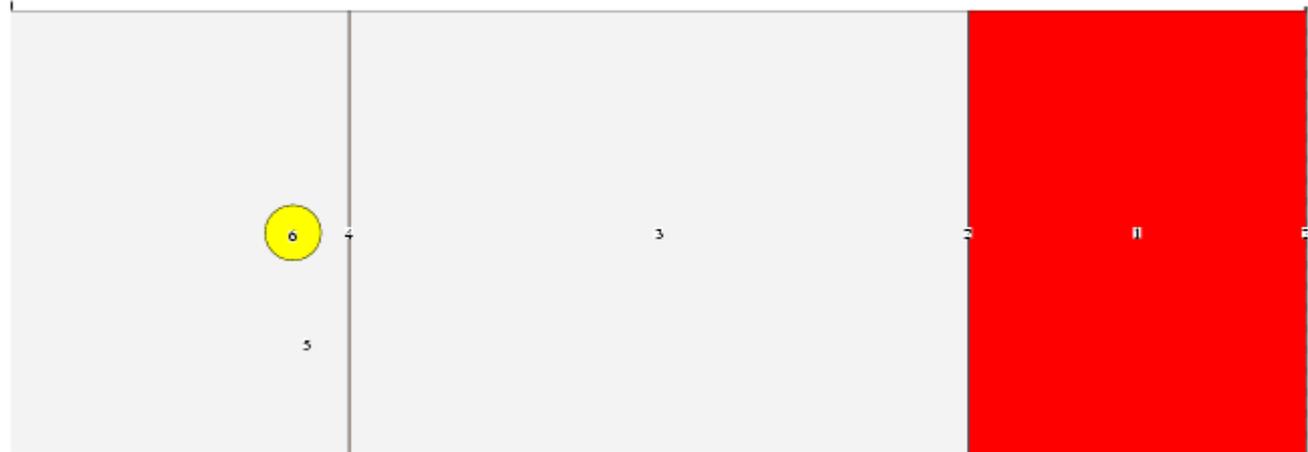
MERCURE 6

energie atomique - energies alternatives

- distributeur : CEA/SERMA
- applications : **calcul de dose/DdD gamma** en 3D avec prise en compte du « **build-up** », milieu hétérogène, calcul de **fonction de transfert** en spectrométrie gamma
- langage : fortran77 (à la base)
- semi-déterministe (résolution éq° de transport γ en **ligne droite** mais tirage aléatoire des particules_source)

Cas étudié :

- même cas que *Microshield* sauf $H = 80 \text{ cm}$
- calcul F_T



MERCURE 6

Fichiers d'entrée

```

D:\toto.lgeom
=LGEOM
CAISSON n°1 MESURE SPECTRO GAMMA
$SOURCE
    PLUS   PLANZ   0.
    MOINS  PLANZ   80.
           CYLZ   0.    0.    30.
&SOURCE
$PAROI
    PLUS   PLANZ   0.
           CYLZ   0.    0.    30.
    MOINS  PLANZ   80.
           CYLZ   0.    0.    30.09
&ACIER
$AIR-1
    PLUS   PLANZ   0.
           CYLZ   0.    0.    30.09
    MOINS  PLANX   140.
           PLANZ   80.
           CYLZ   0.    0.    300.
&AIR
$ECRAN
    PLUS   PLANX   140.
           PLANZ   0.
    MOINS  PLANX   140.1
           PLANZ   80.
           CYLZ   0.    0.    300.
&CADMIUM
$AIR-2
    PLUS   PLANX   140.1
           PLANZ   0.
           SPHERE  150.  0.    40.    5.
    MOINS  PLANZ   80.
           CYLZ   0.    0.    300.
&AIR
$PT
    MOINS  SPHERE  150.  0.    40.    5.
&PT
FIN

```

```

D:\toto.macros
=MACROS
test
BIBLIO JEF2.220
COMPOSITIONS
DENSITE
&SOURCE  0.25  2 C 0.87 H 0.13
&ACIER   7.85  1 FE 1.0
&AIR     0.001 1 N  1.0
&PT      0.001 1 N  1.0
&CADMIUM 8.32  1 CD 1.0
FIN

```

```

D:\toto.raies
=RAIES
raies
4
0.451
0.414
0.148
0.0595
FIN

```

```

D:\toto.color
|TRAC 3
&SOURCE  1
&ACIER   5
&AIR     26
&PT      4
&CADMIUM 8

