

**MERCURE : UN CODE 3D INDUSTRIEL DE PROPAGATION DES GAMMA PAR LA
METHODE D'ATTENUATION EN LIGNE DROITE. APPLICATIONS EN
RADIOPROTECTION**

C. Suteau, M. Chiron et L. Luneville
Commissariat à l'Energie Atomique, DEN/DM2S/SERMA/LEPP
Centre d'Etudes de Saclay, Laboratoire d'Etudes de Protection et de Probabilités
Service d'Etudes des réacteurs et de Modélisation Avancée
91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France
e-mail : christophe.suteau@cea.fr

L. Berger et M. Huver
Canberra Eurisys S.A.
4, avenue des Frênes
78067 Saint-Quentin-en-Yvelines Cedex, France

Résumé

Le code de calcul MERCURE version 6.3 simule le transport des photons de 15keV à 10MeV dans des géométries à trois dimensions entre des sources volumiques et des points de calcul. Il est basé sur l'intégration de noyaux ponctuels d'atténuation en ligne droite avec facteurs d'accumulation.

Les facteurs d'accumulation utilisés prennent en compte les phénomènes physiques suivants : effet photoélectrique, la diffusion cohérente, la diffusion incohérente, la production de paires, les sources secondaires de rayonnement dues au bremsstrahlung et à la fluorescence. De plus, le code détermine le facteur d'accumulation d'une succession de plusieurs écrans grâce à une méthode itérative innovante.

MERCURE-6.3 intègre les noyaux ponctuels par une méthode Monte-Carlo pour lequel il détermine automatiquement les distributions d'importances.

Les résultats de MERCURE-6.3 sont comparés à ceux du code Sn TWODANT dans deux configurations 1D. L'une comprend 5 écrans composés de 4 matériaux différents et l'autre 3 écrans. Dans la configuration à 3 écrans, le deuxième écran est d'une épaisseur infinitésimale.

I.

Introduction

Le code de calcul MERCURE¹ version 6.3 simule le transport des photons de 15keV à 10MeV dans des géométries à trois dimensions entre des sources volumiques et des points de calcul. Il traite lors d'une même simulation toutes les sources et tous les points de calcul d'une même géométrie. Au point de calcul, Il peut déterminer, selon les choix de l'utilisateur, les grandeurs suivantes: le DED (débit d'équivalent de dose), le KERMA (Kinetic Energy Released in MATter) dans l'air et le flux énergétique. Pour le DED, deux réponses sont disponibles H*10 (débit d'équivalent de dose ambiant déposé dans un équivalent tissu sur une profondeur de 10mm) et EAP (débit de dose efficace pour une irradiation antéro-postérieur). Les modélisations et les facteurs de conversion du flux en DED sont issus de l'ICRP 74². Il en est de même pour les facteurs de conversion du flux en KERMA dans l'air.

La simulation du transport est réalisée par intégration de noyaux ponctuels d'atténuation en ligne droite avec facteurs d'accumulation. L'intégration suivant l'énergie de la source est réalisée dans l'approximation multigroupe. Pour un groupe d'énergie g_i , une succession de M écrans et une grandeur à calculer nommée r, le noyau ponctuel d'atténuation en ligne droite, K_r , est donné par l'équation (1) où e_j représente l'épaisseur du j^{ème} écran (comptée sur le trajet entre le point source et le point de calcul), $\mu_j(g_j)$ la section efficace macroscopique totale du matériau composant le j^{ème} écran.

$$K_r(g_i, \mu_1(g_1), \dots, \mu_j(g_j), \dots, \mu_M(g_M), e_1, \dots, e_j, \dots, e_M) = \frac{e^{-\sum_{j=1}^M \mu_j(g_j) * e_j}}{4\pi \left(\sum_{j=1}^M e_j \right)^2} \quad (1)$$

Le noyau ponctuel représente le flux des photons directs c'est-à-dire le flux sans choc. Le calcul du noyau ponctuel par MERCURE-6.3 est présenté à la section 0.

