

CEA/DEN – Université Paris-Saclay

Service d'Études des Réacteurs et de
Mathématiques Appliquées - SERMA

DEN/DANS/DM2S/SERMA
CEA/Saclay
91191 Gif-sur-Yvette

Propositions de sujets de stages et de thèses

Internship and PhD topics proposals

Année académique / Academic Year 2019-2020



30 Octobre 2019

Sommaire – Content

Introduction / Forewords	p. 3
Présentation générale du SERMA / SERMA general overview	p. 5
Sujets de stages / Internship topics	p. 9
Modélisation / Modeling	p. 11
Études et benchmarking / Studies and benchmarking	p. 29
Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and calculation codes	p. 51
Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development	p. 65
Sujets de thèses / PhD topics	p. 103

Introduction

Proposé par les chercheurs du SERMA (DANS/DM2S), une unité de R&D du CEA Paris-Saclay également membre du Département de Physique des 2 Infinis de l'Université Paris-Saclay, ce recueil s'adresse aux étudiants de Master à la recherche d'un stage pendant l'année universitaire 2019-2020 et/ou d'une thèse pour la rentrée universitaire 2020. L'expérience prouve que coupler stage et thèse s'avère souvent judicieux pour les étudiants, qui peuvent ainsi confirmer (ou pas) leur envie de poursuivre en thèse. Si certains des sujets s'adressent en premier lieu à des parcours spécialisés (physique des réacteurs nucléaires, Génie Atomique du CEA/INSTN, entre autres), d'autres sont ouverts à des étudiants motivés en provenance de filières mathématiques appliquées, analyse numérique ou informatique. Les encadrants auteurs des sujets sont disponibles pour vous donner toute précision.

Forewords

These internships and thesis subjects are proposed by the SERMA (DANS/DM2S) researchers to students looking for a Master internship during the 2019-2020 academic year or for a PhD to begin in September or October 2020. SERMA is a R&D unit of CEA Paris-Saclay as well as a member of the Department of the Physics of the 2 Infinities of the University Paris-Saclay. Past experience shows that it is a good idea to couple an internship and a PhD subject, allowing the student to confirm (or not) his or her wish to engage in a PhD work. If some of the subjects do concern student engaged in dedicated tracks (nuclear reactor physics and engineering, « Génie atomique » at CEA/INSTN, for example), others are open to motivated students from other backgrounds, especially applied maths or computer science. Do not hesitate in contacting the researchers proposing subjects.

Présentation générale du SERMA / SERMA general overview

Le *Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées* – SERMA –

est l'un des trois Services qui composent le *Département de Modélisation des Systèmes et des Structures (DM2S)*, unité de recherche appliquée de la *Direction de L'Énergie Nucléaire* du CEA (DEN) à Saclay.

Le **DM2S** est une unité de R&D de près de 400 collaborateurs qui rassemble et développe des compétences pour l'expérimentation, la modélisation, la simulation et les études des systèmes nucléaires, dans les trois thématiques :

- **Thermo-mécanique des structures, SEMT** : *Service d'Études Mécaniques et Thermiques* ;
- **Mécanique des fluides et thermo-hydraulique, STMF** : *Service de Thermohydraulique et de Mécanique des Fluides* ;
- **Neutronique et transport des rayonnements, SERMA.**

Ces savoir-faire sont complétés par des compétences transverses en mathématiques appliquées, analyse numérique, informatique et génie logiciel. Les missions du **DM2S** visent principalement au développement, à la capitalisation et au transfert des connaissances dans ces disciplines de base et en physique des réacteurs nucléaires, ceci sous forme d'outils mis à disposition des ingénieurs-chercheurs, concepteurs, exploitants et évaluateurs de systèmes nucléaires, toutes filières confondues.

Le **SERMA**, unité d'environ 80 permanents, a pour missions de développer des logiciels de calcul, de réaliser des études avancées ou pionnières et d'apporter une expertise dans le domaine de la **neutronique**, englobant la **physique du cœur** des réacteurs nucléaires, la **sûreté-criticité**, la **radioprotection** et l'**instrumentation nucléaire**, afin de répondre aux besoins propres du CEA et à ceux de ses partenaires industriels, en particulier **EDF, Framatome et Orano**.

Ainsi, le SERMA :

The *Service of Reactor Studies and Applied Mathematics* - SERMA -

is one of the three Services that make up the *Department of Systems and Structural Modeling (DM2S)*, an applied research unit of CEA's *Nuclear Energy Division (DEN)* at Saclay.

