

Soutenance de stage : Développement d'une méthode générique de calcul d'activation D1S applicable aux codes de Monte Carlo

Jonathan DUFOUR

22/06/2022



Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Éléments théoriques
- 3 Méthodes utilisées
- 4 Résultats obtenus
- 5 Discussion des résultats
- 6 Conclusion

Le CEA et l'IRFM



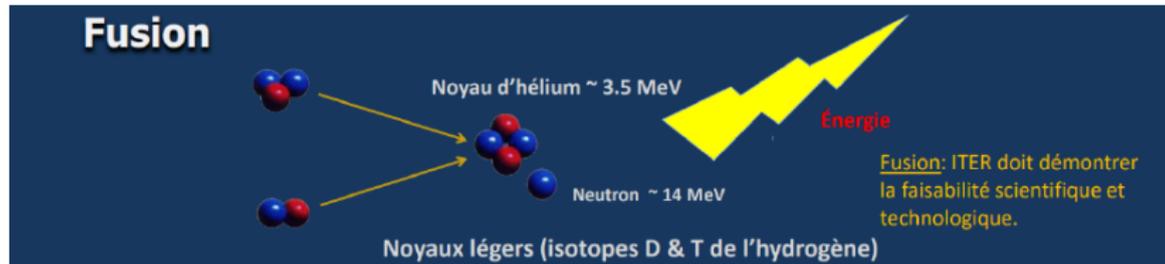
L'IRFM (Institut de Recherche sur la Fusion par confinement Magnétique) fait partie dans l'organisation du CEA de la DRF (Direction de la Recherche Fondamentale) et se trouve sur le centre de Cadarache. Il est responsable de l'exploitation du réacteur WEST et de la participation française aux projets ITER et WEST.

La fusion

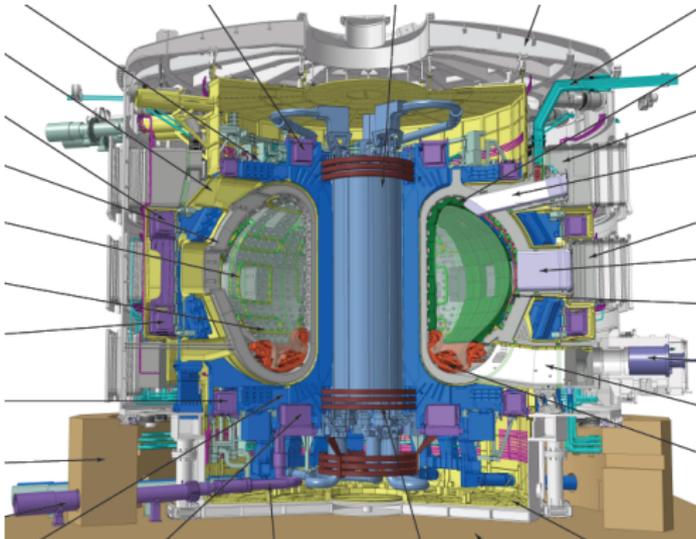
Solutions pour atteindre la fusion : Tokamak + réaction deutérium-tritium

MAIS forte production de neutrons à 14 MeV

=> Activation des matériaux



Projet ITER



Objectifs d'ITER

- Faisabilité technique
- Q de la réaction = 10
- Module de génération tritium

Le réacteur sera donc équipé des nombreux systèmes de diagnostics.