```

```

D:\toto.resu
CONTRIBUTION DE CHAQUE RAIE A LA REPONSE MOYENNE SUR L'ENSEMBLE
DES ECHANTILLONS :
(CETTE VALEUR EST SIGNIFICATIVE SI ELLE VAUT PLUS DE 10% DU TOTAL)

      ENERGIE      REPONSE MOY.      ECART TYPE      PRECISION      RAIE
4.51000E-01      1.706E-06 ph/cm2/s      1.975E-09      2.315E-03      1
4.14000E-01      1.661E-06 ph/cm2/s      1.959E-09      2.358E-03      2
1.48000E-01      8.199E-07 ph/cm2/s      1.243E-09      3.031E-03      3
5.95000E-02      2.535E-09 ph/cm2/s      5.497E-12      4.337E-03      4

LA REPONSE ESTIMEE EST EGALE A 4.189676E-06 ph/cm2/s

CALCUL EQUIIMPORTANCE

```

```

D:\toto.sortie
MERCURE VERSION 6.2

FUT TP

+-----+
| OUVERTURE DE LA BIBLIOTHEQUE JEF2      RAIES      (VERSION 1 ) |
| DATE DE DERNIERE MISE A JOUR 16.03. 6 |
| BIBLIOTHEQUE GAMMA      4 GROUPEs D'ENERGIE |
+-----+

POINT : PT1
X= 150.      Y= 0.00      Z= 40.0

Raie  Energie      Reponse      Precision      Contribution
1  0.451 MeV      1.706E-06 ph/cm2/s      2.315E-03      40.72 %
2  0.414 MeV      1.661E-06 ph/cm2/s      2.358E-03      39.65 %
3  0.148 MeV      8.199E-07 ph/cm2/s      3.031E-03      19.57 %
4  0.060 MeV      2.535E-09 ph/cm2/s      4.337E-03      0.06 %

Energie Sup. Energie Inf.  Reponse      Precision
total 0.451 MeV      0.000 MeV      4.190E-06 ph/cm2/s      4.337E-03

calcul equiimportance

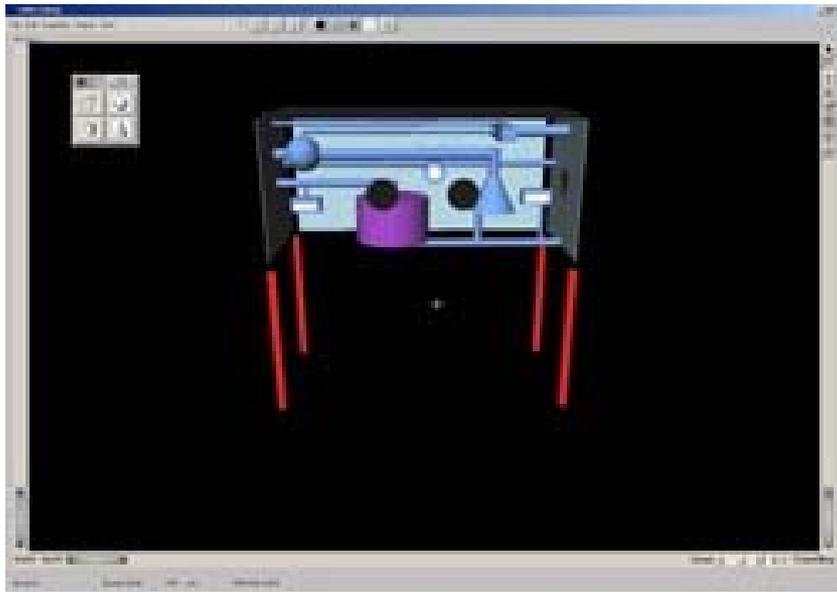
```

