



European Research Council
Established by the European Commission



Échantillonnage d'évènements rares pour la neutronique: la méthode Adaptive Multilevel Splitting

Tony Lelièvre (Ecole des Ponts et INRIA)

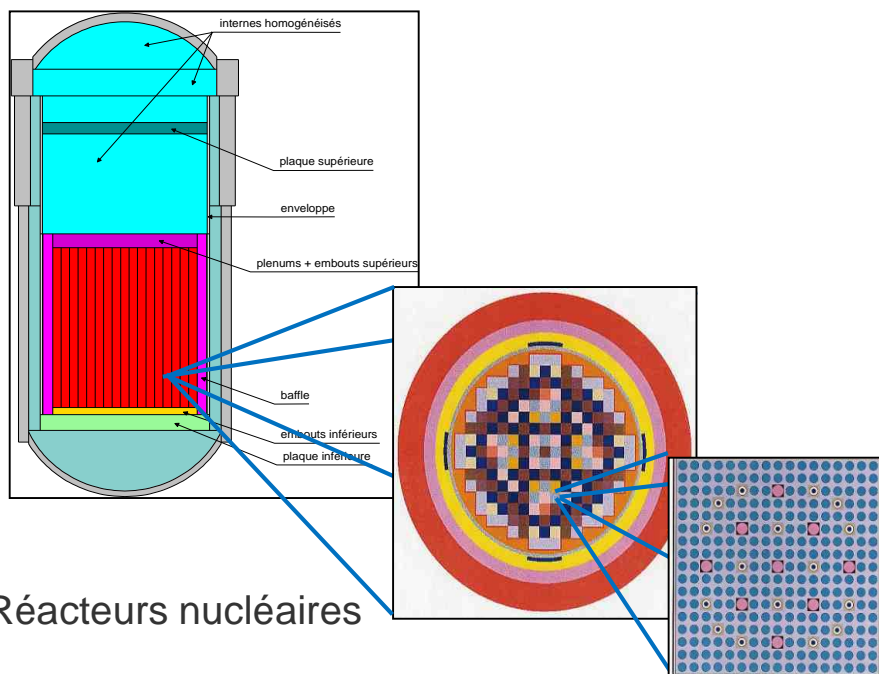
Travaux réalisés dans le cadre de la thèse de Henri Louvin,
en collaboration avec Eric Dumonteil (CEA-ISTN / IRSN) et Mathias Rousset (INRIA)



Workshop « Mathématiques pour la neutronique », GdR MaNu, 30 novembre 2017.

Neutronique

Physique du cœur

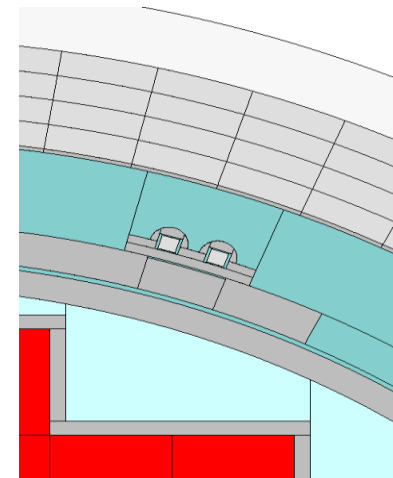


Réacteurs nucléaires

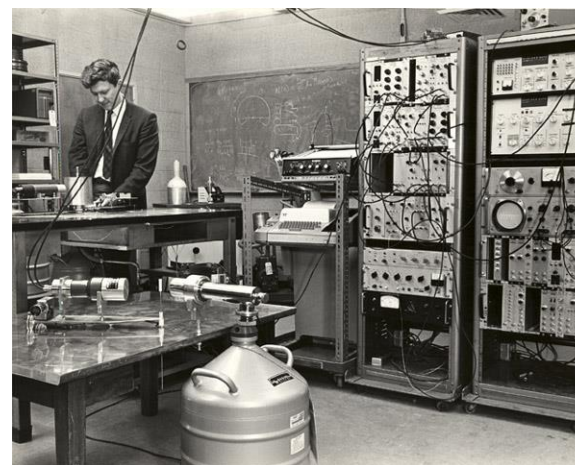
Radioprotection



Stockage et démantèlement



Dosimétrie



Instrumentation nucléaire

Problèmes à fortes atténuations

Objectifs

- Utiliser une méthode de simulation d'événements rares dans le cadre de fortes atténuations
 - Adaptation de la méthode **Adaptive Multilevel Splitting (AMS)** au transport de particules
 - Implémentation dans le code de transport **TRIPOLI-4®**

- Travail réalisé durant la thèse de Henri Louvin:
 - Validation de la pertinence de l'AMS en tant que méthode de réduction de variance pour le transport de particules via le développement d'un prototype de transport Monte-Carlo dédié
 - Implémentation de l'AMS dans le code TRIPOLI-4®
 - Développement de nouvelles fonctionnalités permettant l'utilisation de l'AMS pour tout type de simulation en radioprotection

Plan de la présentation

- ❑ 1 - Contexte de l'étude
 - Transport Monte-Carlo
 - Réduction de variance
- ❑ 2 - Adaptive Multilevel Splitting
 - Origines
 - Description de l'algorithme
- ❑ 3 - Application novatrice au transport de particules
 - Grandes étapes
 - Exemples d'applications
- ❑ 4 - Résultats marquants
 - Comparaisons à des simulations analogues
 - Comparaisons à la méthode existante de TRIPOLI-4®
- ❑ 5 - Conclusions et perspectives

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Partie 1/5

Contexte de l'étude

Théorie du transport de particules

- Deux phénomènes: diffusion (collision d'un neutron avec le milieu), capture (absorption par le milieu) + source
- Transport décrit par l'équation de Boltzmann stationnaire donnant le bilan du flux de particules ϕ [$n.cm^{-2}.s^{-1}$] en chaque point $(\vec{X}, \vec{\Omega}, E)$ de l'espace des phases :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{X}, \vec{\Omega}, E) + \overset{\text{Section efficace totale}}{\Sigma_t(\vec{X}, E)} \phi(\vec{X}, \vec{\Omega}, E) = \int \int \underset{\text{Section efficace de diffusion}}{\Sigma_s(\vec{X}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E)} \phi(\vec{X}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' + \underset{\text{Terme source}}{Q(\vec{X}, \vec{\Omega}, E)}$$

Méthodes de résolution

- Méthodes déterministes → Intégration numérique
 - Nécessitent une discrétisation de l'espace des phases
 - Approximations
 - Résolution rapide (quelques secondes à quelques heures)

- Méthodes stochastiques → Résolution Monte-Carlo
 - Simulation individuelle de chaque particule
 - Chaque trajectoire est modélisée par une marche aléatoire
 - Les lois gouvernant les sauts et les changements de directions sont fondées sur des probabilités de réactions données par les sections efficaces
 - Peu d'approximations (géométrie 3D, énergie continue,...)
 - Résolution lente (quelques heures à quelques jours)

Transport Monte-Carlo

- Objectif : Estimer une quantité physique d'intérêt dans un volume
- Mode de fonctionnement
 - Les particules simulées sont divisées en N « **batchs** » de taille constante
 - Un estimateur $\hat{\psi}_i$ de la réponse est calculé à chaque batch
 - On calcule le score moyen sur l'ensemble des batchs et la variance associée :

$$\bar{\psi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\psi}_i \qquad \sigma_{\bar{\psi}}^2 = \frac{\sigma^2}{(N - 1)}$$

Contexte de l'étude

Exemples de réponses

➤ Flux dans un volume

- Nombre de particules dans le volume par unité d'espace et de temps ($n.cm^{-2}.s^{-1}$)
- Score associé : Longueur moyenne parcourue par une particule dans le volume

➤ Flux à une surface

- Nombre de particules traversant la surface par unité d'espace et de temps ($n.cm^{-2}.s^{-1}$)
- Score associé : Nombre moyen de particules traversant la surface

➤ Spectre d'énergie déposée par particule

- Histogramme enregistrant l'énergie déposée par chaque particule source (MeV)
- Score associé : Pulse-height tally

Limitations des simulations Monte-Carlo

- En cas de fortes atténuations, peu de particules atteignent la zone d'encaissement
 - Disparité de contributions entre les batchs
 - Grande variance
 - Grand nombre de batchs nécessaire pour évaluer précisément le score moyen

- Objectif des méthodes de réduction de variance :
 - Modifier le processus de simulation...
 - ...afin de diminuer la variance du score moyen **pour un temps de calcul donné**

Contexte de l'étude

Méthodes classiques de réduction de variance pour les évènements rares:

- **Méthodes de fonction d'importance:** on modifie le noyau de transition pour favoriser les déplacements qui nous intéressent, et on compense en donnant un poids aux réalisations associées (Importance Sampling, Exponential Transform).
- **Méthodes de splitting et particules en interaction:** dupliquer les particules qui se déplacent dans le bonne direction et tuer les autres (Adaptive Multilevel Splitting).
- Dans les deux cas, il est utile d'avoir une intuition (ou un résultat approché) pour guider les particules : favoriser les « bons » déplacements, dupliquer les « bonnes » particules.

Le code de transport TRIPOLI-4®

- La famille de codes TRIPOLI
 - Transport Monte-Carlo de neutrons, photons, électrons et positrons
 - Depuis les années 60
 - Version 4 : 0,5 million de lignes de C++

- La réduction de variance dans TRIPOLI : la Transformée Exponentielle
 - Fondée sur l'utilisation d'une carte d'importance
 - Rallonge/raccourcit les parcours des particules se dirigeant vers des zones de plus grande/faible importance
 - La définition « manuelle » de l'importance peut nécessiter des mois de travail
 - Automatisation de la génération de cartes via le module INIPOND
 - INIPOND possède un mode manuel permettant l'optimisation des paramètres

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Partie 2/5 Adaptive Multilevel Splitting (AMS)

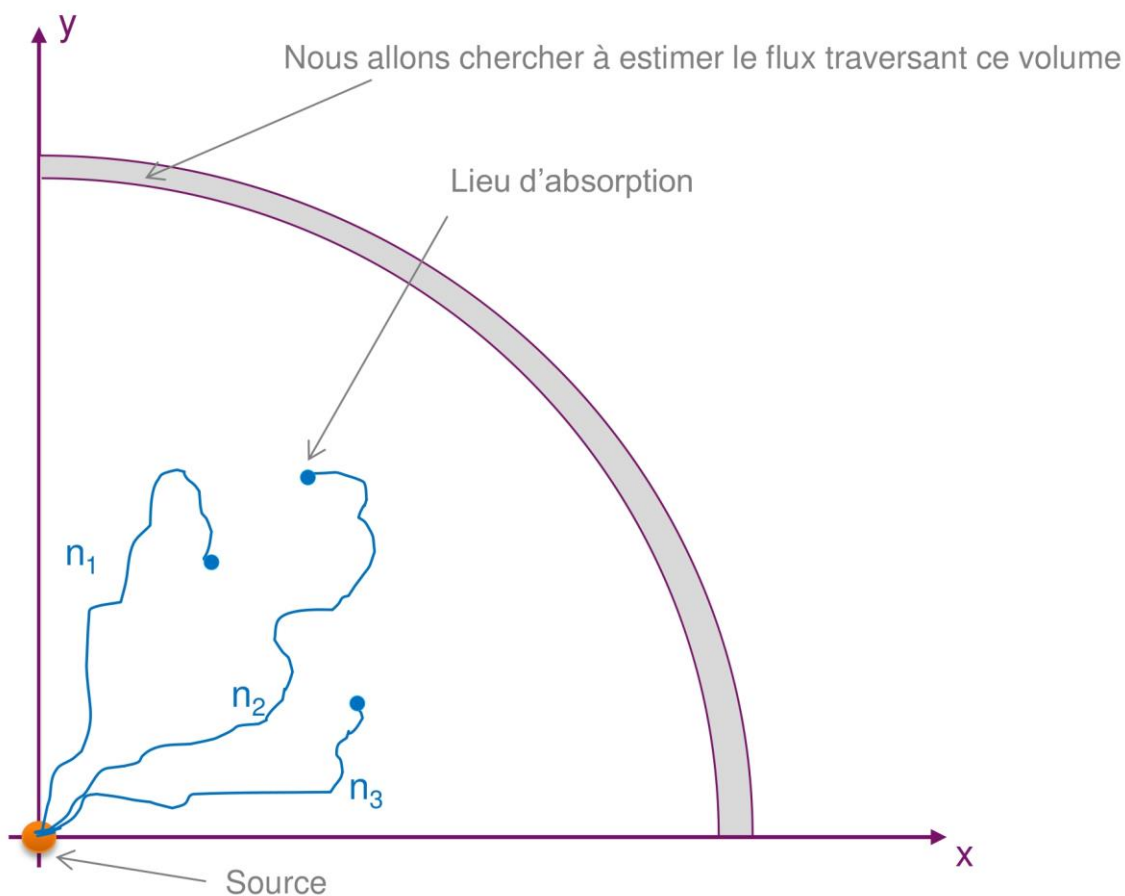
Bibliographie

- H. Kahn et T.E. Harris, *Estimation of particle transmission by random sampling*, National Bureau of Standards Appl. Math. Series 12:27–30 (1951)
- F. Cérou et A. Guyader, *Adaptive Multilevel Splitting for rare event analysis*, Stoch. Anal. Appl. (2007)
 - Dédié à la simulation Monte-Carlo de processus de Markov à temps continu
- C.-E. Bréhier, M. Gazeau, L. Goudenège, TL et M. Rousset, *Unbiasedness of some generalized Adaptive Multilevel Splitting algorithms*, Ann. App. Prob. (2016)
 - Cadre théorique plus général pour l'algorithme AMS : « GAMS »
 - Entre autres, application à la simulation de chaînes de Markov (temps discret)
- Idée : regarder la chaîne « trace » (ie le processus aux temps de collision) : c'est une chaîne de Markov à laquelle et on peut donc appliquer AMS.

