

TRIPOLI-4 : CODE DE TRANSPORT MONTE CARLO FONCTIONNALITES ET APPLICATIONS

J.P. Both, Y.K. Lee, A. Mazzolo, Y. Pénéliou, O. Petit, B. Roesslinger

Commissariat à l'Energie Atomique
Direction de l'Energie Nucléaire
Service d'Etudes de Réacteurs et de Modélisation Avancée
Centre d'Etudes de Saclay
91191 Gif sur Yvette Cedex, France

1. Introduction

Tripoli-4¹ est un code à 3D mettant en œuvre la méthode Monte Carlo pour simuler le transport des neutrons, photons, électrons et positrons. Il fait suite aux versions précédentes Tripoli-1, Tripoli-2² et Tripoli-3², dont le développement a commencé au début des années 1970. Si les concepts des versions antérieures ont été largement repris, un certain nombre de caractéristiques fondamentales nouvelles (géométrie combinatoire, sections efficaces ponctuelles, calculs de perturbation, parallélisme...), ont été incorporées. Le code est utilisé principalement pour quatre domaines d'applications : les études de protection, les études de criticité, les études de cœurs de réacteurs et les études d'instrumentation.

2. Structure du code et langages

Tripoli-4 a été complètement réécrit avec de nouvelles méthodologies - l'orientation objet et des langages de développement nouveaux - C et C++. Il se divise en six bibliothèques fonctionnelles : une bibliothèque de géométrie (écrite en C), une bibliothèque de lecture des sections efficaces dérivée des routines Fortran d'entrées/sorties du système NJOY, une bibliothèque de gestion de la mémoire (en C++), une bibliothèque de simulation (en C++) et deux bibliothèques dédiées au parallélisme.

3. Format des sections efficaces

Tripoli-4 peut utiliser trois formats différents pour les sections efficaces:

- ❖ Une représentation ponctuelle¹ produite par le système NJOY pour les sections efficaces de neutron et de photon. Les fichiers de sections efficaces sont mis au format binaire portable XDR.
- ❖ Une représentation en sections efficaces multigroupes homogénéisées et autoprotégées produites par le code de cellule³ Apollo-2 ou en sections efficaces multigroupes homogénéisées produites par Tripoli-4 lui-même⁴ pour les sections efficaces de neutron.
- ❖ Une représentation multigroupe avec tables de probabilités⁵ pour les sections efficaces de neutron.

Les sections efficaces ponctuelles et les sections efficaces multigroupes peuvent être, indépendamment ou ensemble, utilisées selon le cas d'application. Les sections efficaces ponctuelles des évaluations ENDF/B-VI, JEF-2, JEFF-3, JENDL3 peuvent aussi être, indépendamment ou au choix de l'utilisateur, utilisées selon les besoins. Les sections efficaces calculées avec tables de probabilités permettent de mieux traiter le domaine non résolu. Avec des liaisons chimiques différentes, les sections efficaces de thermalisation des neutrons dans l'hydrogène pour l'eau, l'hydrogène pour le polyéthylène, le deutérium pour l'eau lourde et le carbone pour le graphite, sont préparées en fonction de la température.

4. La géométrie

La géométrie de Tripoli-4 donne à l'utilisateur trois choix possibles de description de la configuration physique du problème étudié. Il est en effet possible de définir des volumes à l'aide de formes de base données (sphère, boîte, cylindre, cône, parallélépipède quelconque, prisme hexagonal et tore) ou/et par le biais d'équations de surfaces (plan quelconque, sphère, cylindre d'axe quelconque, quadrique quelconque ...etc.) selon le cas d'application. Il est ensuite possible de combiner ces volumes pour créer des parties spécifiques de la géométrie. Tripoli-4 offre divers types d'opérateurs à cet effet : opérateurs d'union, d'intersection, d'écrasement, de translation, de rotation ... etc.

Le code permet également la mise en place de réseaux (en parallélépipède ou hexagonal), de mixage de réseaux ainsi que de réseaux de réseaux⁶ pour traiter les objets répétitifs (assemblage de crayons combustibles⁷, cœur du réacteur, cas du stockage, compteurs He-3 dans un polyéthylène²⁰ ...etc.)

