

Etude des propriétés statistiques des estimateurs Monte Carlo (stage 5 mois)

Andrea Zoia^{1,*}

¹*Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives,
Direction de l'Energie Nucléaire, Département de Modélisation des Systèmes et Structures,
Service d'Etudes des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées, CEA/Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France*

DESCRIPTION DU SUJET DE STAGE

La propagation des particules telles que les neutrons ou les photons dans la matière est régie par l'équation de Boltzmann linéaire, qui modélise l'évolution de la densité de particules dans l'espace des phases. Afin de décrire au mieux la nature intrinsèquement stochastique des déplacements des particules, une approche naturelle permettant de calculer leur densité dans un volume donné (c'est à dire de résoudre l'équation de Boltzmann) est fondée sur l'utilisation de la méthode de Monte Carlo. Cette méthode permet de simuler le transport des particules en échantillonnant aléatoirement chacune des étapes de leurs vies, en accord avec les lois physiques qui prévalent au niveau microscopique, ainsi qu'en utilisant les données nucléaires de base (comme les sections efficaces) issues d'évaluations internationales.

Le code Monte Carlo TRIPOLI-4, développé au Laboratoire de Transport Stochastique et Déterministe (LTSD) du Service d'Etude des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées (SERMA) du CEA Saclay, permet ainsi de simuler le transport des neutrons, des photons, des électrons et des positrons dans la matière. Il est par conséquent utilisé dans des domaines aussi variés que la physique des coeurs, la radioprotection, la criticité, l'instrumentation nucléaire etc...

Récemment, des travaux menés au LTSD ont permis de définir une approche originale visant à décrire l'évolution des trajectoires des particules dans l'espace des phases à l'aide de méthodes issues de la Mécanique Statistique, et en particulier de la théorie des marches aléatoires. Cette approche utilisant le formalisme de Feynman-Kac, établit un lien entre les statistiques des collisions, des longueurs de parcours, et la distribution d'ensemble à l'équilibre, de particules évoluant librement. Ces grandeurs physiques sont intimement connectées aux estimateurs des codes Monte Carlo de transport, qui permettent de calculer sans biais (à l'aide de moyennes sur un grand nombre de trajectoires) les densités de particules dans un volume donné, ou bien des fonctionnelles dépendant de l'état des particules. La statistique des collisions, en particulier, est directement liée à l'estimateur 'collision', et la distribution des longueurs à l'estimateur 'trace'.

Plus précisément, l'approche utilisant les marches aléatoires autorise la définition des moments d'ordre quelconque des collisions et des longueurs à partir des distributions d'équilibre. Cependant, ces relations ont été établies sous des hypothèses fortes : les milieux ont été supposés homogènes et le transport monocinétique.

Ce sujet de stage consiste à poursuivre cette étude des propriétés statistiques des estimateurs Monte Carlo, dans le but de relaxer dans la mesure du possible les hypothèses des développements théoriques, afin de généraliser le domaine d'application des résultats. Ces extensions seraient fondées, entre autres, sur les études suivantes :

- dépendance énergétique des sections efficaces et ralentissement des neutrons
- domaines multi-couches et dépendances spatiales
- processus de branchement (cf. fission des noyaux lourds).

D'autre part, la connaissance fine du comportement de ces estimateurs sera appliquée aux calculs Monte Carlo. Ainsi, les moments d'ordre supérieur calculés via les marches aléatoires seront utilisés afin d'établir une estimation 'a priori' de la variance des scores d'un calcul. Cette estimation a priori est de grande utilité, même approximée, car elle permet de diagnostiquer des problèmes de divergence des incertitudes qui sont non-accessibles aux estimateurs empiriques 'a posteriori' des incertitudes des scores du calcul.

Le stage proposé fait donc appel à des connaissances en mathématiques, en physique statistique, ainsi qu'à des qualités en développement orienté objet (C++). Il a une durée de 5 mois et s'adresse à des stagiaires en dernière année d'école d'ingénieur ou Master 2. La rémunération est variable en fonction de l'école et de la durée du stage (entre 700 et 1300 euros bruts mensuels en fonction de l'école, plus aide au transport éventuellement). NOTE. Ce stage pourrait déboucher sur une Thèse de Doctorat.