Projet ITER

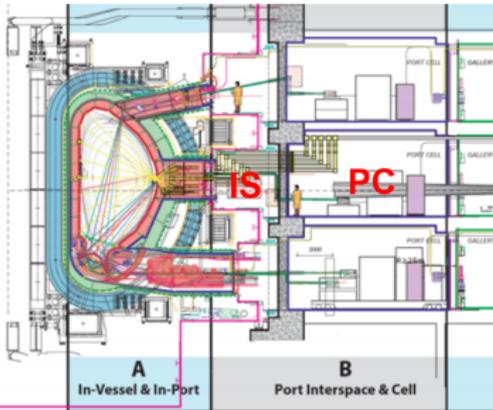


Figure: IS : Avant le mur biologique. PC : après le mur biologique

Maintenance nécessaire => intervention dans l'IS. Limites de débit de dose et de la dose annuelle collective d'ITER (RPS)

- 100 microSv/h, 12 jours après l'arrêt du plasma dans IS
- 10 microSv/h, 1 jour après l'arrêt du plasma dans PC
- Dose collective annuelle: 500 mSv

Objectifs

Importance du calcul de débit de dose

→ Utilisation de codes de Monte Carlo dont les sources sont modifiées

→ Possibilité d'envisager de modifier plutôt les bases de données amont nécessaires aux codes sans toucher aux sources des codes

→ Démonstration qu'en remplaçant les données de production des photons existantes par des données appropriées, la comparaison avec un code modifié donne des résultats égaux

Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Éléments théoriques**
- 3 Méthodes utilisées
- 4 Résultats obtenus
- 5 Discussion des résultats
- 6 Conclusion

Interactions des neutrons avec la matière

Les neutrons peuvent interagir selon les réactions suivantes

- Diffusion élastique
- Diffusion inélastique
- Émission de neutrons
- Émission de protons, de deuton, de triton ou d'alpha
- Capture radiative

Certaines de ces réactions émettent des photons qui eux aussi réagissent :

- Effet photoélectrique
- Production de paires
- Diffusion Compton
- Diffusion incohérente
- Diffusion cohérente
- Cascade électromagnétique

Activation et Flux

Les grandeurs physiques à prendre en compte sont alors : le flux neutronique $\phi = n * v$ et le taux de réaction $\tau = \sigma * \phi$ avec σ la section microscopique du noyau pour la réaction d'intérêt.

On calcule ensuite le nombre de réactions d'un type donné par unité de volume et par seconde

$$T = N^{act} * \sigma * \phi = \Sigma^{act} * \phi$$

avec $\Sigma = N * \sigma$

Equation de Bateman

Evolution de la population du radionucléide par l'équation de Bateman (équation de bilan entre création et disparition en fonction du temps) :

$$\frac{\partial N_k(t)}{\partial t} = \sum_f \gamma_{K,f} N_f(t) \tau_f(t) \quad [1]$$

$$+ \sum_i \tau_i(t) N_i(t) b_{i \rightarrow K} \quad [2]$$

$$+ \sum_j \lambda_j N_j(t) b_{j \rightarrow K} - (\tau_K + \lambda_K) N_K \quad [3]$$

[1] Fission des espèces pères

[2] réactions sur les espèces pères

[3] Décroissance radioactive et par réaction

Le processus principal concerné : $^{59}\text{Co} + n \Rightarrow ^{60}\text{Co}$ puis
 $^{60}\text{Co} \Rightarrow ^{60}\text{Ni} + \beta^- + \gamma$ (ici pas de fission à prendre en compte)

Facteur de temps

Besoin de prendre en compte les émissions retardées plutôt que les émissions promptes → Connaître la proportion des noyaux produits à émettre leur photon au temps donné.

Le facteur est ainsi calculé à une phase m :

$$h^m = f^m(1 - e^{-\lambda_f T^m})[1] + h^{m-1}e^{-\lambda_f T^m}[2]$$

où f^m est l'intensité normalisée d'une phase m , T^m est sa durée, et λ_f est la période du nucléide considéré. [1] : production due à la phase m . [2] : décroissance des radionucléides de la phase $m-1$

Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Éléments théoriques
- 3 Méthodes utilisées**
- 4 Résultats obtenus
- 5 Discussion des résultats
- 6 Conclusion

Monte Carlo

La méthode Monte Carlo va pour chaque particule produite suivre un parcours calculé par le code. Déterminé de manière aléatoire, simulé physiquement comme un nuage de particules