Pour prendre en compte la contribution des photons diffusés, le noyau ponctuel est multiplié par un facteur multiplicatif synthétique nommé facteur d'accumulation. Le facteur d'accumulation est fonction de la grandeur à calculer r, de l'épaisseur, e_j , et de la nature des matériaux, m_j , des écrans traversés. La valeur du noyau ponctuel avec facteurs d'accumulation est donnée par l'équation (2). La section 0 présente le calcul par MERCURE-6.3 du facteur d'accumulation pour un écran unique. La section 0 présente le calcul par MERCURE-6.3 du facteur d'accumulation pour une succession de plusieurs écrans.

$$G_r(g_i, m_1, \dots, m_M, \mu_1(g_1), \dots, \mu_M(g_M), e_1, \dots, e_M) = B_r(g_i, m_1, \dots, m_M, e_1, \dots, e_M) * K_r(g_i, \mu_1(g_1), \dots, \mu_M(g_M), e_1, \dots, e_M) \quad (2)$$

R, la valeur de la grandeur r au point de calcul, est exprimée par l'équation (3) où N représente le nombre de groupes d'énergie, $F_r(g_i)$ le facteur de conversion du flux, $S_v(g_i)$ l'intensité de la source.

$$R = \sum_{i=1}^N F_r(g_i) * \left[\iiint_V G_r(g_i, m_1, \dots, m_M, \mu_1(g_1), \dots, \mu_M(g_M), e_1, \dots, e_M) * S_v(g_i) dv \right] \quad (3)$$

L'intégration spatiale et énergétique de noyaux ponctuels avec facteur d'accumulation est réalisée par une méthode de Monte-Carlo. Cette méthode est présentée dans la section 0.

II. Méthode de calcul de MERCURE-6.3

A. Flux sans choc

Les sections efficaces macroscopiques totales des matériaux de la simulation sont calculées par MERCURE-6.3 à partir des compositions chimiques des matériaux, fournies par l'utilisateur, et des sections efficaces microscopiques totales. Les sections efficaces microscopiques totales de la bibliothèque exploitée par MERCURE-6.3 sont issues de la bibliothèque JEF2.2³. Elles prennent en compte les interactions photoélectrique, cohérente, incohérente ainsi que la production de paires. Elles sont mises en groupe par le code ELEGAM2⁴.

La bibliothèque MERCURE-6.3 contient les sections efficaces pour la totalité des éléments chimiques de la classification périodique compris entre l'hydrogène (Z=1) et l'einsteinium (Z=99).

Elle couvre le domaine d'énergie 15keV-10MeV divisé en 195 groupes. La division en 195 groupes d'énergie permet une très bonne description des sections efficaces même aux énergies des raies de fluorescence K et L où la section efficace en fonction de l'énergie est discontinue.

La figure 1 présente la section efficace totale du plomb en fonction de l'énergie. La courbe en pointillés correspond aux valeurs ponctuelles extraites de JEF2.2. La courbe en trait plein correspond aux valeurs mises en groupes. Les deux courbes sont très proches, quasiment confondues.



Figure 1 : Section efficace total en barns en fonction de l'énergie (valeurs ponctuelles et valeurs mises en groupes)

B. Facteur d'accumulation d'un écran unique

La bibliothèque de facteurs d'accumulation de MERCURE-6.3, contient les facteurs d'accumulation de l'ensemble des éléments chimiques de la classification périodique compris entre l'hydrogène ($Z=1$) et l'einsteinium ($Z=99$). Ils sont tabulés pour 22 épaisseurs comprises entre 0.5 et 50 longueurs de relaxation et 195 groupes d'énergie couvrant le domaine 15keV-10MeV. Les groupes d'énergie sont identiques à ceux des sections efficaces totales microscopiques.

Les facteurs ont été calculés à partir de calculs de transport réalisés avec le code de calcul aux ordonnées discrètes TWODANT⁵, suivant la méthode développée par KITSOS, et al.⁶. Ainsi les facteurs d'accumulation prennent en compte les phénomènes physiques suivants : effet photoélectrique, la diffusion cohérente, la diffusion incohérente, la production de paires, les sources secondaires de rayonnement dues au bremsstrahlung et à la fluorescence. Les calculs de transport sont effectués dans des géométries sphériques avec des sources isotropes monocinétiques quasi ponctuelles (rayon égal à 0.01 longueurs de relaxation). Les sections efficaces utilisées sont extraites de l'évaluation JEF2.2. Les groupes d'énergie, au nombre de 218, couvrent le domaine 1keV-10MeV. Le maillage spatial comprend au moins 28 mailles par longueurs de relaxation. Pour l'anisotropie des sections efficaces de diffusion, l'approximation P_7 (développement en polynôme de Legendre de degré 7) est utilisée. Pour le maillage angulaire l'approximation S_{64} a été retenue.