Pour simplifier les préparations des coordonnées des volumes, les mots V-ORIG et M-ORIG permettent de donner les positions des volumes par rapport au centre d'un volume prédéfini ou au centre de la maille cité du réseau prédéfini, et non par rapport à l'origine O du repère.^{6,7}

Les volumes et les mailles fictives donnent des souplesses pour retoucher une géométrie complexe. La visualisation graphique en couleur à 2D permet de contrôler la construction des données géométriques pas à pas. Les conditions aux limites incluent fuite, réflexion, translation et cosinus.

5. Description des sources

La source totale réunit un ensemble de sources élémentaires, chacune d'elles étant donnée sous forme factorisée : $S(r, E, \Omega, t) = C \times F(r) \times G(E) \times H(\Omega) \times T(t)$

où r désigne la variable d'espace, E l'énergie, O la direction et t le temps.

Les lois entrées peuvent être soit analytiques soit tabulées. Pour la partie géométrique de la description, si la source n'est pas ponctuelle, un maillage est associé à la définition de la source (défini par l'utilisateur pour les lois tabulées ou calculé par le code dans le cas de lois analytiques). Les coordonnées spatiales pour la description peuvent être cartésiennes, cylindriques ou sphériques.

Concernant la définition du spectre en énergie, l'utilisateur a le choix entre : raies, bandes spectre de Watt, de Maxwell, spectre tabulé ou analytique. Une intensité globale peut être imposée par l'utilisateur. L'intensité réelle de la source pour la simulation peut être différente si le domaine de simulation en énergie est limité par des bornes inférieures et supérieures.

En cas de pondération, les parties spatiales et énergétiques réellement utilisées pour la simulation sont couplées. Depuis une norme "biaisée" des sources est utilisée dans ce cas au lieu de la norme "naturelle".

6. Biaisage de la simulation

Afin d'améliorer la précision sur les résultats obtenus et le facteur de qualité de la simulation, Tripoli-4 utilise une combinaison de techniques de réduction de variance qui conduisent à un "biaisage" de la simulation. Cette simulation "artificielle" est basée sur le calcul d'une fonction importance, qui permet ensuite d'associer à chaque point de l'espace des phases un poids de référence correspondant. Cette fonction importance peut s'écrire sous forme factorisée de la manière suivante :

$$I(r, E, \Omega, t) = I_s(r, E) \times I_e(E) \times I_d(r, E, \Omega) \times I_t(t)$$

où l'on a mis en évidence respectivement les parties spatiale, énergétique, angulaire et temporelle.

Le code peut générer une carte d'importance automatiquement^{8,9} : après définition des détecteurs discrets ou d'une surface détectrice de forme analytique et discrétisation de l'espace des phases (E et r), le calcul est fondé sur l'algorithme de Dijkstra. La partie spatiale peut avoir une forme analytique adaptée à des géométries spécifiques : cartésiennes, cylindriques ou sphériques. Il est aussi possible d'affiner la discrétisation en certaines zones particulièrement sensibles par le mot clef 'WINDOW'.

Le biaisage automatique est valable pour les applications courantes en protection et en instrumentation et, dans le cas d'application complexe, l'ajustement des sections efficaces biaisées en fonction d'énergie et de matériaux est aussi possible par le paramètre de biaisage k. Pour obtenir les flux dans une gamme d'énergie étendue, la pondération énergétique est envisageable. Tripoli-4 fournit aussi le biaisage temporel pour des calculs cinétiques.

Les visualisations graphiques pour contrôler les cartes d'importance et les lieux de collisions par une coupe à 2D de la géométrie sont aussi disponibles et elles permettent d'examiner les tendances et /ou les défauts de transport des particules.

7. Principe de la simulation

D'une part, en raison des techniques de pondération utilisées, chaque particule simulée possède un poids de simulation associé. Le calcul de la fonction importance nous permet d'autre part d'obtenir un poids de référence (qui s'ajuste automatiquement au début de la simulation). L'échantillonnage de la chaîne de transports-collisions subis par la particule se fait ensuite de manière à maintenir le rapport de

ses deux poids le plus proche possible de 1. A cet effet on met en place différentes techniques : biaisage exponentiel pour le transport, splitting, roulette russe, etc.