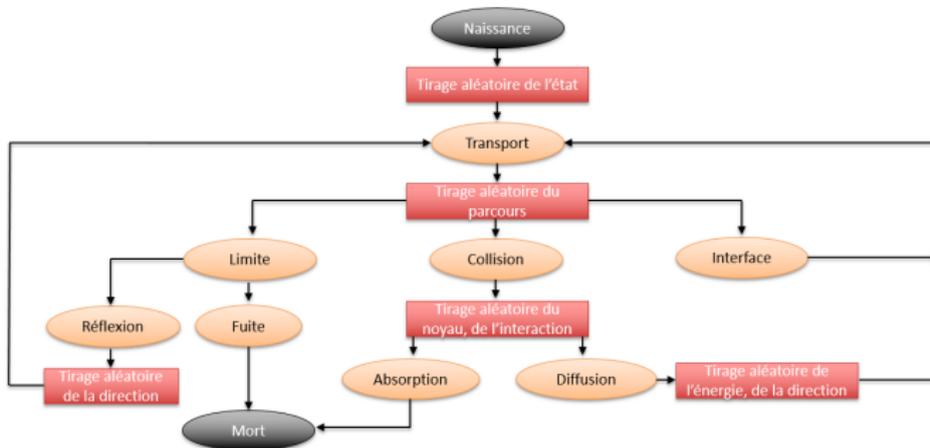


Figure: Histoire d'une particule

ENDF

Format de base de données nucléaires, un fichier par nucléide à simuler. Les fichiers contiennent :

- section efficace des différentes interactions possibles avec le noyau selon l'énergie
- particules émises lors de la réaction
- coefficients de production des particules ou noyaux résiduels produits
- distribution angulaire et spectre énergétique des particules ou noyaux résiduels émis

Codes de Monte Carlo

TRIPOLI-4 : développé par le CEA
calculs de transport de particules.
neutrons (1E-5eV-20MeV) + photons
(1keV-20MeV) + électrons et positrons
(limite basse 1 keV)
Calculs réalisés : Source fixe et
simulation critique.
Fonctionnement : batch de particules;
non-analog flight; roulette russe

OpenMC : Développé par le MIT.
Serpent2 : Développé par le VTT
(Finlande).
MCNP 5 et 6 : Développé par le LANL
DIS-UNED-3.1 : code dédié au calcul
de dose en D1S

Tripoli-4

D1S (Direct 1 Step) et R2S (Rigorous 2 Step) sont deux méthodes utilisées par les codes Monte Carlo. R2S est la méthode existante pour Tripoli-4, et D1S est ce que l'on cherche à réaliser.

La méthode R2S : premier calcul de transport, puis activation des matériaux, ensuite relance un second calcul de transport avec les particules secondaires. Plus de calculs mais résultats plus précis sur modèle assez précis.

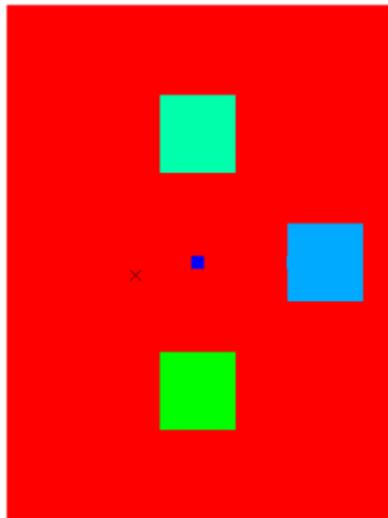
La méthode D1S : considérer les particules retardées comme des émissions promptes. Exécuter un seul calcul de transport. Appliquer ensuite des facteurs de temps. Résultats moins fins mais temps de calculs plus courts.

Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Éléments théoriques
- 3 Méthodes utilisées
- 4 Résultats obtenus**
- 5 Discussion des résultats
- 6 Conclusion

Étude de vérification

Sur Tripoli-4 on étudie le comportement de différents matériaux bombardés par une source de neutrons.