L'algorithme Adaptive Multilevel Splitting (AMS)

- Algorithme de splitting itératif, avec des niveaux calculés de manière adaptative. Trois paramètres numériques:
 - Un nombre total de trajectoires (ou traces) constant
 - Un nombre de trajectoires tuées à chaque itération
 - Une fonction d'importance qui va permettre de classer (d'ordonner) les traces

Exemple de simulation AMS



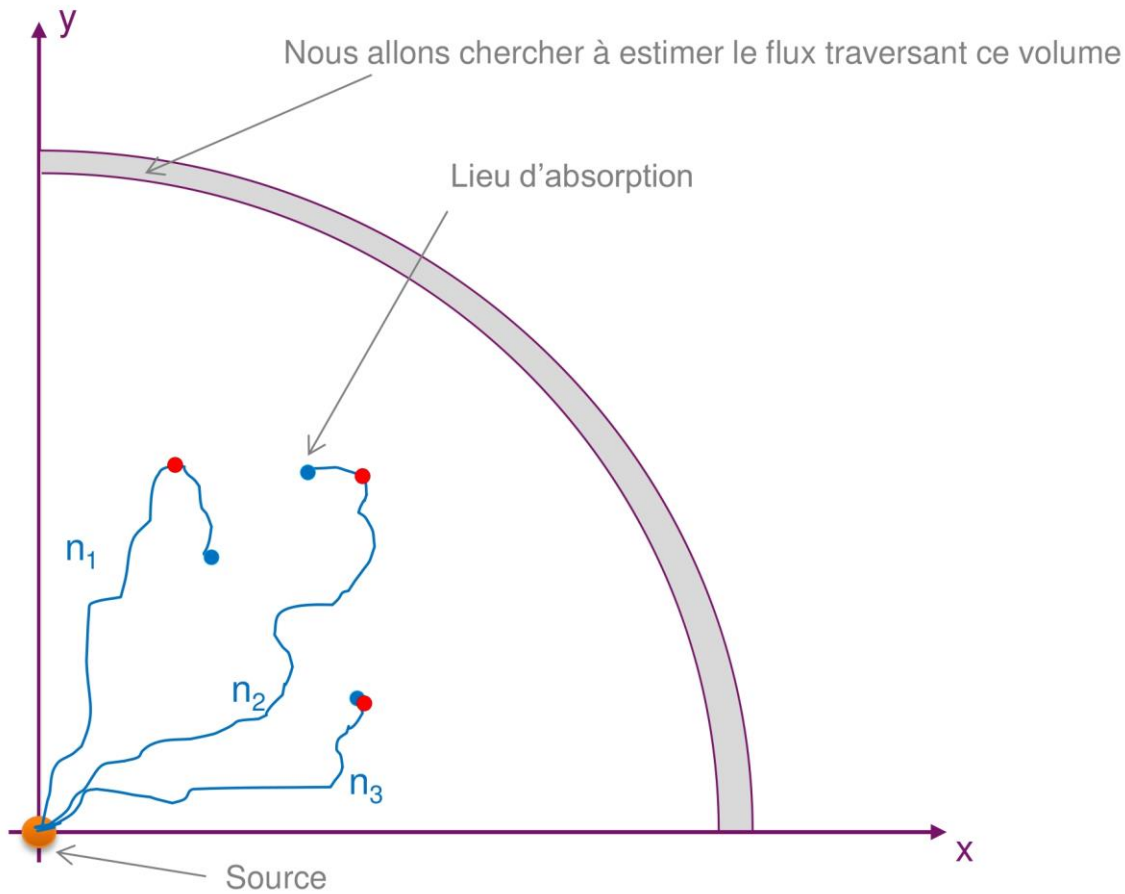
➤ Description de l'exemple :

- On souhaite estimer le flux moyen dans la coquille
- 3 particules initiales sont simulées
- L'importance de la moins bonne particule définira le niveau de splitting

➤ Iteration 0

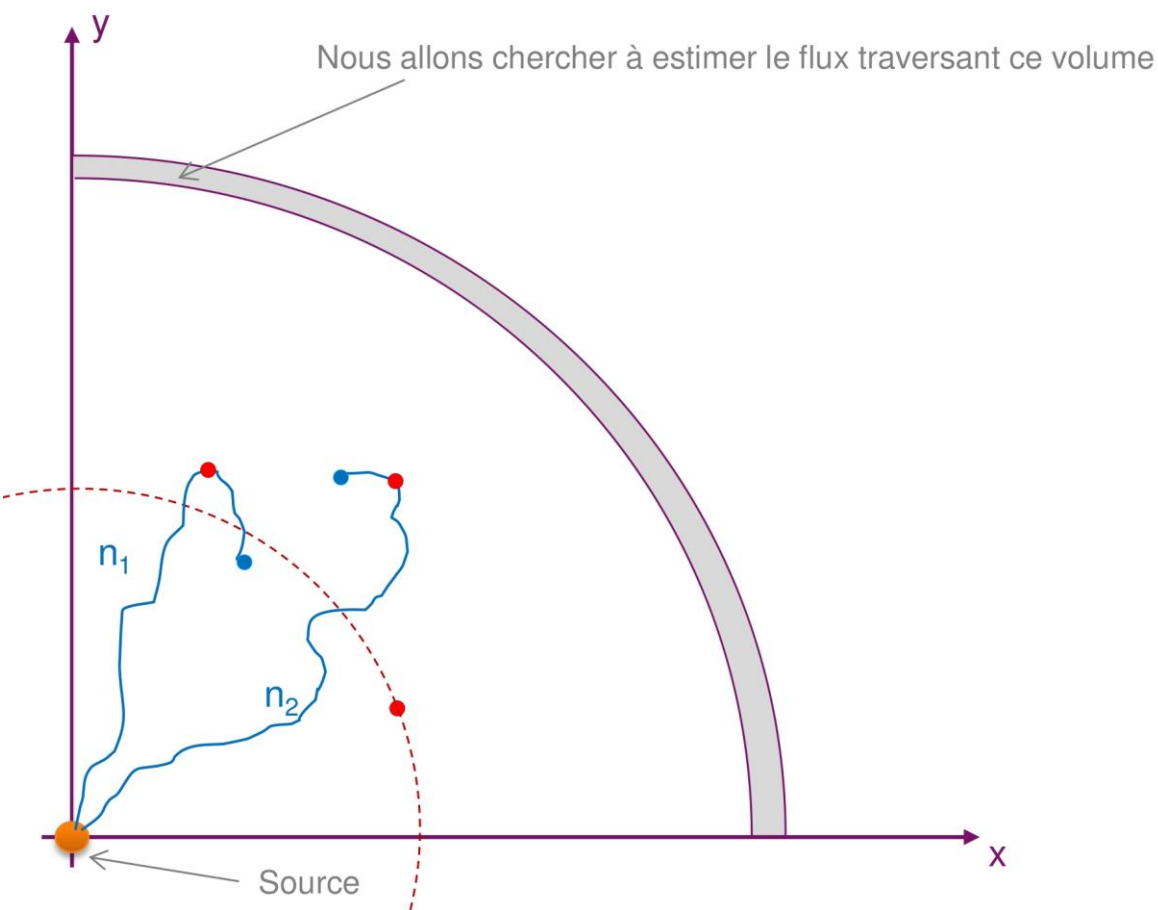
- Aucun niveau de splitting n'est défini avant la simulation
- Les particules initiales sont simulées de façon analogue, du point source jusqu'à leur absorption

Exemple de simulation AMS



- Calcul de l'importance des traces
 - On utilise la distance au point source comme importance
 - L'importance de chaque trace est la distance maximale atteinte par la particule associée

Exemple de simulation AMS

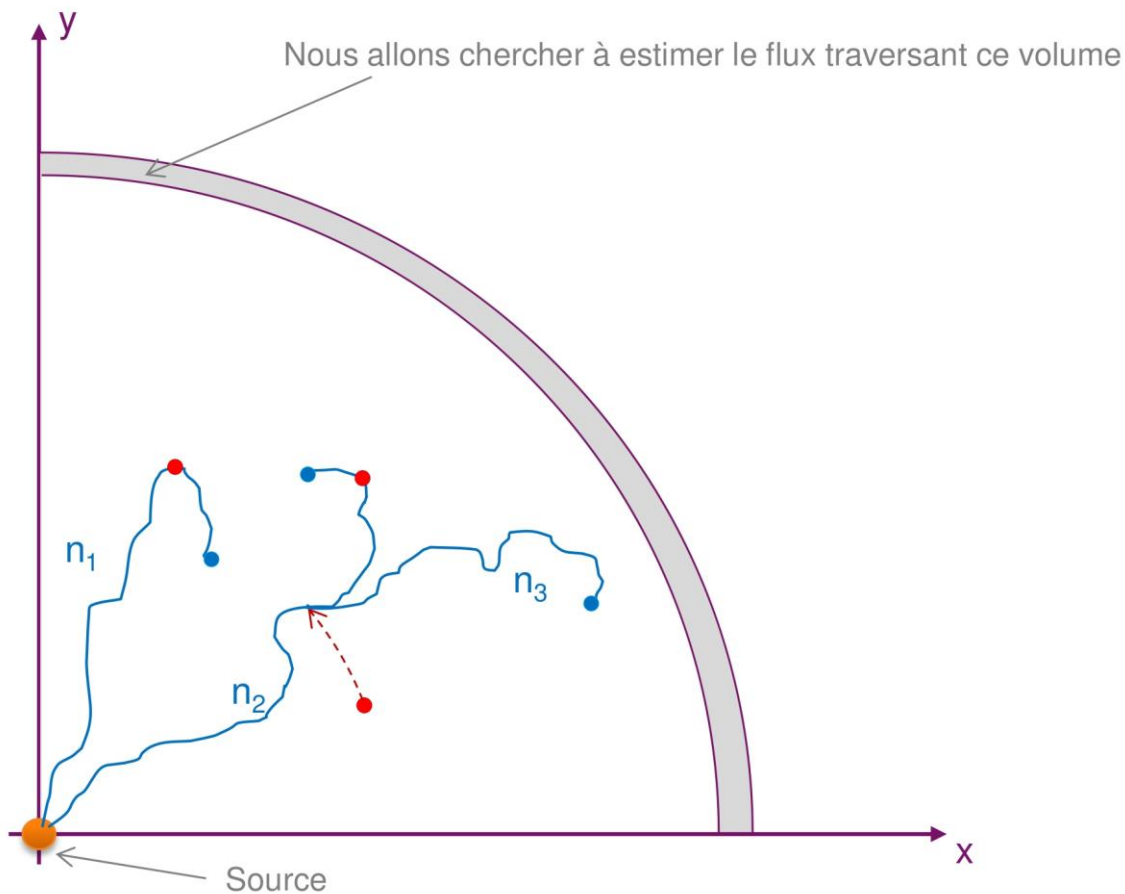


➤ Itération 1

- L'importance de la particule 3 définit le premier niveau de splitting
- La trace de la particule 3 est supprimée
- La probabilité α pour une trace d'avoir une importance supérieure à ce niveau est estimée par :