Mots clés : Simulation, Monte-Carlo, Marches aléatoires, C++

Renseignements/Contacts:

Andrea Zoia (Responsable du stage)

andrea.zoia@cea.fr

DEN/DM2S/SERMA/LTSD

CEA (Commissariat à l'Energie Atomique) de Saclay

Batiment 470

91191 Gif/Yvettes Cedex

tl:0169089544

ASSESSING THE STATISTICAL PROPERTIES OF MONTE CARLO ESTIMATORS (5 MONTHS INTERNSHIP)

The propagation of radiation, such as neutrons or photons, through matter is ruled by the Boltzmann equation, which describes the evolution of the particle density in the phase space. In view of the intrinsically stochastic nature of the particle displacements, a natural approach for assessing the particle density in a given volume (i.e., for solving the Boltzmann equation) is to resort to Monte Carlo methods, which roughly speaking consist in simulating the particle trajectories in the phase space according to physical laws and available nuclear data, such as cross sections.

The Monte Carlo code Tripoli4, developed at the Laboratoire de Transport Stochastique et Deterministe (LTSD), within the Service d'Etudes des Reacteurs et de Mathematiques Appliquees (SERMA) of CEA/Saclay, allows simulating the transport of neutrons, photons, electrons and positrons, and as such has been adopted in several domains of nuclear engineering, ranging from Reactor Physics to radiation shielding calculations.

Recently, at LTSD we have begun investigating an original approach aimed at describing the evolution of particle trajectories in the phase space by the methods of Statistical Mechanics, and in particular of random walk theory. This approach, which is inherently based on Feynman-Kac formalism, establishes a link between the collision statistics, the length of the traces spent in a volume, and the ensemble equilibrium particle distribution. These physical quantities are intimately connected to the theory of Monte Carlo estimators for particle transport : in plain Monte Carlo methods, at each passage of a trajectory in the volume of interest, suitable functionals of the particle state (the so-called estimators) are recorded and their averages over a large number of simulated trajectories are known to provide unbiased estimates of the desired particle density. The collision statistics, in particular, is directly related to the so-called 'collision estimator', and the length distribution to the so-called 'track length estimator'.

Preliminary investigations have led to a number of insightful relations, which allow relating the properties of the collision number statistics to those of track lengths, and therefore making a connection between the aforementioned Monte carlo estimators. The random walk approach allows in particular assessing arbitrary-order moments of collision number and track lengths. However, these relationships have been established under strong assumptions : for instance, we have assumed that the traversed medium is homogeneous, and one-speed approximation holds.

Within this internship, we propose to pursue the study of the statistical properties of such estimators. The aim of this work is to relax the introduced approximations and thus generalize the applicability of the obtained results.

Extensions will concern among others

- energy dependence of cross sections and slowing down
- multi-layered domains and space dependence
- branching processes : particles giving birth to other particles, such as in fission.

Then, knowledge on the behavior of these estimators will be applied to Monte Carlo calculations. Higher order moments, accessible via the random walk approach, will be used so as to estimate the a priori variance of a calculation. Such information is highly desirable, even in some approximate form : indeed, Monte Carlo calculations may be affected by intrinsically diverging variances, and in this case the use of a posteriori empirical variances (which are easily computed at the end of each simulation) would be of no help, as being based on finite-size statistical samples.

This work therefore calls for skills in neutronics/mathematics as well as in $C++$ object-oriented programming. The proposed duration is approximately 5 months, and the stage is addressed to final year students of 'Ecole d'Ingénieur', or Master 2. Salary can vary according to student's Institution and stage duration (from 700 to 1300 euros/month, depending on Institution, plus possibly some financial aid for transportation). NOTE. This internship might lead to a PhD Thesis.

Keywords : Simulation, Monte-Carlo, Random Walks, $C++$

* Electronic address: andrea.zoia@cea.fr

- [1] C. Cercignani, *The Boltzmann equation and its applications* (Springer, 1988).
- [2] M. Weinberg and E. P. Wigner, *The physical theory of neutron chain reactors* (UCP, Chicago, 1958).
- [3] I. Lux and L. Koblinger, *Monte Carlo particle transport methods : neutron and photon calculations* (CRC Press, Boca Raton, 1991).
- [4] J. Spanier and E. M. Gelbard, *Monte Carlo principles and neutron transport problems* (Addison-Wesley, Reading, 1969).
- [5] M. Kac, *Probability and related topics in physical sciences* (Lectures in applied mathematics, Wiley, 1957).
- [6] O. Bénichou et al., *Europhys. Lett.* **70**, 42 (2005).
- [7] A. Zoia, E. Dumonteil, and A. Mazzolo, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 220602 (2011).
- [8] A. Zoia, E. Dumonteil, and A. Mazzolo, *Phys. Rev. E* **84**, 021139 (2011).
- [9] A. Zoia, E. Dumonteil, and A. Mazzolo, *Phys. Rev. E* **83**, 041137 (2011).