Pour un matériau composé d'un unique élément chimique, MERCURE-6.3 détermine le facteur d'accumulation à partir des valeurs tabulées dans la bibliothèque pour l'élément chimique considéré. Pour un matériau composé de plusieurs éléments chimiques, le code de calcul utilise la notion de numéro atomique équivalent (Z -équivalent⁷). Le Z -équivalent détermine l'élément chimique dont les propriétés d'atténuation des photons sont les plus proches de celles du matériau. Le facteur

d'accumulation pour une épaisseur quelconque (ne faisant pas partie des valeurs tabulées) est calculé par interpolation semi-logarithmique.

C. Facteur d'accumulation d'une succession d'écrans

Considérons deux écrans consécutifs d'épaisseur respective X_1 et X_2 (en longueurs de relaxation) et de facteur d'accumulation B_1 et B_2 . MERCURE-6.3 détermine le facteur d'accumulation de l'ensemble des écrans, $B_{1,2}(X_1, X_2)$, à l'aide de la formule SERMA⁸⁹ décrite par l'équation (5).

$$B_{1,2}(X_1, X_2) = \frac{B_1(X_1)}{B_2(X_1)} B_2(X_1 + X_2) F_{1,2}(X_1, X_2) \quad (5)$$

La fonction $F_{1,2}(X_1, X_2)$ est donnée par l'équation (6)

$$F_{1,2}(X_1, X_2) = \left[\frac{\alpha_{1,2} + X_2^{\beta_{1,2}}}{\alpha_{1,2}} \right]^p \quad (6)$$

avec

$$\begin{cases} \log(\alpha_{1,2}) = a \log^3(X_1) + b \log^2(X_1) + c \log(X_1) + d \\ \log(\beta_{1,2}) = e \log^3(X_1) + f \log^2(X_1) + g \log(X_1) + h \end{cases} \quad (7)$$

Les coefficients a, b, c, d, e, f, g, h et p sont déterminés empiriquement à partir de calcul de transport réalisés dans les mêmes conditions que ceux de la section 0. Ces coefficients sont tabulés dans la bibliothèque de MERCURE-6.3 pour toutes les combinaisons de 9 matériaux (81 combinaisons) : azote, eau, aluminium, fer, zirconium, baryum, tungstène, plomb et uranium. A chaque groupe d'énergie et chaque combinaison, il correspond un jeu de coefficient. Pour les matériaux ne faisant pas parti de ceux de la bibliothèque, la valeur de $F_{1,2}(X_1, X_2)$ est obtenue par interpolation linéaire de F en fonction du Z-équivalent du matériau. Si le Z-équivalent du premier écran vaut 16 et celui du second vaut 58, $F_{1,2}(X_1, X_2)$ sera obtenu par interpolation linéaire suivant Z-équivalent entre $F_{Al,Ba}(X_1, X_2)$, $F_{Al,W}(X_1, X_2)$, $F_{Fe,Ba}(X_1, X_2)$ et $F_{Fe,W}(X_1, X_2)$.

Pour une succession d'écrans (plus de deux), MERCURE-6.3 utilise un procédé itératif. Pour décrire ce procédé, nous considérons une succession de N écrans numérotés de manière croissante depuis la source vers le point de calcul. Chaque itération comprend deux étapes :

- MERCURE-6.3 calcule le facteur d'accumulation des deux premiers écrans suivant la formule SERMA (Cf. section 0)
- MERCURE-6.3 remplace ces deux écrans par un unique écran équivalent composé d'un élément chimique unique. Pour cela le code de calcul détermine Z_{eq} , le numéro atomique de l'élément chimique, et X_{eq} l'épaisseur de l'écran. Un écran est considéré comme équivalent s'il a le même facteur d'accumulation que les deux écrans qu'il remplace et si son épaisseur, en longueurs de relaxation, est proche de celle des deux écrans.

Ainsi à l'issue de la première itération, le calcul du facteur d'accumulation des N écrans est ramené au calcul du facteur d'accumulation de N-1 écrans. En itérant, le problème est ramené au calcul du facteur d'accumulation de deux écrans qui est effectué suivant la formule SERMA (Cf. section 0). La figure 2 présente la mise en œuvre du procédé itératif pour trois écrans.