Tripoli-4 simule également la cascade électromagnétique, en suivant électrons et positrons¹⁰. Elle est basée sur le formalisme de diffusion multiple de Goudsmit-Saunderson. Les phénomènes physiques pris en compte sont : diffusion de photon cohérente et incohérente, effet photo-électrique, production et annihilation de paires. Pourtant le transport à basse énergie (inférieure à 1 MeV) reste à développer pour les électrons et positrons.

8. Quantités calculées et estimateurs

Tripoli-4 permet le calcul des grandeurs d'intérêt suivantes : flux volumique/surfacique/ponctuel, courant, taux de réaction, débit d'équivalent de dose, dépôts d'énergie, énergie de recul, facteur de multiplication effectif.

Plusieurs estimateurs peuvent être utilisés : pour le flux volumique par exemple, les estimateurs classiques "collision" et "corde" sont disponibles. Ces estimateurs permettent aussi de calculer le flux volumique dans les mailles d'un réseau simple, des réseaux mixtes ou des réseaux de réseaux.

Pour le facteur de multiplication effectif, des estimateurs spécifiques sont implémentés : KSTEP (nombre de neutrons générés pour chaque fission), KCOLL (nombre moyen de neutrons de fission collectés pour chaque interaction), KTRACK (nombre moyen de neutrons de fission collectés pour chaque parcours dans un fissile) et KIJ (en cas de utiliser des sections efficaces multigroupes autoprotégées, calcul de la première valeur propre de la transposée de la matrice de fission).

9. Fonctionnalités spécifiques

Nous présentons ici une liste non exhaustive de fonctionnalités fournies par le code Tripoli-4 :

- ❖ *Perturbations* : il est possible d'estimer des perturbations¹¹ de concentrations, sections efficaces par la méthode des échantillons corrélés.
- ❖ *Mode parallèle* : un calcul peut être lancé en mode parallèle¹² sur un réseau d'ordinateurs (non nécessairement homogène) ou une machine massivement parallèle. Tripoli-4 prend en compte les spécificités de ce mode de simulation par le soin apporté à l'implémentation du générateur de nombres aléatoires et du critère de convergence dans les calculs de criticité.
- ❖ *Score conditionnel* : il est possible de sélectionner les contributions des particules conditionnellement à leur traversée de certains volumes. Ceci peut donner une idée du chemin préférentiel emprunté par les particules et permet donc d'améliorer la pondération.
- ❖ *Calcul de reprise* : en mode séquentiel, il est possible de stopper une simulation pour la reprendre ultérieurement. L'état complet du système (sources, générateur aléatoire, ...) est automatiquement sauvegardé.

- ❖ *Bandes de collisions* : pour des volumes donnés, les caractéristiques complètes des particules les traversant sont stockées, permettant à l'utilisateur le calcul de nouveaux scores dans ces volumes sans nouvelles simulations.
- ❖ *Calcul couplé neutron-gamma* : enchaînement automatique d'un calcul neutron, d'une production gamma secondaire et d'un calcul gamma (gamma prompt de fission, gamma de capture, gamma des produits de fission...) en zones fissiles et non-fissiles.
- ❖ *Calcul couplé neutronique-propagation* : enchaînement automatique d'un calcul en zones fissiles venant alimenter un calcul de protection/propagation. La gestion des poids et taille de la population de neutrons est automatique.

10. Applications

Le code Tripoli-4 a pour but de traiter quatre grands domaines d'applications :

* *La protection* : propagation de particules sur de longues distances et avec de fortes atténuations de flux ; ce sont des problèmes à source en milieu non multiplicateur, en régime stationnaire ou dépendant du temps. Par exemple : détermination des taux de réaction des dosimètres pour neutron au niveau des capsules de surveillance et de la cavité dans un réacteur REP¹³; détermination des débits de dose gamma au niveau des balises à 200 m d'un bâtiment d'entreposage des GV démantelés¹⁴.

* *La sûreté / criticité* : qui requiert la détermination du facteur de multiplication effectif K_{eff} d'une installation ou simplement d'une configuration fissile. Par exemple détermination du K_{eff} d'un château de transport des assemblages à sec et, en cas d'accident, immergé dans l'eau¹⁵; détermination du K_{eff} d'une configuration en réseaux pour des objets métalliques^{16,17}.