The **DM2S** is a R&D unit of nearly 400 employees that gathers and develops skills for experimentation, modeling, simulation and studies of nuclear systems, in the three topics:

- **Thermal-mechanics of structures, SEMT**: *Service of Mechanical and Thermal Studies*;
- **Fluid Mechanics and Thermohydraulics, STMF**: *Service of Thermohydraulics and Fluid Mechanics*;
- **Neutronics and radiation transport, SERMA.**

This know-how is complemented by transversal skills in applied mathematics, numerical analysis, computer science and software engineering. The DM2S missions are mainly aimed at the development, capitalization and transfer of knowledge in these basic disciplines and in nuclear reactor physics, in the form of tools made available to engineers-researchers, engineers-designers, operators and system evaluators for all reactor lines.

The **SERMA**, a unit of about 80 permanents, has the mission to develop computer software, to carry out advanced or pioneering studies and to bring expertise in the field of **neutronics**, including the **core physics** of the nuclear reactors, the **criticality-safety**, **radiation shielding** and **nuclear instrumentation**, to meet the specific needs of the CEA and those of its industrial partners, in particular **EDF, Framatome and Orano**.

Thus, the SERMA:

- designs numerical simulation software that addresses all the issues related to the deterministic and stochastic

- conçoit des logiciels de simulation numérique traitant l'ensemble des problématiques relatives au transport déterministe et stochastique des particules ainsi qu'à l'évolution temporelle isotopique des milieux dans lesquels ces particules se propagent,
- élabore sur cette base des modèles de calcul adaptés à des configurations physiques complexes (réacteurs nucléaires, installations du cycle,...),
- maintient en conditions opérationnelles ces outils de calcul développés,
- développe et maintient la chaîne de traitement des données nucléaires requises par les différents logiciels de calcul dont il a la charge.

La conception de ces outils de simulation numérique repose sur une R&D qui, outre la neutronique proprement dite, fait appel aux mathématiques appliquées, à la modélisation, à la physique nucléaire, à l'informatique et au génie logiciel. Par ailleurs, les études multiphysiques entreprises au sein du **DM2S** mobilisent conjointement le **SERMA**, le **SEMT** et le **STMF**.

Le SERMA est structuré en quatre entités opérationnelles :

- le **LLPR**, *Laboratoire de Logiciels pour la Physique des Réacteurs*,
- le **LTSD**, *Laboratoire du Transport Stochastique et Déterministe*,
- le **LPEC**, *Laboratoire de Physique et d'Étude des Cœurs*,
- **CP2C**, *la Cellule de Protection et Pôle de compétences en Criticité du CEA*.

Chacun de ces laboratoires accueille des "Visiting researchers", des thésards et des stagiaires.

Ses missions s'inscrivent directement dans les axes de recherche sur l'énergie nucléaire :

- Optimisation du nucléaire actuel,
- Cycle du combustible nucléaire,
- Démantèlement,
- Radioprotection,
- Réacteurs du futur,
- Sécurité des installations nucléaires,
- Réacteur de recherche,
- Fusion thermonucléaire.

Pour le SERMA, il s'agit de :

- transport of particles as well as the isotopic time evolution of materials in which these particles propagate,
- develops on this basis calculation models adapted to complex physical configurations (nuclear reactors, cycle facilities, ...),
- maintains in operational conditions these developed computing tools,
- develops and maintains the nuclear data processing chain required by the various calculation softwares for which it is responsible.

The design of these numerical simulation tools is based on R&D which, in addition to neutronics itself, uses applied mathematics, modeling, nuclear physics, computer science and software engineering. In addition, the multiphysics studies undertaken within the DM2S jointly mobilize **SERMA**, **SEMT** and **STMF**.

SERMA is structured into four operational entities:

- **LLPR**, the *Laboratory of Software for the Physics of Reactors*,
- **LTSD**, the *Laboratory of Stochastic and Deterministic Transport*,
- **LPEC**, the *Laboratory of Core Physics and Studies*
- **CP2C**, the *Radiation shielding unit* and the *CEA Safety-Criticality Competence Pole*.

Each of these laboratories hosts Visiting Searchers, PhDs and trainees.