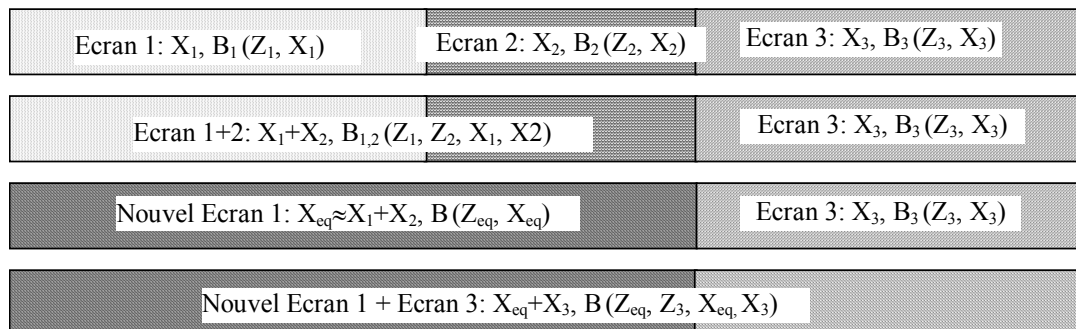


Figure 2 : détermination du facteur d'accumulation pour une succession de 3 écrans

Pour déterminer Z_{eq} , MERCURE-6.3 fait appel à des réseaux de neurones qui prennent en entrée cinq paramètres caractérisant la configuration des deux écrans et qui fournissent en sortie le numéro atomique Z_{eq} . Les cinq paramètres sont E l'énergie moyenne du groupe d'énergie, Z_1 et Z_2 , les Z-équivalents de chacun des écrans, ainsi que X_1 et X_2 , l'épaisseur en longueurs de relaxation de chacun des écrans. Préalablement à leur implémentation dans MERCURE-6.3, ces réseaux de neurones ont subi un apprentissage sur une base d'apprentissage contenant un grand nombre (environ 288000) de configurations à deux écrans. Ses configurations couvrent le domaine suivant :

- 15keV–10MeV,
- jusqu'à 25 longueurs de relaxation pour chaque écran,
- numéro atomique des matériaux variant de 7 (azote) à 92 (plutonium)

Les apprentissages ont été réalisés à l'aide du code NEMO¹⁰ qui s'appuie sur SNNS¹¹ (Stuttgart Neural Network Simulator).

D. Intégration de noyaux ponctuels

L'intégration de noyaux ponctuels est effectuée par une méthode de Monte-Carlo. Les sources sont maillées spatialement (Maillage cartésien, cylindrique ou sphérique) et les groupes d'énergie constituent le maillage énergétique. L'association d'une maille spatiale et d'un groupe d'énergie forme une case. Une source avec M mailles spatiales et G groupes d'énergie contient $G \cdot M$ cases. MERCURE-6.3 détermine automatiquement la distribution d'importance des cases pour chaque source et chaque point de calcul. Le code attribue à chaque case une importance proportionnelle au produit de l'intensité de l'émission de la case et de la contribution au résultat du point de calcul du centre géométrique de la case. Ainsi lors du calcul Monte-Carlo, les cases qui contribuent le plus sont échantillonnées le plus fréquemment. Cela permet d'accélérer la décroissance de la variance.

III. Applications

A. Configuration 1D avec 5 écrans

Pour valider la méthode de calcul des facteurs d'accumulation d'une succession d'écrans, des comparaisons avec le code TWODANT, dans des configurations 1D, ont été réalisées. La figure 3 présente les résultats obtenus pour une configuration sphérique avec une source quasi ponctuelle, isotrope et monocinétique de 1MeV. La configuration comprend 5 écrans composés de 4 matériaux différents : 3lr (longueurs de relaxation) de fer, 8lr d'eau, 6lr de plomb, 8lr d'aluminium et 4lr de plomb. Les calculs TWODANT ont été réalisés suivant la méthode développée par KITSOS, et al. (Cf. section 0). Pour améliorer la lisibilité du graphique, les résultats sont présentés sous forme de facteurs d'accumulation.