$$\alpha = 1 - \frac{1}{3}$$

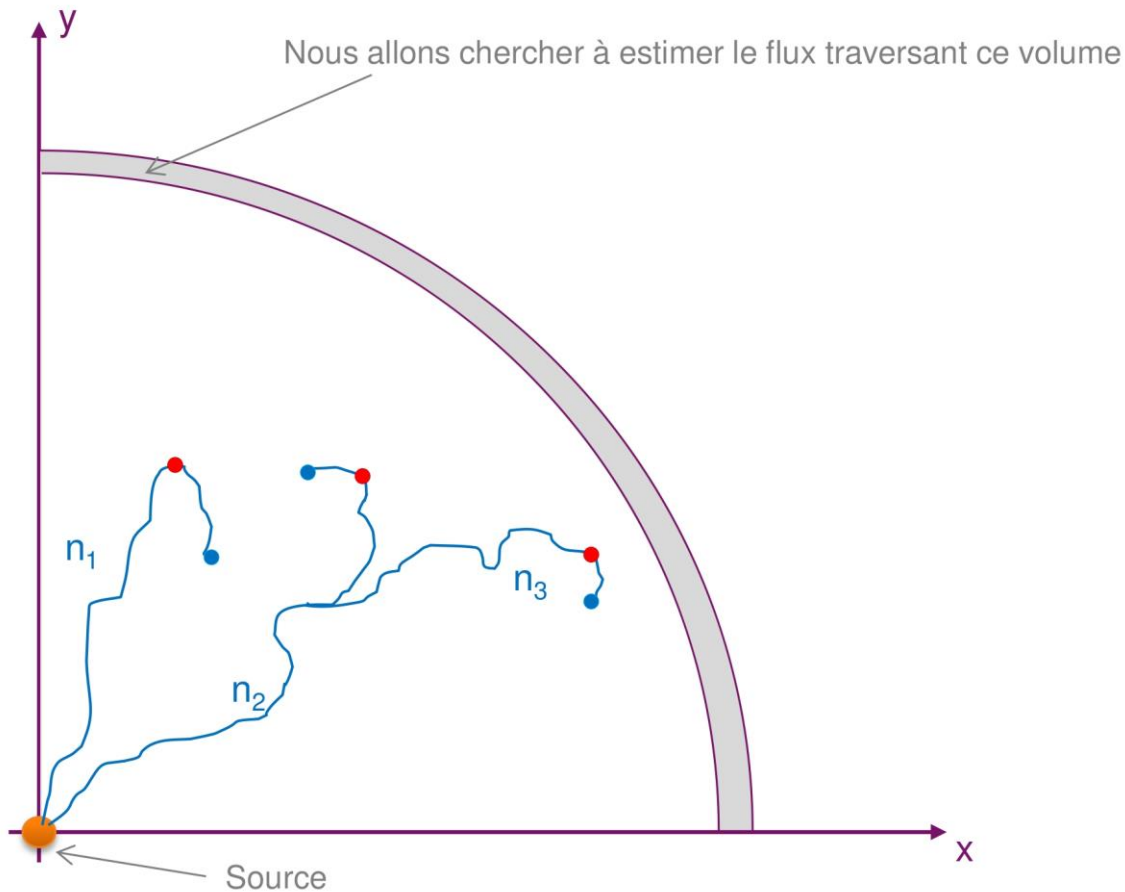
Exemple de simulation AMS



➤ Itération 1

- Une trace survivante est sélectionnée aléatoirement pour duplication
- Le point de splitting est défini comme le premier point de la trace 2 ayant une importance supérieure au niveau de splitting
- Une nouvelle particule est simulée depuis le point de splitting

Exemple de simulation AMS

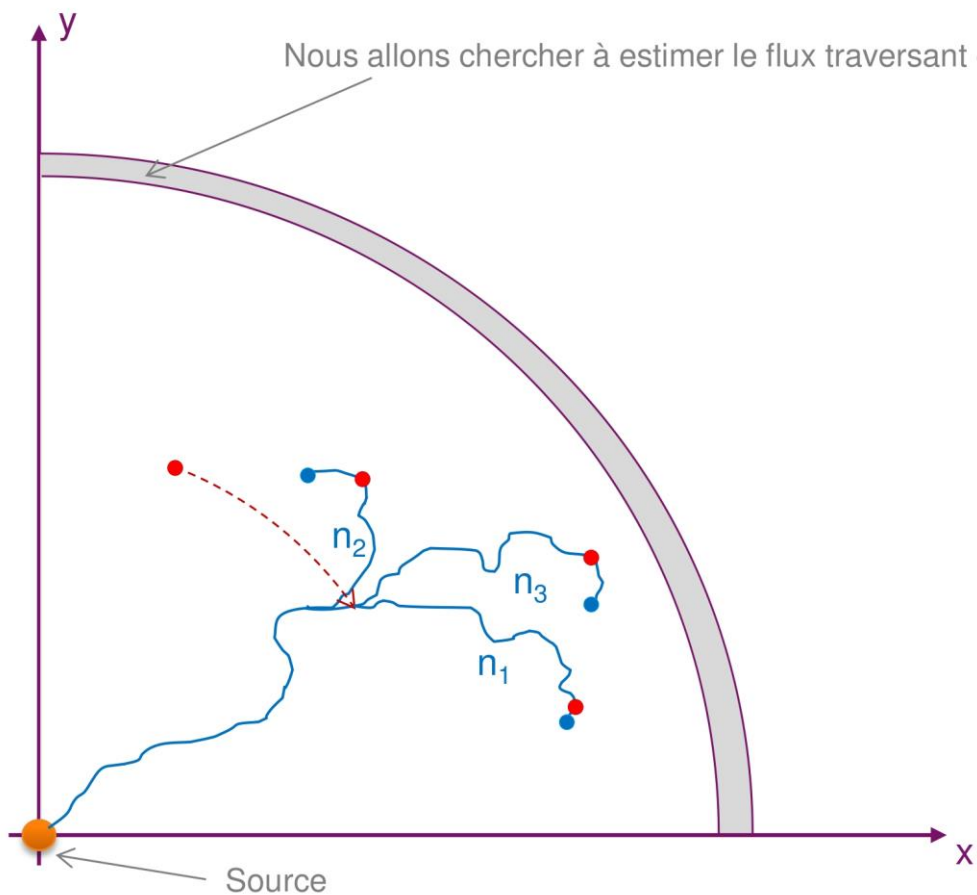


➤ Itération 1

- La note de la nouvelle trace est calculée
- La première itération est terminée
- On a un nouvel ensemble de trois traces

Exemple de simulation AMS

Nous allons chercher à estimer le flux traversant ce volume



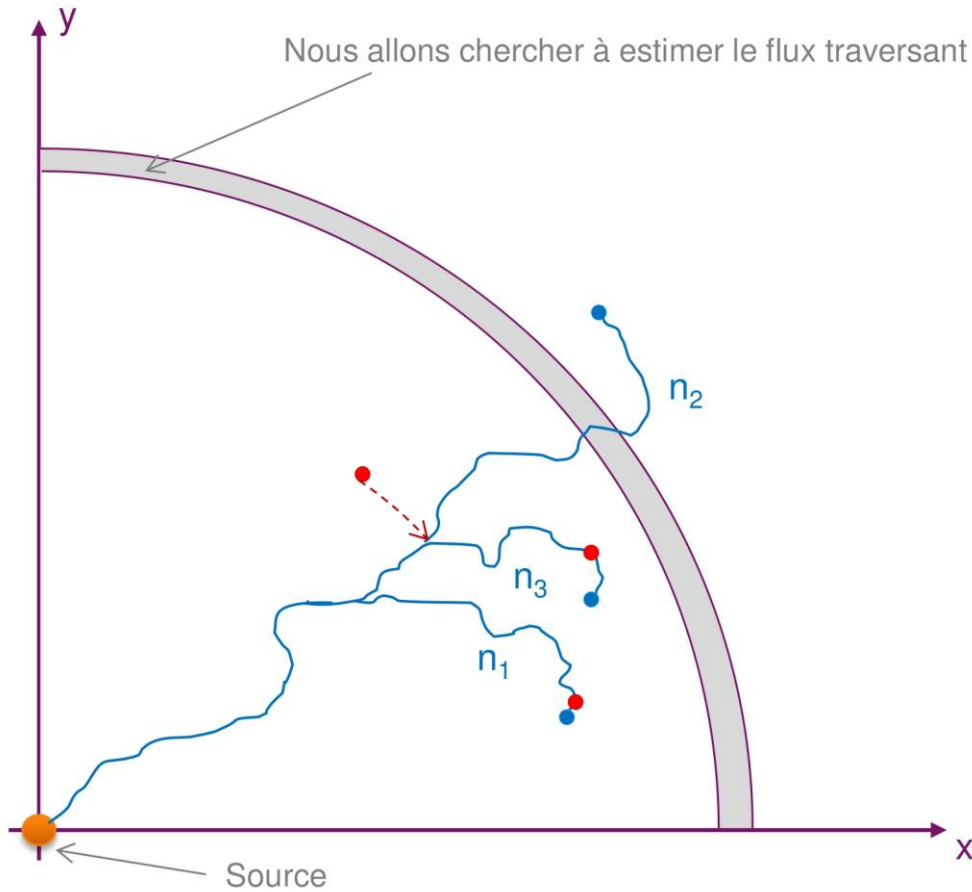
➤ Itération 2

- Le deuxième niveau de splitting est défini
- La probabilité pour une particule source d'atteindre le second niveau de splitting est estimée par