MERCURE 6

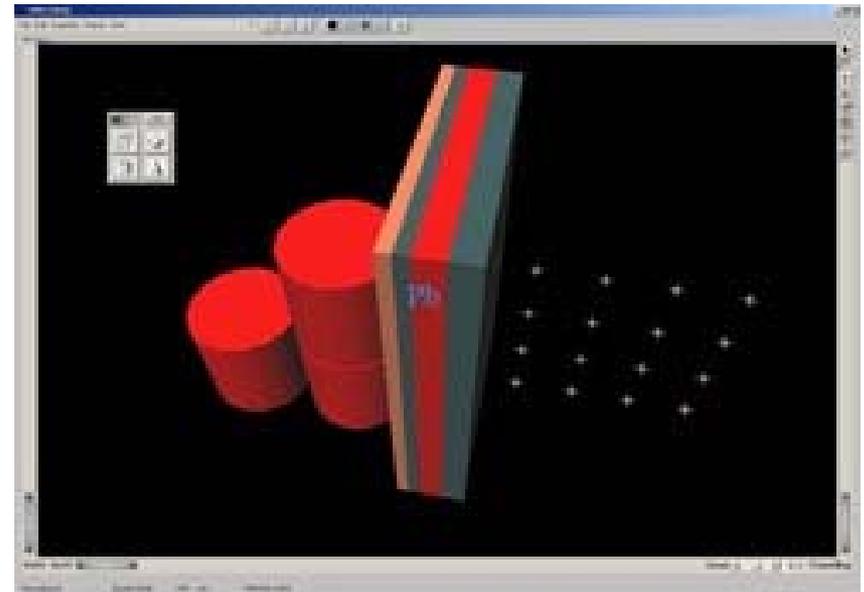
Fichiers
résultats

MERCURAD

- distributeur : CANBERRA (<http://www.canberra.com>)
- applications : dimensionnement **d'écrans gamma**, **calcul de dose/DdD**, prise en compte du « **build-up** »
- base : Mercure 6
- caractéristiques principales : géométrie 3D, écrans mono/multicouches, spectres source prédéfinis ou créés sur 195 bins entre [15 keV – 10 MeV]



Front view of the inside of a glove box



Top-side view of 3 highly active resin waste drums with multiple shields and multiple calculation points

TRIPOLI

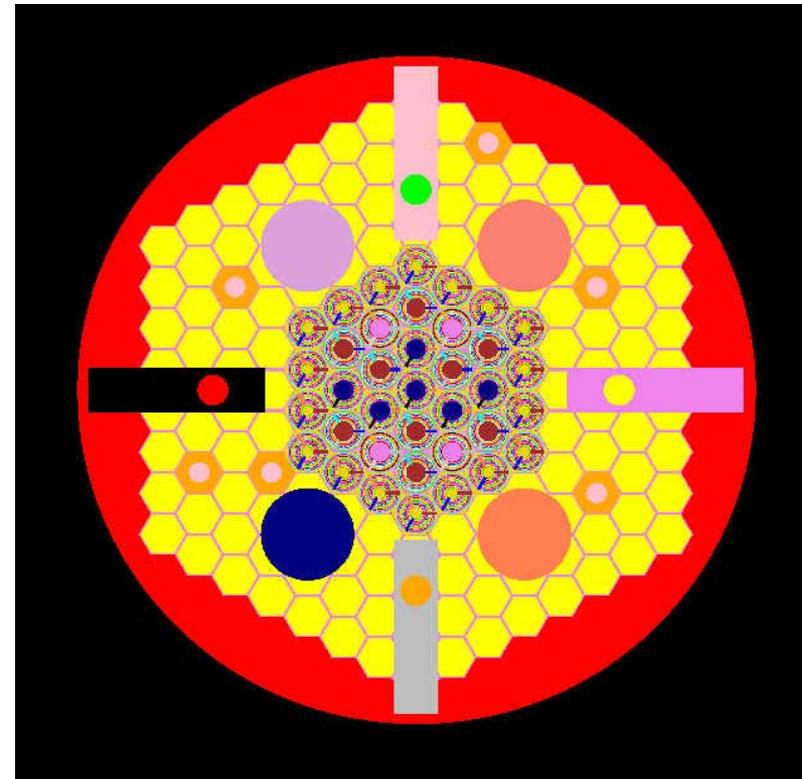
-distributeur : CEA/SERMA/LEPP

- code 3D Monte Carlo, transport neutrons, photons, électrons et positrons

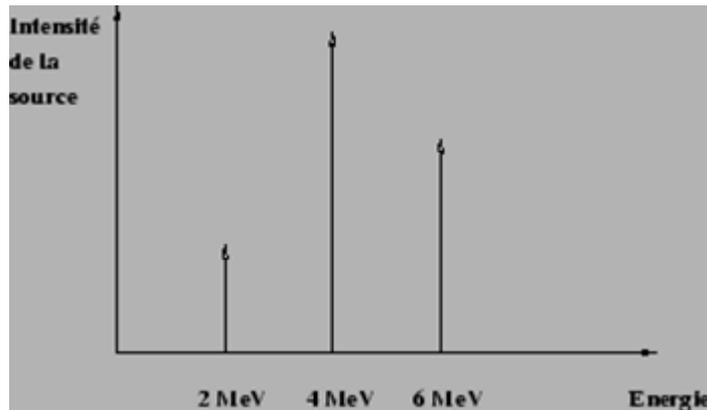
- applications principales : criticité-neutronique, instrumentation-protection (calcul de flux, courants de particules, taux de réaction)