Bleu foncé : matériau à tester.
Vert et bleu clair : détecteurs de flux (vide). Rouge : vide
Petite taille pour réduire les effets de l'atténuation, bloc entouré pour étudier l'isotropie des émissions.

Bilans de neutrons

Validation du comportement des bases de données modifiées : bilans neutroniques. Réalisés à énergies différentes.

| Énergie (MeV) | Courant de sortie CourS | Création de neutrons CréaN | Absorption de neutrons AbsN | Relation de fermeture |
|------------------|-------------------------------|----------------------------------|-----------------------------------|---|
| 14 | 1.0340136 ± 0.00000134 | 0.04385 ± 0.00000135 | 0.009838 ± 0.000000282 | CourS + AbsN = $1 + \text{CréaN} \pm 0.000007$ |
| 10 | 0.994112 ± 0.00000102 | 0.000000 | 0.005888 ± 0.000000084 | CourS + AbsN = 1 ± 0.000001 |
| 1 | 0.999615 ± 0.000000102 | 0.000000 | 0.0003847 ± 0.000000022 | CourS + AbsN = 1 ± 0.0000001 |
| 0.1 | 0.999023 ± 0.000000101 | 0.000000 | 0.0009719 ± 0.0000000515 | CourS + AbsN = 1 ± 0.0000007 |

Cas d'étude

Premier isotope traité pour le remplacement de production de photons : Co59 se transformant en Co60 par capture photonique. Seuls les deux pics principaux ont été gardés.

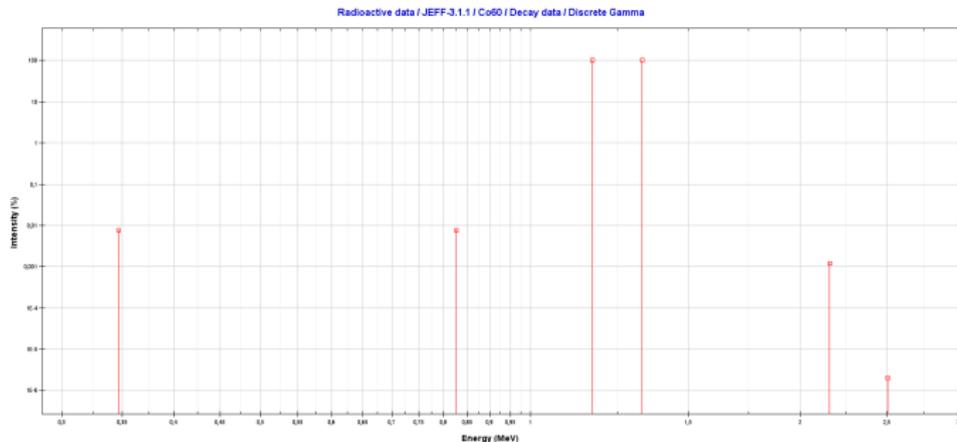


Figure: Spectre d'émission du Co60 en décroissance radioactive

Résultats étude

Après une première modification des fichiers du ^{60}Co on simule les premiers bombardements neutroniques et on compte les flux de photons (double pic reconnaissable)