$$\alpha = \left(1 - \frac{1}{3}\right)^2$$

Exemple de simulation AMS

Nous allons chercher à estimer le flux traversant ce volume

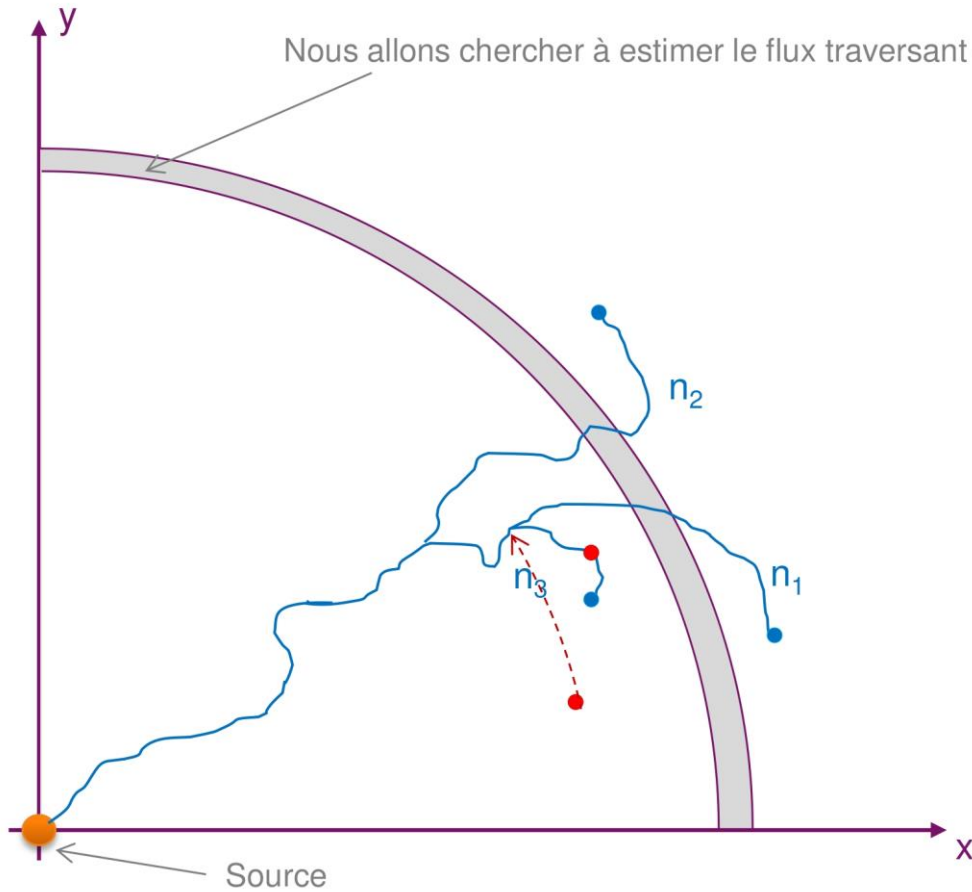


➤ Itération 3

$$\alpha = \left(1 - \frac{1}{3}\right)^3$$

Exemple de simulation AMS

Nous allons chercher à estimer le flux traversant ce volume

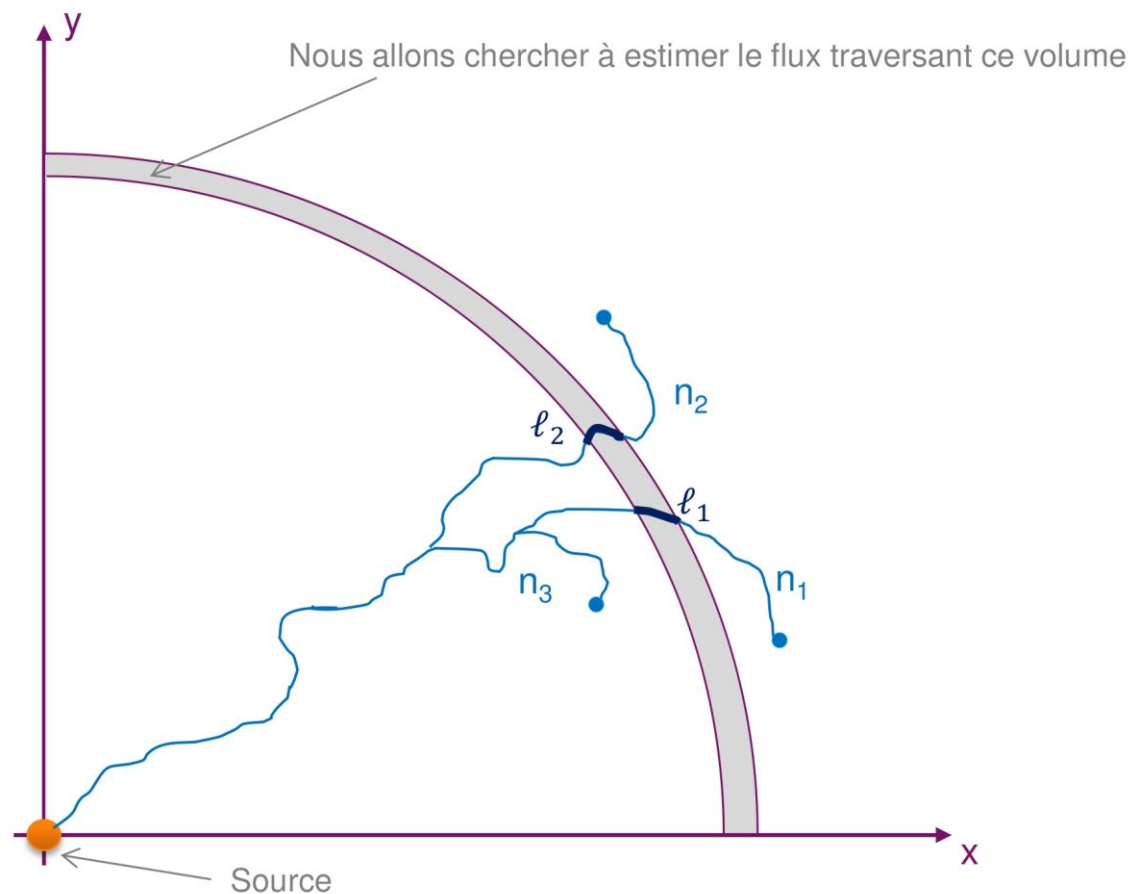


➤ Itération 4

$$\alpha = \left(1 - \frac{1}{3}\right)^4$$

Adaptive Multilevel Splitting

Exemple de simulation AMS



➤ Fin des itérations

- Le flux est calculé avec les estimateurs Monte-Carlo standards
- Le résultat est pondéré par la probabilité α d'atteindre le dernier niveau de splitting
- Par exemple, avec un estimateur « track » :

$$\hat{\phi} = \frac{1}{3} (I_1 + I_2) \times \alpha$$

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

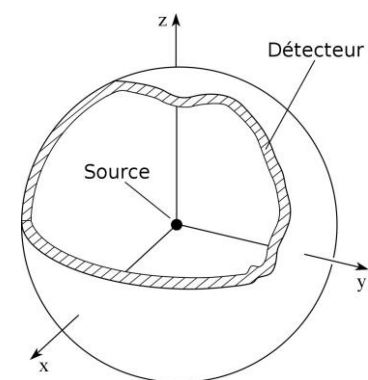


Partie 3/5

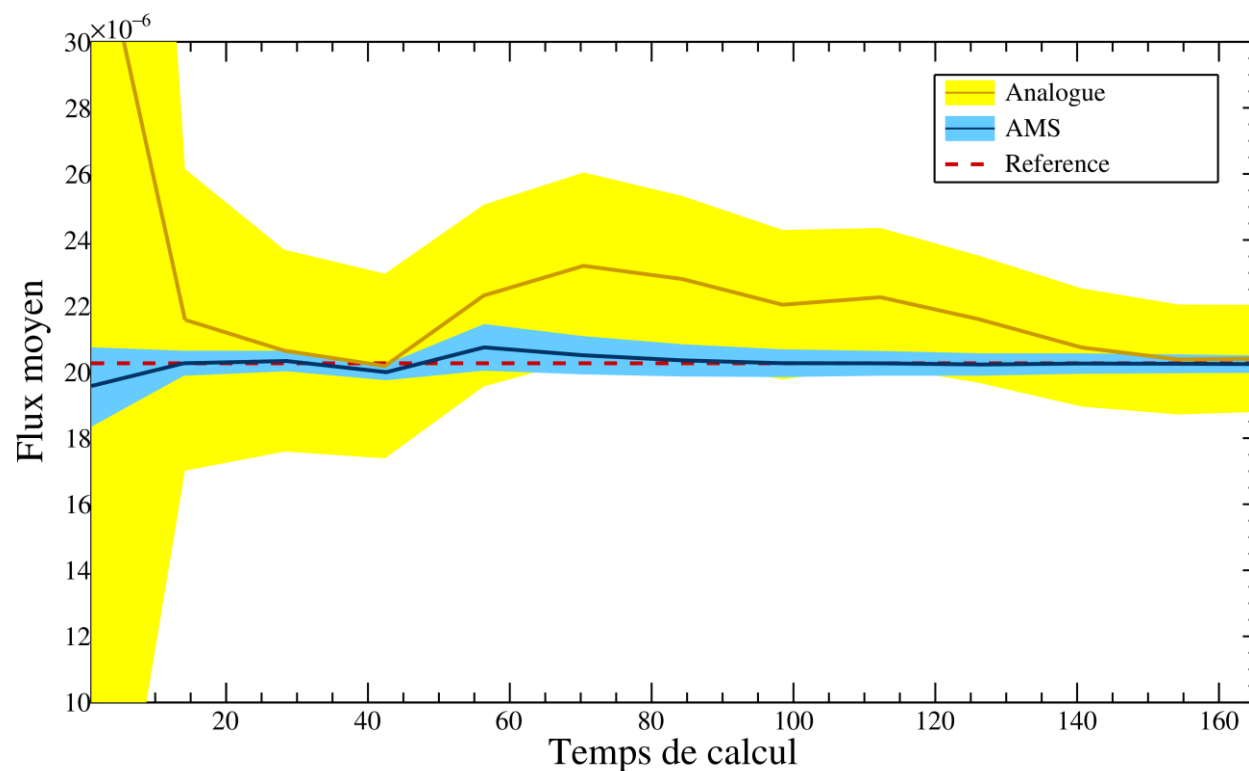
Applications au transport de particules

1 - Prototypage logiciel

- Création du code « MENHIR »
 - Code de transport simplifié permettant l'étude d'un cas unique simple
 - Présence d'un module permettant le calcul de résultats analytiques



Géométrie MENHIR



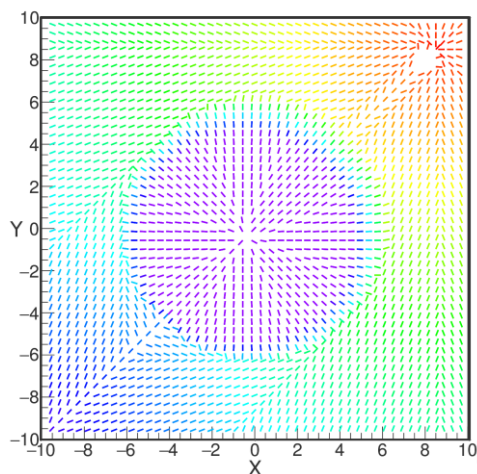
2 - Première implémentation dans TRIPOLI-4®

- Implémentation de l'AMS dans TRIPOLI-4® :
 - Ajout de structures enregistrant les trajectoires de particules
 - Création d'une classe gérant les itérations AMS
 - Appel aux procédures d'encaissement standard de TRIPOLI

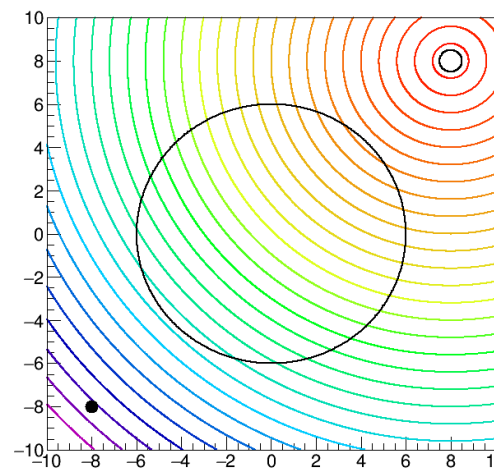
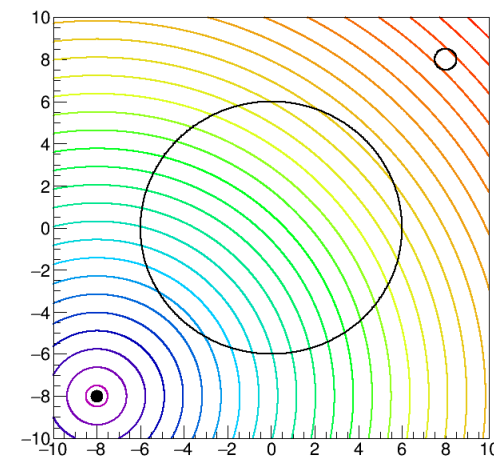
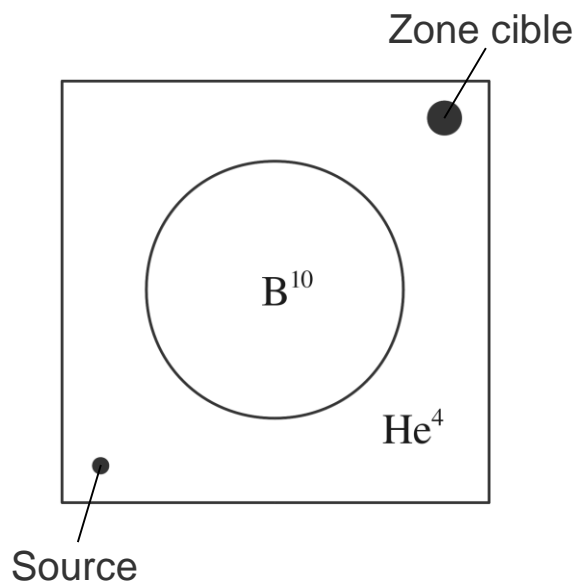
- AMS et fonctions d'importance :
 - Algorithme robuste vis-à-vis de l'importance
 - Classe spécifique permettant la définition de fonctions d'importance purement spatiales
 - Possibilité d'utiliser les cartes d'importance calculées par INIPOND