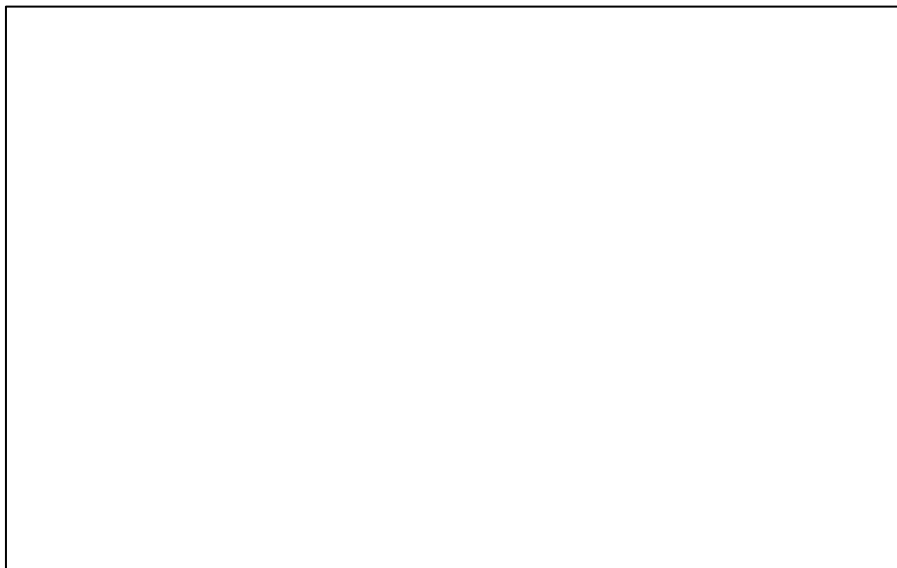


Figure 3 : Comparaison MERCURE-6.3 / TWODANT pour 5 écrans

Il apparaît que les deux courbes sont assez proches. Dans les trois premiers écrans, l'écart entre les résultats MERCURE-6.3 et TWODANT ne dépasse pas 17%. Il est maximal au début du dernier écran avec 36.1%. A la fin du dernier écran, il est de 26.6%.

B. Configuration 1D avec un écran infinitésimal

La figure 4 présente les résultats obtenus avec MERCURE-6.3 et TWODANT dans une configuration 1D avec trois écrans (8lr de graphite, <0.001lr d'aluminium, 25lr de plomb) sphériques et une source quasi ponctuelle et monocinétique de 400keV. Le deuxième écran de cette configuration a une épaisseur infinitésimale (inférieure à 0.001lr).

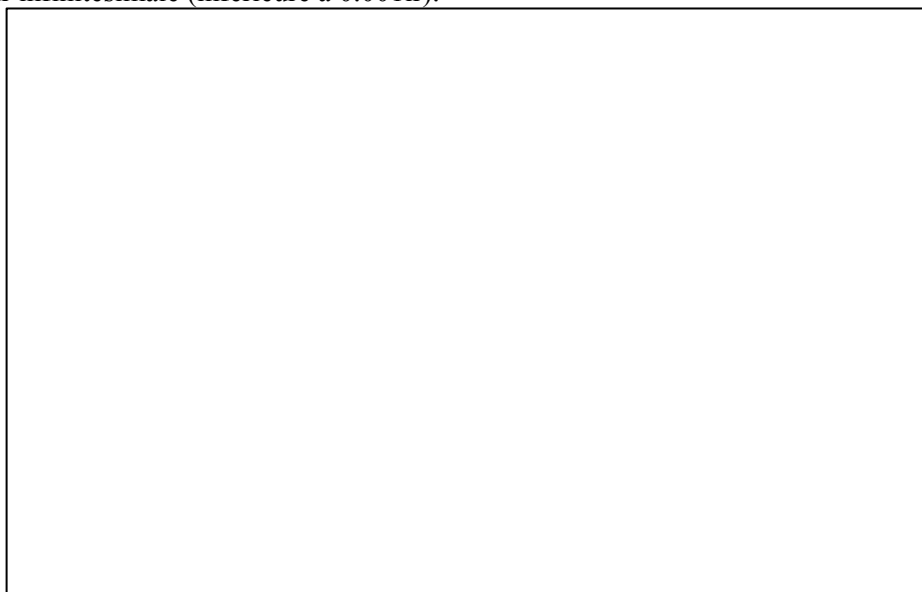


Figure 4 : Convergence d'une configuration à 3 écrans vers une configuration à 2 écrans

D'un point de vue physique, les facteurs d'accumulation d'une telle configuration doivent tendre vers ceux d'une configuration composée uniquement du premier et du troisième écran. Les courbes TWODANT avec trois écrans (C/Al/Pb) et deux écrans (C/Pb) sont confondues. Cela confirme que les facteurs d'accumulation de la configuration à 3 écrans convergent vers ceux d'une configuration à 2 écrans.