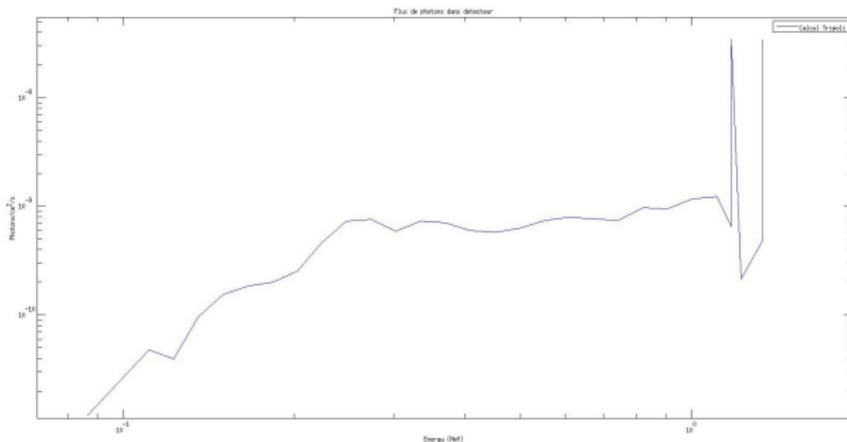


Figure: Flux de photons dans un des détecteurs

Scénario d'exploitation ITER

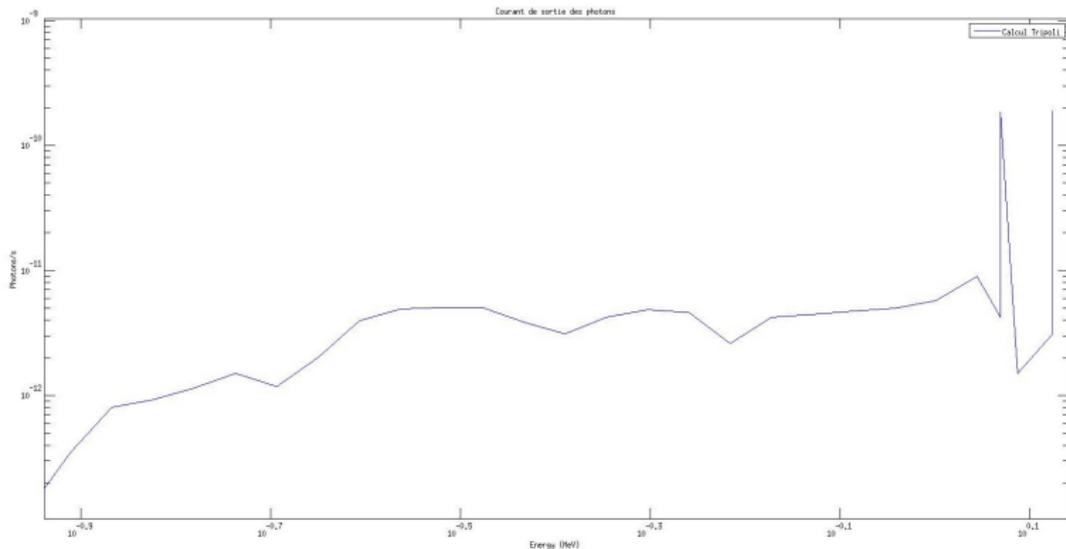
Les facteurs de temps appliqués correspondant au planning d'exploitation d'ITER

| Temps | Puissance de fusion (MW) | Répétition |
|-----------|--------------------------|------------|
| 2 ans | 2.68 | 1 |
| 10 ans | 20.6 | 1 |
| 0.667 ans | 0 | 1 |
| 1.325 ans | 41.5 | 1 |
| 3920 sec | 0 | 17 |
| 400 sec | 0.56 | 17 |
| 3920 sec | 0 | 3 |
| 400 sec | 700 | 3 |

- 1^{eres} années moyennées (isotopes à période longue)
- Deux dernières années distinguées entre fonctionnement/maintenance longue (périodes intermédiaires)
- Fin d'irradiation finement décrite (isotopes à période courte)

Résultats avec facteur de temps

On retrouve ici après applications des facteurs dans la base de données modifiée, le courant de sortie des photons, les deux pics sont toujours présents.



Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Éléments théoriques
- 3 Méthodes utilisées
- 4 Résultats obtenus
- 5 Discussion des résultats**
- 6 Conclusion

Comparaison D1S-UNED

La même simulation a ensuite été réalisée sur D1S-UNED, code de référence des calculs de dose d'ITER, pour évaluer les performances de la méthode.