- Limitations de la première implémentation
 - Neutrons seulement
 - Calculs de scores restreints au volume cible

2 - Première implémentation dans TRIPOLI-4®



Carte d'importance
calculée par INIPOND

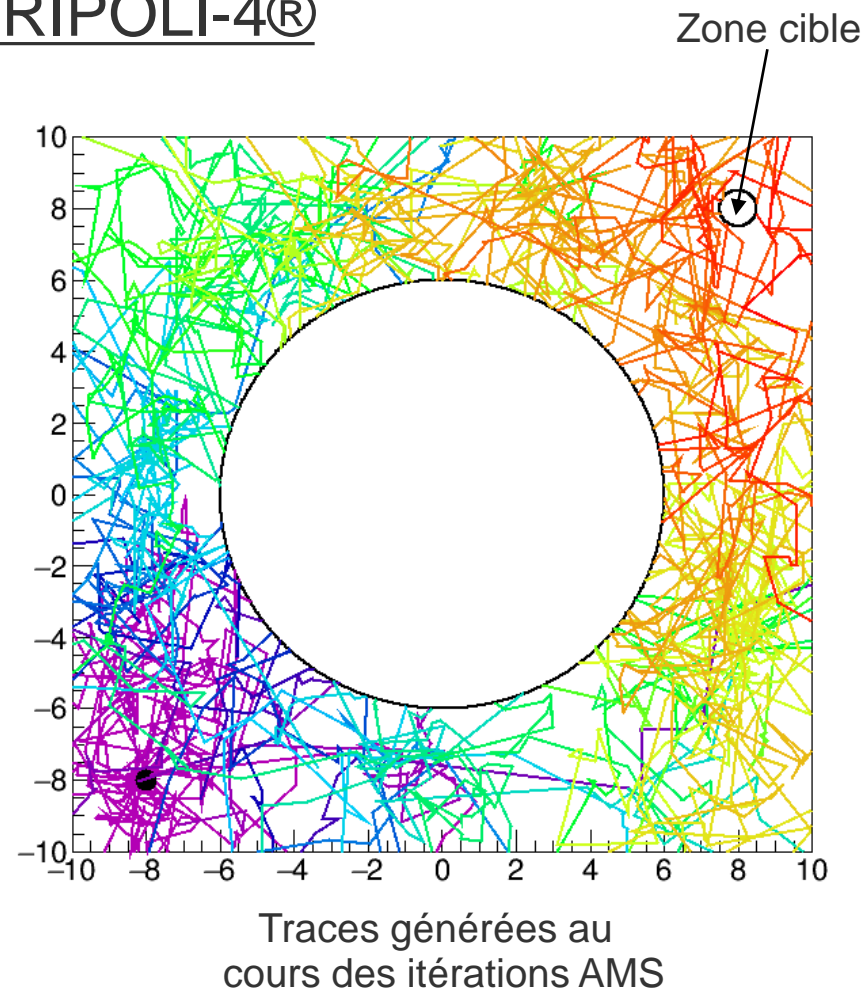
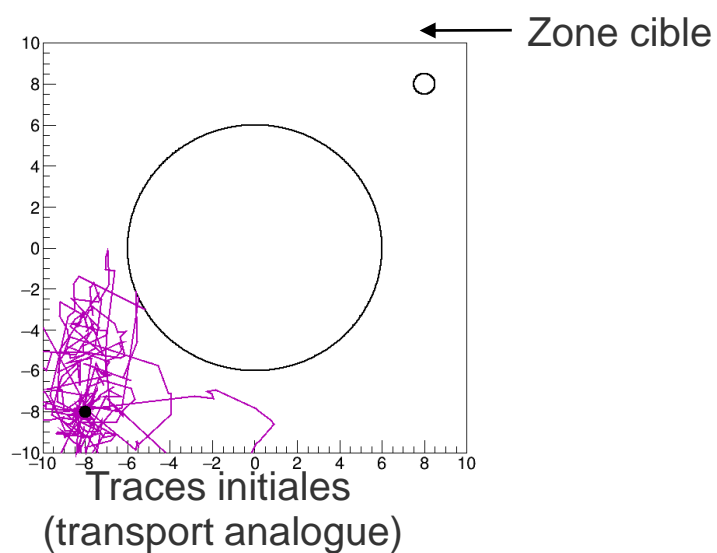


Exemples de cartes
spatiales pour l'AMS

2 - Première implémentation dans TRIPOLI-4®

Exemple d'utilisation de l'AMS

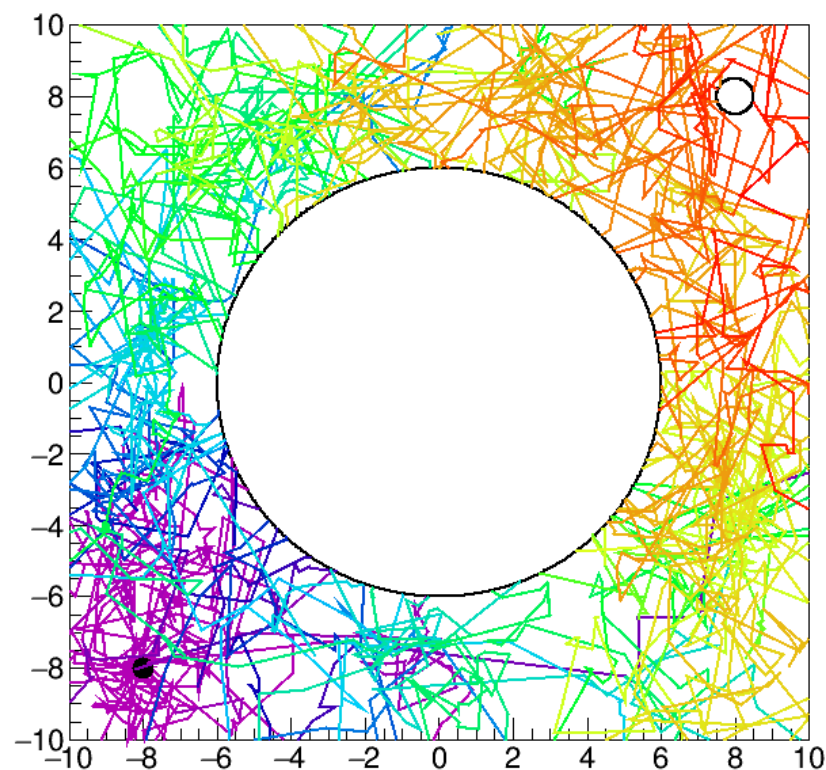
- Traces enregistrées par TRIPOLI-4® durant un batch AMS
- $n=10, k=1$



3 – Méthode de « scoring à la volée »

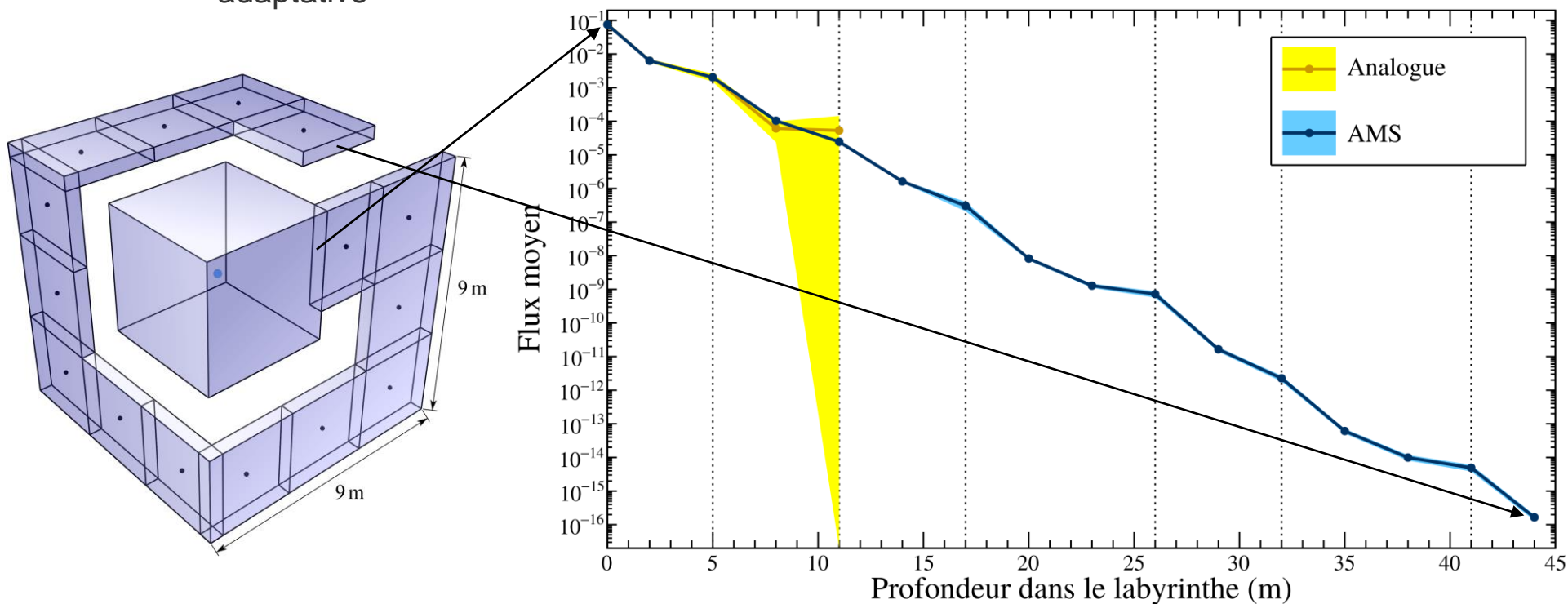
- On a à chaque itération
 - Un ensemble de trajectoires survivantes
 - La probabilité pour une trajectoire d'avoir une importance supérieure au dernier niveau de splitting

→ Possibilité d'utiliser l'AMS pour estimer des scores **hors** de la zone cible



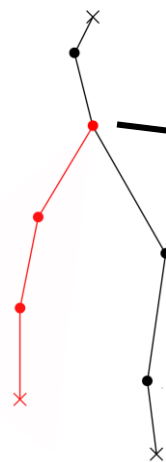
3 – Méthode de « scoring à la volée »

- Chaque zone d'intérêt est traitée indépendamment
 - Les contributions à chaque score sont traitées séparément
 - Les itérations auxquelles les scores sont encaissés sont déterminées de manière adaptative



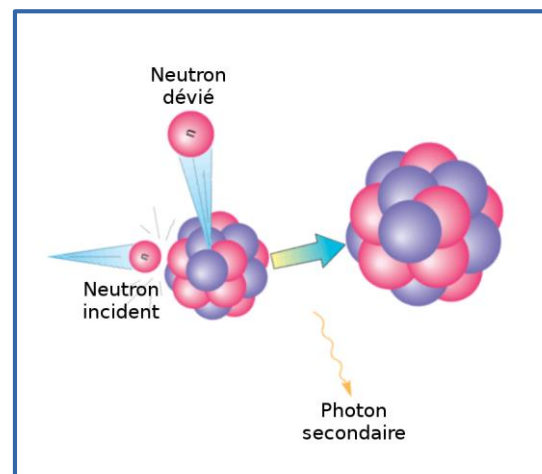
4 – AMS pour les processus branchants

- Les processus branchants en neutronique
 - Certains phénomènes physiques donnent lieu à des traces branchantes en Monte-Carlo
 - Ils peuvent dans certains cas être traités via des changements de poids statistiques
 - Dans certaines situations, les phénomènes branchants doivent être traités explicitement



Exemple de trace

Monte-Carlo



Phénomène physique
sous-jacent possible

4 – AMS pour les processus branchants

- L'AMS peut être appliqué à n'importe quel processus de Markov et donc à des processus branchants !
- Adaptation nécessaire de l'algorithme
 - Définition de l'importance des traces branchantes → Maximum de l'importance sur l'ensemble des branches de la trace
 - Adaptation de la procédure de duplication
- Principaux impacts sur l'implémentation dans TRIPOLI
 - Création d'une nouvelle structure imbriquée trace/branche
 - Ajout d'une fonctionnalité permettant de distinguer les fonctions d'importance selon le type de particule

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea



Partie 4/5

Quelques résultats marquants

Comment quantifier l'efficacité de la réduction de variance ?