Les courbes MERCURE-6.3 sont confondues. Donc, MERCURE-6.3 assure la convergence des facteurs d'accumulation vers ceux d'une configuration à deux écrans. Nous notons que les courbes MERCURE-6.3 et TWODANT ne sont pas confondues. L'écart à la fin du deuxième écran est de 14%. L'écart maximum est de 35.6% pour une épaisseur de 12 lr.

IV. Conclusion

Le code de calcul MERCURE version 6.3 simule le transport des photons par la méthode de l'intégration de noyaux ponctuels d'atténuation en ligne droite avec facteurs d'accumulation. Il détermine les facteurs d'accumulation d'une succession d'écrans grâce à une méthode itérative basée sur la formule SERMA. Les comparaisons de résultats MERCURE et TWODANT dans des configurations 1D illustrent la validité et la performance de cette méthode.

Il existe une version industrielle (MERCURAD¹²) de MERCURE-6.3 qui est munie d'une interface homme machine graphique. Cette interface permet de construire et de visualiser des scènes complètes (géométrie, sources, détecteurs) et d'effectuer des simulations. MERCURAD permet de calculer les mêmes grandeurs que MERCURE-6.3 et utilise les mêmes méthodes numériques. En contrepartie de son caractère "industriel", ses possibilités géométriques ont été réduites.

Références

- ¹ Christophe SUTEAU "MERCURE-6.3 : Identification Note," Rapport Technique Interne, Centre d'Etudes de Saclay (2002)
- ² ICRP PUBLICATION 74, "Conversion Coefficients for use in Radiological Protection against External Radiation," adopté par l'ICRP et l'ICRU en septembre 1995
- ³ File "JEF-2.2," Data Bank, Nuclear Energy Agency (janvier 1992)
- ⁴ CODE ELEGAM-2, Rapport interne CEA, Saclay
- ⁵ R. E. ALCOUFFE, F. W. BRINKLEY, D. R. MARR, and R. D. O'DELL, "User's Guide for Twodant: A Code Package for Two-Dimensional, Diffusion-Accelerated, Neutral-Particle, Transport", Vol. 1, p.1, LA-10049-M, Revised Nov.1989, Group X-6, Los Alamos National Laboratory.
- ⁶ S. KITSOS, C. M. DIOP, A. ASSAD, J. C. NIMAL, and P. RIDOUX "Improvement of Gamma-Ray Sn Transport Calculations Including Coherent and Incoherent Scatterings and Secondary Sources of Bremsstrahlung and Fluorescence: Determination of Gamma-Ray Buildup Factors," *Nucl. Sci. Eng.*, **123**, 215-227 (1996)
- ⁷ H. GOLDSTEIN and J.E. WILKINS " Calculation of the Penetration of Gamma Rays " NYO 3075 (1954)
- ⁸ Ali ASSAD, Maurice CHIRON, Jean Claude NIMAL, Cheikh M'backé DIOP, and Philippe RIDOUX, "General Formalism for Calculating Gamma-Ray Buildup Factors in Multilayer Shields into MERCURE-6 Code," 9th Int. Conf. Radiation Shielding, Tsukuba, Ibaraki, Japan, 493, (1999), édité par Atomic Energy Society of Japan.
- ⁹ C. SUTEAU, M. CHIRON, G. ARNAUD, "An Improvement of the MERCURE-6's General Formalism for Calculating Gamma-Ray Buildup Factors in Multilayer Shields", accepté par *Nucl. Sci. Eng.*, à paraître.
- ¹⁰ G. DREYFUS, J.-M. MARTINEZ, M. SAMUELIDES, M. B. GORDON, F. BARDAN, S. THIRIA, and L. HERAULT, in *Réseaux de Neurones - Méthodologie et Application*, édité par EYROLLES, Vol. 1, Chap. 2, p.65.
- ¹¹ A. ZELLA and Co. "SNNS Stuttgart Neural Network Simulator – User Manual, Version 4.2", Institute for Parallel and Distributed High Performance Systems.
- ¹² L. BERGER, "MERCURAD – Manuel d'utilisation " DEX 030 67183 A, CANBERRA EURISYS SA.