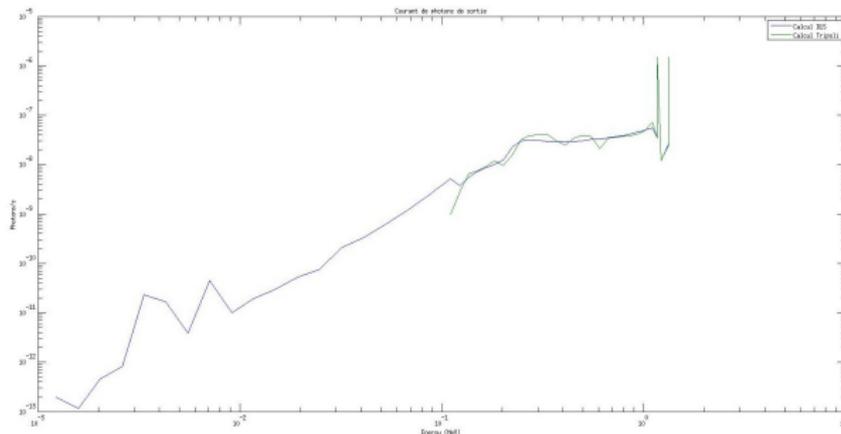


Figure: Courant de sortie des photons

Comparaison D1S-UNED

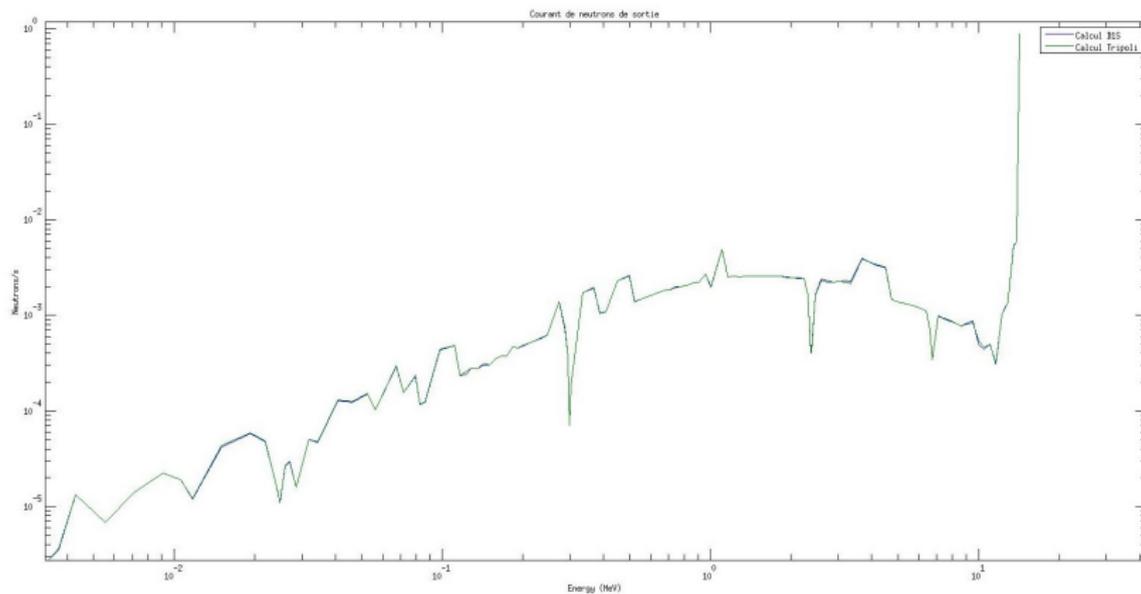


Figure: Courant de sortie des neutrons

Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Éléments théoriques
- 3 Méthodes utilisées
- 4 Résultats obtenus
- 5 Discussion des résultats
- 6 Conclusion**

Conclusion

Ce travail a pu montrer que la méthode D1S est applicable au code Tripoli-4, par modification des bases de données. La méthode garantit l'intégrité du code, et est validé par des codes dédiés à ce genre de calcul.