- langage : C, C++

Exemple de géométrie (RJH)



Source en trois points: 1 en 2 MeV, 3 en 4 MeV et 2 en 6 MeV \Rightarrow trois contributions :
la première source a une norme de $1/(1+3+2)=1/6=0.167$, la seconde une norme de
 $3/6=0.5$ et la dernière une norme de $2/6=0.333$)



```
LIST_SOURCES
3
SOURCE INTENSITY 0.167 NEUTRON
PUNCTUAL 0 0 0
ANGULAR_DISTRIBUTION ISOTROPIC
ENERGETIC_DISTRIBUTION
SPECTRE MONOCINETIQUE 2
TIME_DISTRIBUTION DIRAC 0.
FIN_SOURCES
SOURCE INTENSITY 0.5 NEUTRON
PUNCTUAL 0 0 0
ANGULAR_DISTRIBUTION ISOTROPIC
ENERGETIC_DISTRIBUTION
SPECTRE MONOCINETIQUE 4
TIME_DISTRIBUTION DIRAC 0.
FIN_SOURCES
SOURCE INTENSITY 0.333 NEUTRON
PUNCTUAL 0 0 0
ANGULAR_DISTRIBUTION ISOTROPIC
ENERGETIC_DISTRIBUTION
SPECTRE MONOCINETIQUE 6
TIME_DISTRIBUTION DIRAC 0.
FIN_SOURCES
FIN_LIST_SOURCES
```

```
LIST_SOURCES
1
SOURCE INTENSITY 1
NEUTRON
PUNCTUAL 0 0 0
ANGULAR_DISTRIBUTION
ISOTROPIC
ENERGETIC_DISTRIBUTI
ON
SPECTRE RAY_SPECTRE
3
2 1
4 3
6 2
TIME_DISTRIBUTION
DIRAC 0.
FIN_SOURCES
FIN_LIST_SOURCES
```

REPONSES

nb(réponses)

```
*      FLUX type_de_particule
*      DOSE_ANS77 type_de_particule
*      COURANT type_de_particule
*      REACTION type_de_particule
*      DEPOSITED_ENERGY type_de_particule
*      RECOIL_ENERGY type_de_particule
      Données complémentaires du taux de
      réaction
```

...

FIN_REPONSES

- flux volumique : par défaut, valeurs intégrées sur le volume (neutron.cm/s) ; si volume connu (neutron/(cm².s) ;
- flux surfacique : par défaut, valeurs intégrées sur la surface (neutron/s) ; si surface connue (neutron/(cm².s) ;
- flux ponctuel : (neutron/(cm².s) ;
- courant : comme pour un flux surfacique ;
- dépôt d'énergie dans la matière ou des énergies de recul
- taux de réaction : comme pour un flux, mais avec le facteur de conversion (flux,taux) ;
- débit d'équivalent de dose : rem/h.

MCNP (Monte Carlo N-Particle)

- distributeur : Los Alamos National Laboratory (LANL)
- code 3D Monte Carlo, transport neutrons, photons, électrons
- origine : directement lié au projet Manhattan (particules neutres au début), fait l'objet d'un développement continu depuis les années 40, ne nécessite pas de recompilation pour être utilisé
- outre les phénomènes physique pris en compte pour l'interaction rayonnement-matière, dispose d'outils statistiques pour tester la convergence mathématique du résultat
- applications principales : interaction rayonnement-matière, neutronique, criticité, instrumentation, radioprotection santé

GEANT

- distributeur : CERN
- code 3D Monte Carlo, particules suivies : photons, électrons, hadrons, ions
- se présente sous la forme d'une bibliothèque de données et d'outils que l'utilisateur peut assembler suivant ses besoins ; dernière version écrite en C++
- applications principales : recherche en physique des particules, physique des hautes énergies, radiation et espace, médical (plateforme GATE : Geant4 Application for Tomographic Emission), transfert de technologie



EGS4/EGSnrc, PENELOPE, OUTILS « MAISON »

EGS4/EGSnrc (Electron Gamma Shower)

- distributeur : Stanford Linear Accelerator Center (SLAC), Californnie, USA
- code 3D Monte Carlo, transport électron/photon, gamme d'énergie [qq keV – TeV]
- langage MORTRAN (basé sur l'utilisation de macro-instructions) à compiler systématiquement en FORTRAN \Rightarrow code compact et facile d'utilisation
- calcul en deux phases : génération des bibliothèques puis simulation
- applications principales : médical, métrologie des rayonnements, dosimétrie

PENELOPE (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons)