- Le temps de calcul
 - Noté t
 - Proportionnel au nombre de batchs
- La variance du score moyen
 - Notée σ^2
 - Inversement proportionnelle au nombre de batchs

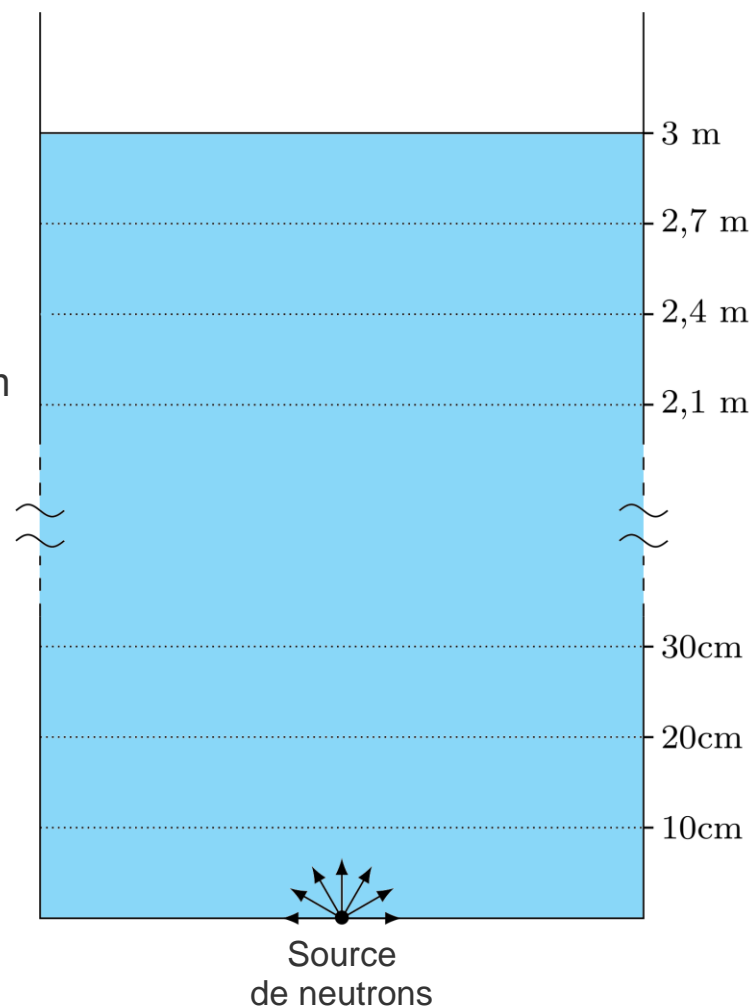
- On définit la Figure de mérite (FOM)

$$\text{FOM} = \frac{1}{\sigma^2 t}$$

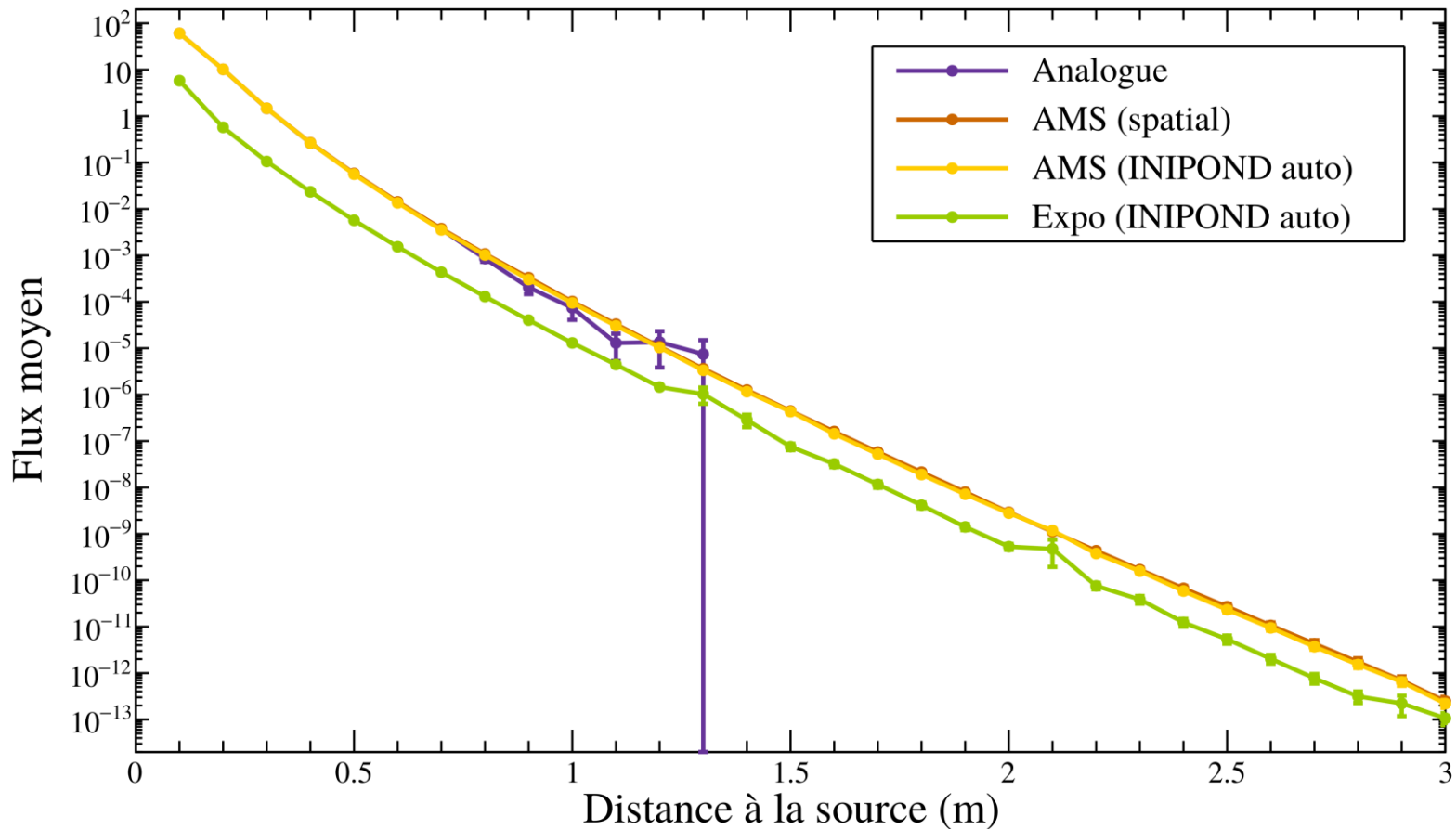
1 – Atténuation dans l'eau

- Description de la géométrie
 - Source de neutrons (spectre de Watt) au fond d'une piscine
 - Calcul de l'atténuation du flux tous les 10 cm de la source à la surface

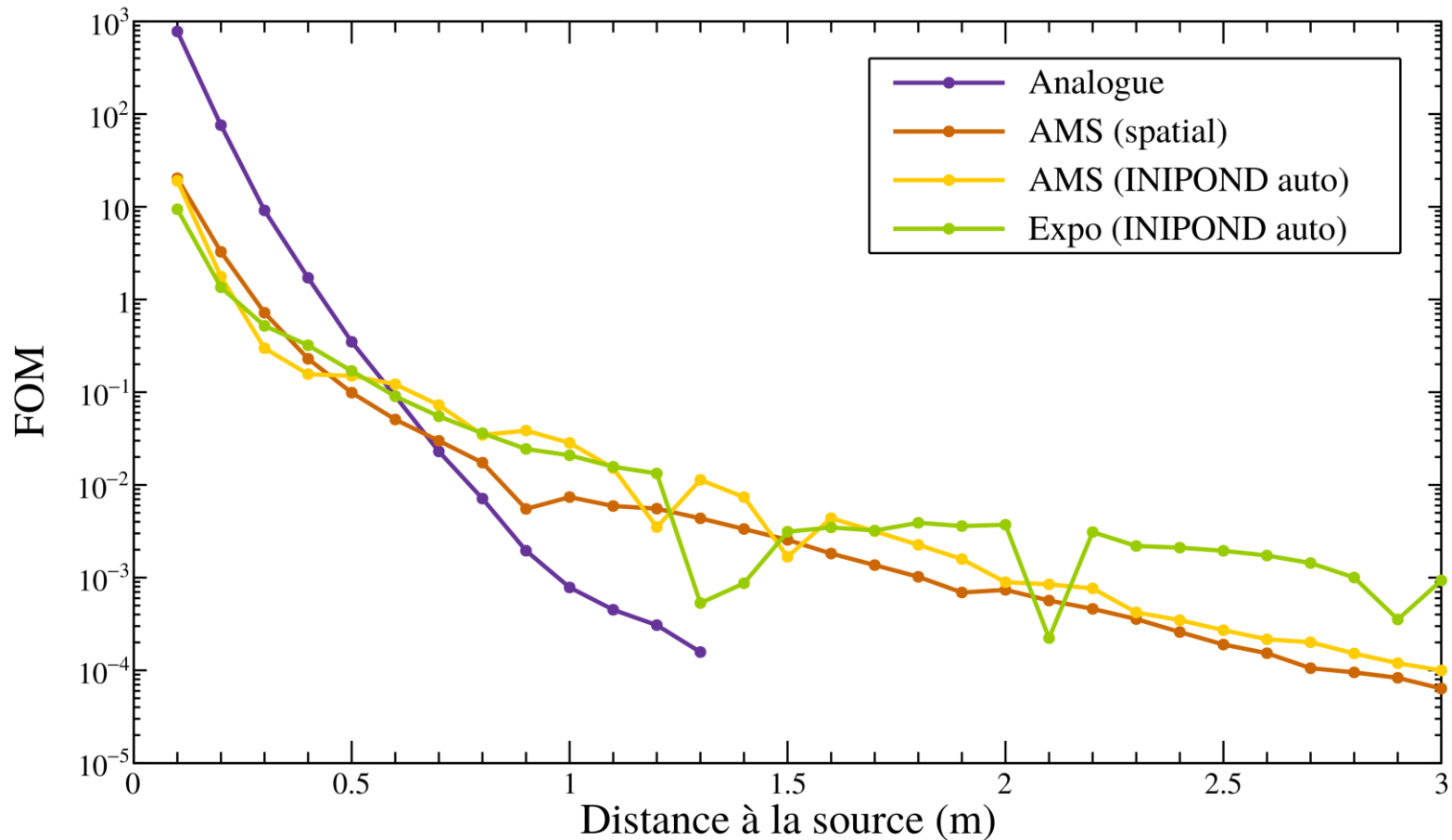
- Calculs effectués
 - Analogue (sans réduction de variance)
 - AMS – Importance spatiale
 - AMS – Importance INIPOND AUTO
 - E.T – INIPOND AUTO