Avec cette méthode d'autres codes peuvent donc réaliser des calculs D1S de dose, sans modifier la source elle-même.

J'ai de plus pu travailler dans le domaine de la fusion, sujet qui me passionne, et a confirmé mon envie d'y travailler

Perspectives

Développer sur plus d'isotopes.

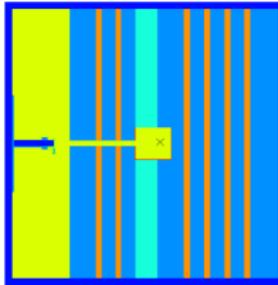
Géométrie plus complexe.

Bibliothèque ACE pour utilisation plus globale, adaptée à d'autres codes Monte Carlo.

Validation avec expérience FNG Dose réalisée par le Frascati Neutron Generator de l'ENEA (Italie).



(a)



(b)

Figure: Expérience FNG: (a)montage; (b)vue de coupe

Merci de votre attention
Avez-vous des questions ?

Annexe 1 : Calculs des facteurs de temps I

Taux de réaction :

$$R = \sum_i N_i^p(x_3) * \int (\sigma_i(E)\Phi(x_3, E)dE)$$

Activité :

$$A(x_3, t) = \lambda_f * N_f(x_3, t)$$

i les espèces radioactives, f noyau fille, p noyau père, N concentration, λ constante de désintégration.

Annexe 1 : Calculs des facteurs de temps II

On pose le flux

$$\Phi(x_3, E) = I * \phi(x_3, E)$$

où I est l'intensité de la source (n/s) et ϕ le flux par neutron source ($1/\text{cm}^2/\text{n}$). Avec cette décomposition, on écrit $R = I * S$ où :

$$S = \sum_i N_i^p(x_3) * \int (\sigma_i(E) \phi(x_3, E) dE)$$

Annexe 1 : Calculs des facteurs de temps III

Pour une irradiation :

$$N_f(x_3, t) = \frac{I * S(x_3)}{\lambda_f} * (1 - e^{-\lambda_f t}) + N_f(x_3, 0)e^{-\lambda_f t}$$

On utilise pour simplifier les calculs une normalisation avec une intensité nominale arbitraire I_{norm} et I_m l'intensité à la séquence m :

$$f^m = I^m / I_{norm}$$

Annexe 1 : Calculs des facteurs de temps IV

Pour une phase du scénario m:

$$N_f^m(x_3, t) = \frac{I^m * S(x_3)}{\lambda_f} * (1 - e^{-\lambda_f T^m}) + N_f^{m-1}(x_3, 0)e^{-\lambda_f T^m}$$

où T^m est la durée de la phase m. Sachant que la population du noyau radioactif est nulle au départ ($h^0 = 0$), la concentration peut s'écrire :

$$N_f(x_3, t) = N_f^m(x_3) = \frac{I_{norm} * S(x_3)}{\lambda_f} * h^m$$

Annexe 1 : Calculs des facteurs de temps V

où h^m est obtenue à partir de la relation de récurrence :

$$h^m = f^m(1 - e^{-\lambda_f T^m}) + h^{m-1}e^{-\lambda_f T^m}$$

On écrit donc :

$$\frac{A}{R} = \frac{\lambda_f * N_f(x_3, t)}{I * S(x_3)} = \frac{\lambda_f \frac{I_{norm} * S(x_3)}{\lambda_f} * h^m}{I * S(x_3)} = \frac{I_{norm}}{I} * h^m$$

On trouve ainsi le facteur de temps h^m qui permet de calculer l'activité à la fin du scénario d'irradiation.

Annexe 2 : fichier d'entrée Tripoli-4

Structure d'un code d'entrée Tripoli-4 :

- GEOMETRY
- COMPOSITION nb
- GEOMCOMP
- SOURCES_LIST
- GRID_LIST
- VOLSURF
- RESPONSES nb
- SCORE nb
- SIMULATION