* *La neutronique* : comportement des neutrons dans un système fissile critique ou sous-critique à source : avec ou sans source fixe en régime stationnaire. Par exemple : détermination d'une carte de puissance crayon par crayon dans un réseau de crayons de combustible ; détermination de l'efficacité des barres et calcul des caractéristiques fondamentales des sections efficaces¹⁸.

* *L'instrumentation* : où l'on s'intéresse en particulier à la détection et à l'interprétation d'un signal ou la conception d'un dispositif expérimental. Par exemple : (1) détermination des flux rapides et des échauffements gamma dans une position d'irradiation du cœur expérimental en comparant avec des mesures calorimétriques¹⁹; (2) détermination des rendements de comptage d'un système de compteurs He-3 en utilisant des modérateurs d'épaisseurs différentes²⁰; (3) détermination des indications d'un 'Bonner sphere - remmeter' et estimation des contributions de son support en béton en utilisant les calculs de perturbation²¹; (4) détermination des réponses neutroniques et photoniques d'un dosimètre individuel à albédo²¹ placé contre un 'phantom' par quatre pastilles thermoluminescentes (TLD), deux à base de ⁷LiF et les deux autres de ⁶LiF.

Les besoins en calcul de Monte Carlo, auxquels des études réalisées avec Tripoli ont répondu, s'étendent à des domaines de plus en plus nombreux :

* *Les réacteurs de puissance* : REP, REB, RNR, HTR, RBMK, EPR....

- * *Les réacteurs expérimentaux* : OSIRIS, ORPHEE, RHF, ULYSSE, RJH, ANSTO-RRR...
- * *Le cycle de combustible* : fabrication, entreposage, transport, stockage, retraitement, déchets...
- * *La déconstruction et les déchets* : UNGG, Réacteur Brennilis, Chooz-A, TRITON, SATURNE
- * *La fusion thermonucléaire* : Tore Supra, ITER, LMJ ...
- * *Les systèmes hybrides* : accélérateur / réacteur sous-critique.
- * *Les applications médicales et industrielles* : OSIRIS/BNCT, ¹⁹²Ir brachytherapy, irradiateurs...
- * ...

11. Validations et qualifications

Le dossier de validation et de qualification du code Tripoli-4 est constitué de plusieurs centaines de benchmarks disponibles en interne CEA et en externe. En protection, une dizaine de benchmarks ont été réalisés à partir de la base SINBAD²². En criticité, environ 250 benchmarks ont été traités à partir de la base ICSBEP²³. En cinétique, une dizaine de benchmarks de ‘Livermore Pulsed sphere’ ont été calculés²⁴.

La participation active de Tripoli-4 aux benchmarks internationaux dans les domaines ‘fluence-cuve’, ‘crédit burnup’, neutronique – UOX et MOX, et récemment dans les applications d’instrumentation et de dosimétrie^{19, 20, 21} permettent de compléter la validation/qualification des fonctionnalités du code, de contribuer à la rénovation des données nucléaires (sections efficaces, fonctions réponses, spectre de fission ...) et d’améliorer la qualité des résultats de calculs.

12. Conclusions

Le code Tripoli-4 a été développé et qualifié dans des cadres d’actions de R&D établis entre le CEA, EDF, FRAMATOME et COGEMA. En 2003, Tripoli-4 est mis à disposition des utilisateurs auprès de la banque de données de l’AEN/OCDE.

Plusieurs pays ont développé des codes Monte Carlo aux fonctionnalités similaires à celles de Tripoli-4 comme les codes américains MCNP, VIM et TART, le code anglais MCBEND, le code russe MCU, le code japonais MVP. L’évolution actuelle de la puissance de calcul et de la taille mémoire notamment des PC permet aux utilisateurs de ces codes Monte Carlo de traiter des problèmes de plus en plus complexes : plusieurs centaines de millions d’histoires de particules et un million de volumes dans une simulation courante. Aussi, les capacités que présentent ces codes Monte Carlo de modélisation aisée, facilement modifiable, de vérification efficace des modélisations effectuées et des résultats obtenus, revêtent une importance de plus en plus grande.