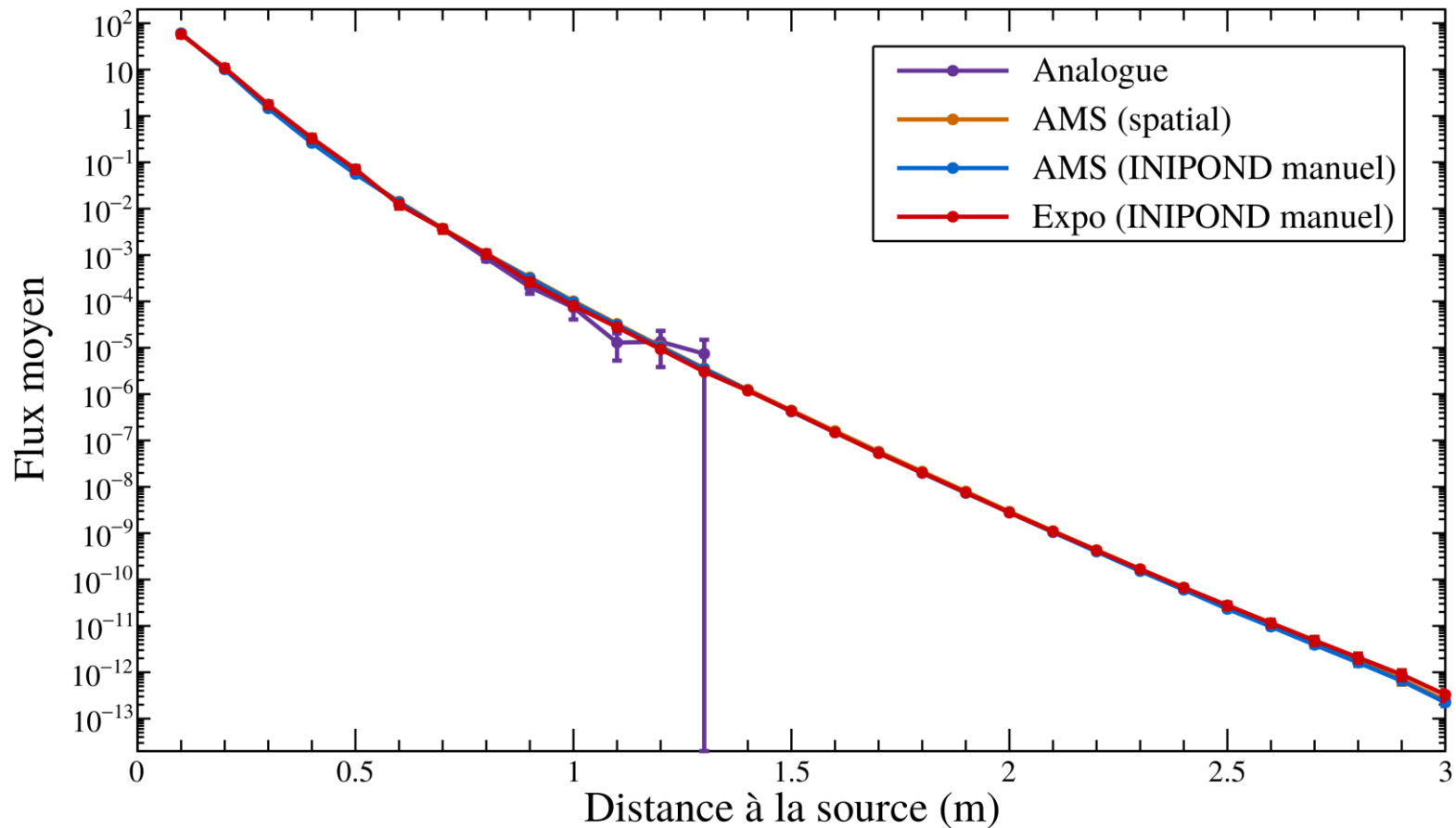
1 – Atténuation dans l'eau : Résultats



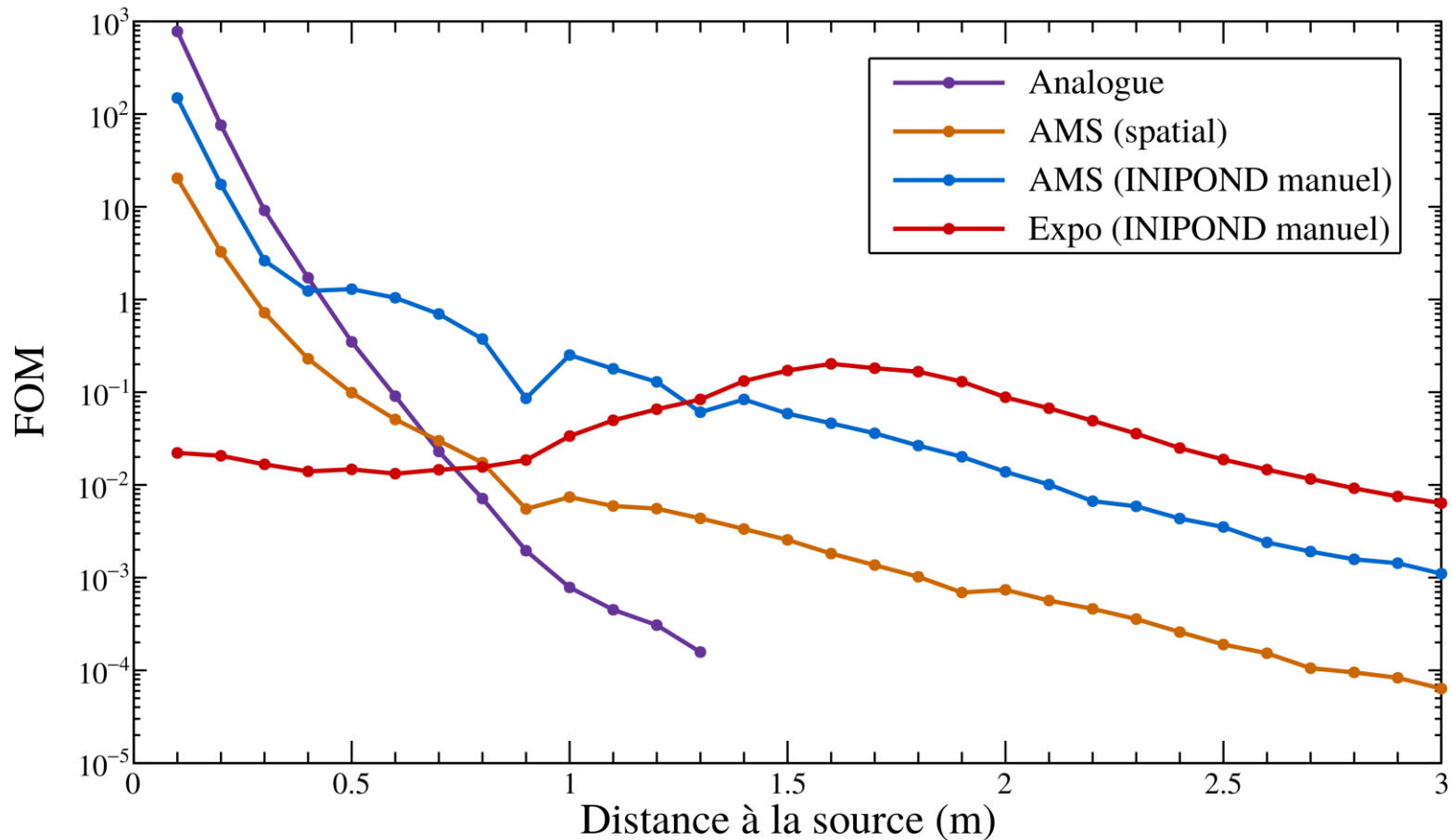
1 – Atténuation dans l'eau : Résultats



1 – Atténuation dans l'eau : Résultats

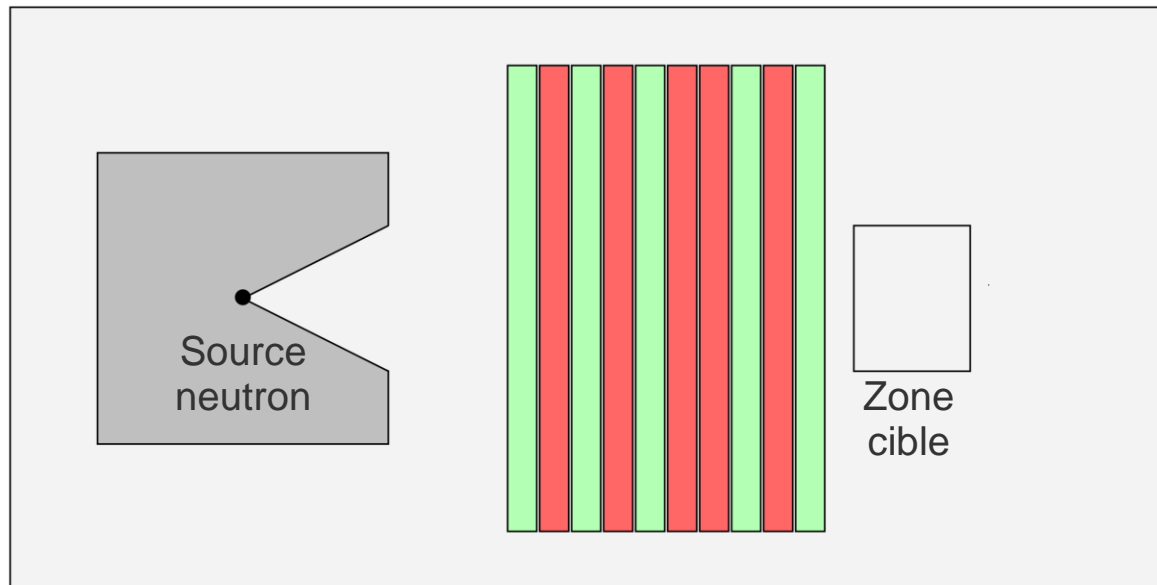


1 – Atténuation dans l'eau : Résultats



2 – Calcul couplé neutrons/photons

- Cas créé pour étudier la réduction de variance dans TRIPOLI-4®
 - Source de neutrons et score photon
 - Lamellage d'acier inox (vert) et de polyéthylène (rouge)



2 – Calcul couplé neutrons/photons

- Possibilité d'utiliser pour l'AMS des importances distinctes pour les neutrons et pour les photons
- Importances utilisées :

I_S
↑
Importance
« spatiale »

I_n
↑
Importance
INIPOND
neutron

I_p
↑
Importance
INIPOND
photon

2 – Calcul couplé neutrons/photons : Résultats

Type de simulation	Configuration	Score moyen	Erreur(%)	Gain en FOM
Analogue	N/A	1.06e+03	6.31	1.00
E.T.	Meilleure	1.03e+03	3.37	3.50
AMS	$I_S - I_S$	1.04e+03	0.71	79.51
	$I_n - I_p$	1.02e+03	2.02	9.73
	$\cdot - I_S$	1.01e+03	2.06	9.39
	$I_p - I_p$	1.03e+03	2.24	7.97
	$I_S - \cdot$	1.01e+03	3.61	3.05

Table 1. Débit d'équivalent de dose photon (en $\mu\text{Sv/h}$) pour le problème couplé neutron-photon.

2 – Calcul couplé neutrons/photons : Résultats

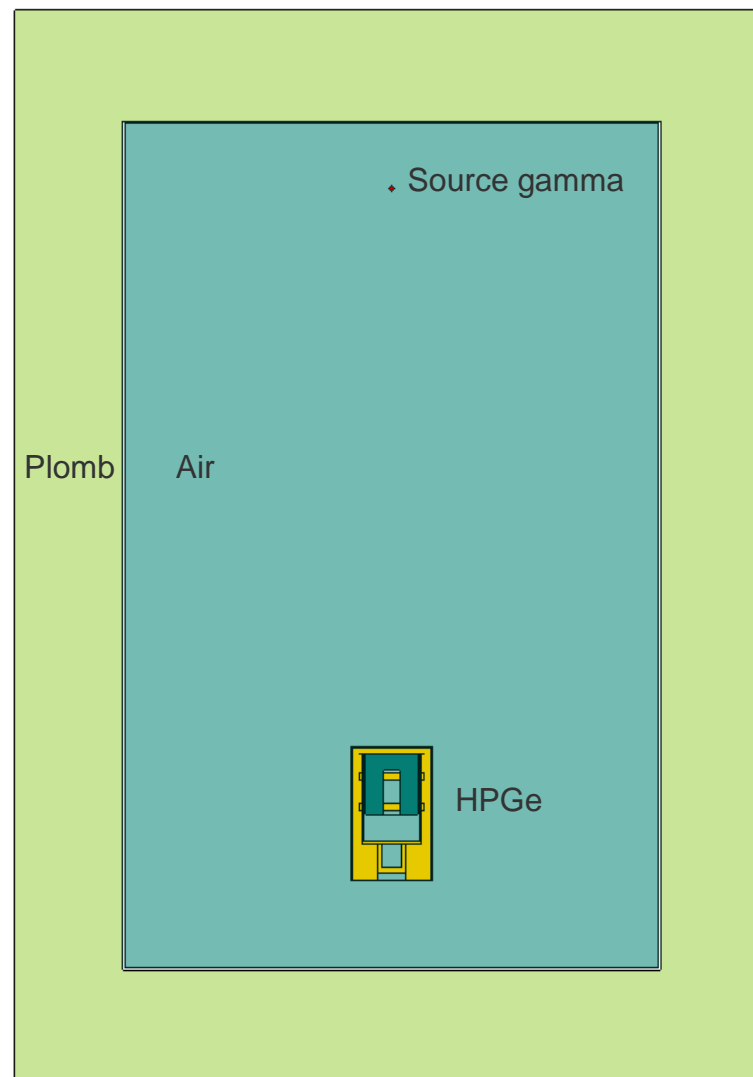
Plage d'énergies	Simulation	Score moyen	Erreur (%)	Gain
$E > 1 \text{ MeV}$	Analogue	8.97e+02	7.27	1.00
	E.T.(Meilleur)	8.81e+02	3.56	4.16
	AMS ($I_S - I_S$)	8.73e+02	0.81	80.38
	AMS ($I_n - I_p$)	8.46e+02	2.24	10.52
$E \in [100 \text{ keV}, 1 \text{ MeV}]$	Analogue	1.65e+02	8.01	1.00
	E.T.(Meilleur)	1.51e+02	8.49	0.89
	AMS ($I_S - I_S$)	1.68e+02	0.46	309.8
	AMS ($I_n - I_p$)	1.75e+02	4.26	3.55
$E < 100 \text{ keV}$	Analogue	6.95e-01	100	1.00
	E.T.(Meilleur)	2.02e-01	25.74	15.11
	AMS ($I_S - I_S$)	2.22e-01	2.74	1334
	AMS ($I_n - I_p$)	1.19e-01	21.37	21.93

Table 2. Répartition énergétique du débit d'équivalent de dose photon (en $\mu\text{Sv/h}$) pour le problème couplé neutron-photon.