- distributeur : F. Salvat et al., Université de Barcelone
- code 3D Monte Carlo, transport électrons/positrons puis photons, gamme d'énergie [100 eV – 1 GeV], pas de traitement des réactions photonucléaires
- langage FORTRAN 77
- applications principales : métrologie des rayonnements, dosimétrie

Outils « maison » (développement labo)

EMEFF (calcul de fonction de transfert en spectrométrie gamma)

MODHERATO (MODélisation Haute Energie pour la Radiographie et la Tomographie – reconstruction d'image par atténuation en ligne droite à partir d'un signal détecteur calculé par Monte Carlo (MCNP) ou par analytique))

OPERA (MCNP + introduction des réactions photonucléaires (γ, n) , $(\gamma, 2n)$, (γ, f) , (γ, p) ...)

\rightarrow Nombreux et variés, présentent l'avantage d'être vraiment adaptés au problème posé et évolutifs dans le domaine concerné, et l'inconvénient d'une difficulté de généralisation



energie atomique • énergies alternatives

Le code MCNP en 4 slides



EFMMIN 2011

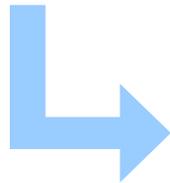
- Acronyme de Monte-Carlo N-Particle
- Développement LANL, origine projet Manhattan
- Transport des particules : neutrons, photons, électrons
- Géométrie 3-D (avec outil de visualisation interactif de coupes)
- Bibliothèque de sections efficaces très complète
- **LA Référence Internationale en e, γ ,n**
- Diffusion gratuite : <http://www.nea.fr>
- Grande portabilité (Unix, Windows...)
- Support utilisateur :
 - ✓ Documentation très complète
 - ✓ Forum internet (très actif) : www-xdiv.lanl.gov/x5/MCNP/index.html
 - ✓ Formations assurées par Los Alamos (y compris en Europe)
 - o Introduction : 1 semaine
 - o Perfectionnement : 1 semaine
- o Versions 4C2, 5 (orienté médical, dosimétrie), X (hautes énergies 100 GeV e, γ
– « Mesh Tallies »)

Domaine énergétique (→ version 4C2) :

- photons de 1 keV à 1 GeV
- électrons de 1 keV à 1 GeV
- neutrons de 10^{-11} MeV à 20 MeV

Unités :

- longueurs en cm
- énergie en MeV
- temps en shake (1 shake = 10^{-8} s)
- densité en g.cm^{-3}
- concentration (densité atomique) en 10^{24} atomes par cm^3
- « activité » en particule source



Tous les résultats sont donnés par particule-source

Fonctionnement de MCNP :

- Nécessite un fichier d'entrée (*input*) contenant les informations sur :
 - les volumes
 - les surfaces
 - les données matériaux (matériaux + données physiques correspondantes)
 - les sources (type de particule-source, énergie, position...)
 - le mode de calcul (type de particule(s) à suivre)
 - la ou les fonction(s) réponse(s) (= « *tally* »)
 - un contrôle du temps de calcul (CTME minutes ou NPS nb de particules-source tirées)
- Exécution via une ligne de commande

```
mcnp i=input o=output xs=data
```

- Résultats dans fichier texte *output* auto incrémenté (par défaut *outp*, *outq*, *outr*, etc) ou spécifié
- Un fichier binaire auto incrémenté *runtp* est systématiquement créé, il sert de mémoire tampon toutes les 15 mn (par défaut) et à réaliser des reprises de calcul (mcnp c i=cont.bat r=runtp...)
- Pour les versions de MCNP < 5, le nombre de caractères des noms de fichier est limité à 8
- En cours de calcul, CTRL C permet d'accéder à un résultat intermédiaire, voire d'arrêter proprement le calcul

STRUCTURE DU FICHER : 3 blocs, pas d'ordre au sein de chaque bloc

titre

bloc 1 : définition des volumes

délimiteur par un saut de ligne

bloc 2 : définition des surfaces

délimiteur par saut de ligne

bloc 3 : les autres données

définitions mode de calcul

définitions des matériaux

définitions des sources

définitions des histogrammes (*tally*)

définition du nombre de particules simulées, du temps limite

C ceci est un commentaire (il y a un espace après le C)

Données MCNP \$ Ceci est un autre commentaire

Données MCNP &

Continuation de la ligne précédente

Données MCNP

 Continuation de la ligne précédente (il y a 5 blancs)

1 ligne = 81
caractères maxi

pas de différence
MAJ-minuscule

commentaires

continuation de ligne



energie atomique • énergies alternatives

Exemples et étude de cas