Parallèlement à l’implémentation de nouvelles fonctionnalités physiques, le code Tripoli-4 s’enrichit de fonctionnalités de pré-traitement des données et de post-traitement des résultats, rendant ainsi son utilisation à la fois plus fiable et plus conviviale.

Références :

- (1) J.P. Both, H. Derriennic, B. Morillon et J.C. Nimal, Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding (ICRS), Arlington, TX, pp. 373, April, 24-28, 1994.
- (2) <http://www-rsicc.ornl.gov/codes/ccc/ccc2/ccc-272.html>
<http://www.nea.fr/html/dbprog/tripoli-abs.html>
- (3) Y. K. Lee, A. Monnier, J.P. Both et J.C. Nimal, The 5th Int. Conf. on Nuclear Criticality Safety, ICNC'95, Vol. 1, pp. 3.12, Albuquerque, New Mexico, Sep. 17-21, 1995.
- (4) J.P. Both, Y.K. Lee et P. Finck, M&C+SNA'1997, pp.439, Saratoga, NY, Oct. 5-9, 1997.
- (5) J.C. Nimal, P. Ribon, S.H. Zheng et al., Proceedings of the 8th ICRS, pp. 398, 1994.
- (6) Y.K. Lee, ICNC'2003, Tokai-mura, Japan, Oct. 20-24, 2003.
- (7) Y.K. Lee, Monte Carlo 2000, pp. 809, Lisbon, Portugal, Oct. 23-26, 2000.
- (8) J.P. Both, J.C. Nimal et T. Vergnaud, Progress in Nuclear Energy, 24, pp.273, 1990.
- (9) J.P. Both, in Advanced Monte Carlo Computer Programs for Radiation Transport, ed. Nuclear Energy Agency, 1993.
- (10) Y. Pénéliou, Monte Carlo 2000, pp. 129, Lisbon, Portugal, Oct. 23-26, 2000.
- (11) J.P. Both, ICRS'9, Journal of Nuclear Science and Technology, Sup. 1, pp. 420, Mar. 2000.
- (12) Y. Pénéliou et J.P. Both, M&C'1999, pp. 411, Madrid, Spain, Sep. 27-30, 1999.
- (13) Y.K. Lee, M&C'2003, Gatlinburg, TN, USA, Apr. 6-11, 2003.
- (14) Y. K. Lee et J.C. Nimal, Proc. 1996 ANS Topical Conf. on Radiation Protection and Shielding, pp.809, No. Falmouth, MA, USA, April, 21-25, 1996.
- (15) Y. K. Lee, The 12th Int. Conf. on the Packaging and Transportation of Radioactive Materials, PATRAM'98, Vol. 2, pp. 825, Paris, May 10-15. 1998.
- (16) Y.K Lee, S. Zheng, G. Néron, J.P. Both and Y. Pénéliou, ICNC'1999, pp. 1157, Versailles, Sep. 20-24, 1999.
- (17) E. Gagnier, Y.K. Lee, L. Aguiar and N. Vedrenne, ICNC'2003.
- (18) Y.K. Lee, G. Néron, J.P. Both, Y. Pénéliou and C. Diop, M&C + SNA'97, pp.253, 1997.
- (19) Y.K. Lee, J.C. David and H. Carcreff, 5th Int. Topical Meeting on Research Reactor Fuel Management, RRFM'2001, pp.147, Aachen, Germany, Apr. 1-3, 2001.
- (20) P.M.J. Chard, ESARDA (European SAFeguards Research and Development Association) NDA Working group - Monte Carlo Simple Case Benchmark, Oct.2002.
- (21) <http://www.nea.fr/download/quados/quados.html> Workshop 'Intercomparison on the usage of computational codes in radiation dosimetry', Bologna, Italy, Jul.14-16, 2003.
- (22) <http://www.nea.fr/html/science/shielding/sinbad/sinbadis.htm> SINBAD - an International Database for Integral Shielding Experiments.
- (23) <http://icsbep.inel.gov/icsbep/> ICSBEP - The International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project

(24) C. Wong, 'Livermore Pulsed Sphere Program', UCRL-51144, Rev. I, 1972.