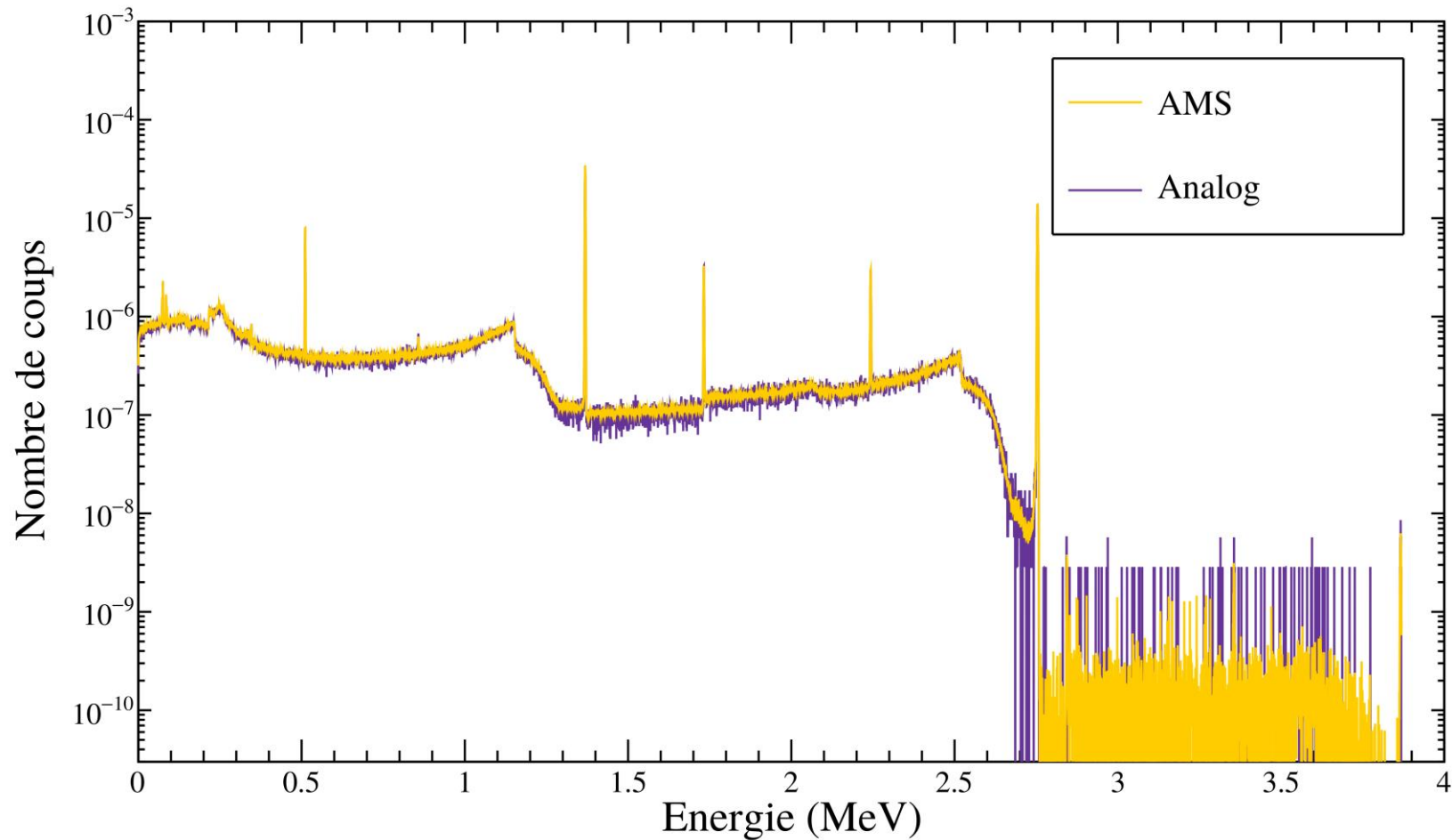
3 – Spectrométrie gamma

- Étude de cas réaliste
 - Transport photons/électrons/positrons
 - Source photon ayant le spectre d'émission du Sodium
 - Représentation fidèle d'un détecteur Germanium « HPGe »

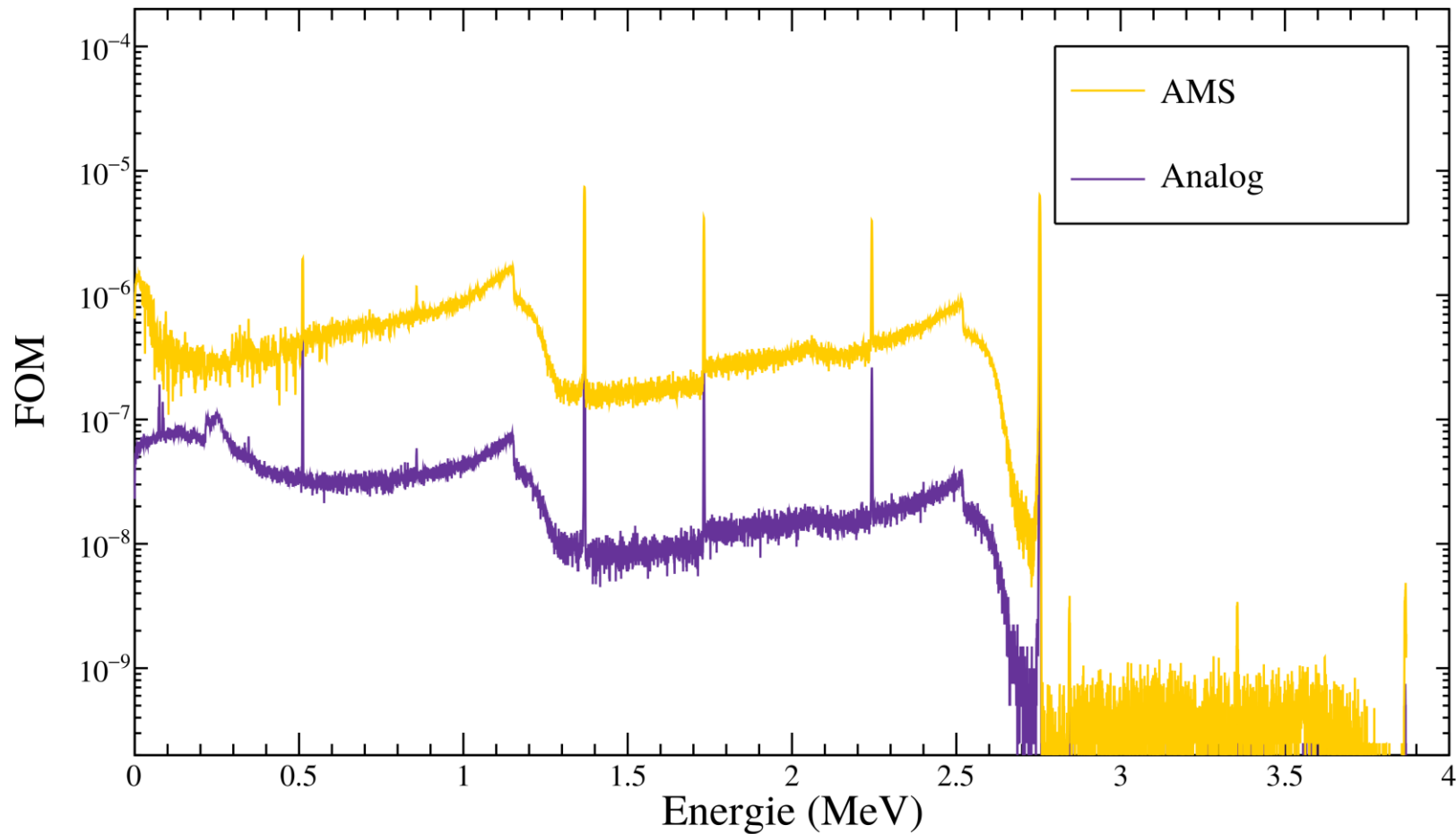
- Score : Pulse-height tally
 - TRIPOLI-4® ne permet pas d'activer la réduction de variance pour ces scores
 - La prise en compte des traces branchantes permet d'utiliser l'AMS dans cette situation



3 – Spectrométrie gamma : Résultats



3 – Spectrométrie gamma : Résultats



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea



Partie 5/5 Conclusion et perspectives

Conclusion et perspectives

- L'algorithme AMS est aujourd'hui implémenté dans TRIPOLI-4® et distribué aux praticiens.
- Points forts de la méthode :
 - Robustesse vis-à-vis de la carte d'importance (même pour une carte d'importance « géométrique »)
 - Caractère non biaisé quelque soit les paramètres numériques
 - On n' pas seulement accès au flux mais aussi aux trajectoires associées à l'événement rare
 - A priori utilisable pour tous les types de calculs à source fixe
- Limitations :
 - Dans certains cas, impossible d'être plus efficace que la transformée exponentielle
 - Éventuelles surcharges de mémoire dues au stockage des traces
- Travaux en cours: utilisation de la méthode AMS en simulation moléculaire (sampling of reactive paths), implémentation à NAMD.

Perspectives

- Il existe une fonction d'importance optimale !
 - Mise en place d'une méthode adaptative pour optimiser la fonction d'importance (thèse de Michel Nowak)
 - L'approche déterministe reste utile pour déterminer des approximations de la carte d'importance: optimisation de l'approche déterministe pour AMS
- Exponential transform versus AMS : Quel est le meilleur ? Comment combiner les deux ?

Références

- C.-E. Bréhier, M. Gazeau, L. Goudenège, TL et M. Rousset, *Unbiasedness of some generalized Adaptive Multilevel Splitting algorithms*, Annals Applied Probability (2016)
- H. Louvin, E. Dumonteil, TL, M. Rousset et C.M. Diop, *Adaptive Multilevel Splitting for Monte Carlo particle transport*, Proceedings ICRS13-RPSD2016 (2016)
- H. Louvin, E. Dumonteil et TL, *Three-dimensional neutron streaming calculations using Adaptive Multilevel Splitting*, Proceedings M&C 2017 (2017)
- H. Louvin, E. Dumonteil, TL et M. Rousset, C.M. Diop, *Adaptive Multilevel Splitting for Monte Carlo particle transport*, EPJ-N (2017)
- I. Teo, C. Mayne, K. Schulten et TL, *Adaptive multilevel splitting method for molecular dynamics calculation of benzamidine-trypsin dissociation time*, Journal of Chemical Theory and Computation, (2016).