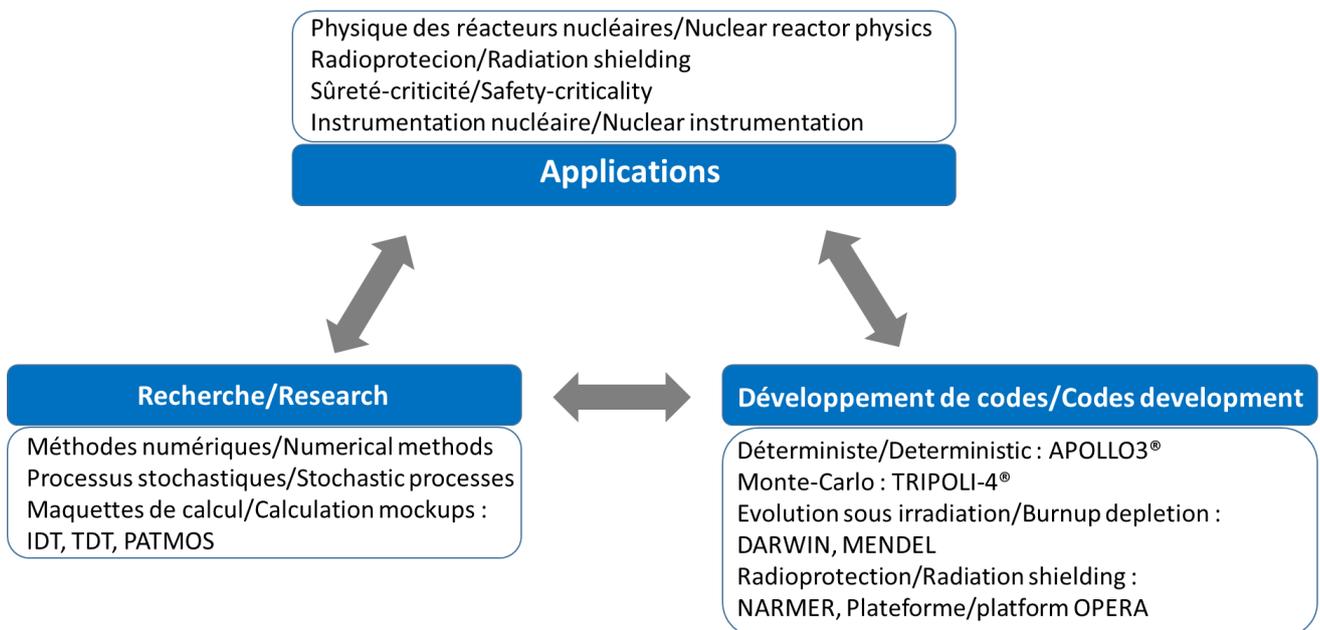
Its missions fit directly into the research axes on nuclear energy:

- Optimization of the current nuclear power,
- Nuclear fuel cycle,
- Dismantling,
- Radiation Protection,
- Reactors of the future,
- Safety of nuclear installations,
- Research reactor,
- Thermonuclear fusion.

For SERMA, this is:

- **To develop innovative modeling** in reactor physics.

<ul style="list-style-type: none"> • Développer des modélisations innovantes en physique des réacteurs. • Développer, dans le cadre de la plateforme de simulation neutronique multi-filières de la DEN, des outils de calcul : <ul style="list-style-type: none"> ▪ de traitement des données nucléaires, ▪ d'évolution temporelle des nucléides, ▪ de transport de particules déterministe et probabiliste. • Mener des études et expertises appuyées sur ses outils de calcul pour le compte du CEA/État (installations existantes et projets), de ses partenaires industriels, d'institutions et clients externes. • Développer la méthodologie et les outils logiciels associés permettant d'apporter un soutien aux exploitants d'Installations Nucléaires de Base (INB) et aux équipes de projet dans le domaine de la sûreté-criticité et de la radioprotection. • Capitaliser en continu l'expertise et le retour d'expérience des utilisateurs (internes et industriels) de ses outils de calcul dans ses activités « R&D » et « Études ». • Mettre en place et animer des formations pour les métiers de la sûreté-criticité et développer des guides méthodologiques dans ce domaine. • Contribuer à la conception d'expériences en réacteur (expérimentaux ou de puissance) et de l'instrumentation associée, ainsi qu'à l'interprétation d'expériences. • Développer des compétences de base en analyse numérique, algorithmique, informatique scientifique, en neutronique et propagation des rayonnements au travers de ses actions. • Contribuer à la transmission des connaissances dans le domaine de la neutronique, la propagation des rayonnements et de la simulation numérique par sa participation à l'enseignement universitaire et celui des grandes écoles d'ingénieurs ainsi que par son implication dans la formation professionnelle. 	<ul style="list-style-type: none"> • To develop, as part of the DEN multi-lines neutron simulation platform, computational tools related to: <ul style="list-style-type: none"> ▪ nuclear data processing, ▪ time evolution of nuclides, ▪ deterministic and probabilistic particle transport. • To conduct studies and expertises supported by its calculation tools on behalf of the CEA/State (existing facilities and projects), its industrial partners, institutions and external clients. • To develop methodology and associated software tools to support Basic Nuclear Installation (BNI) operators and project teams in the area of criticality safety and radiation protection. • To capitalize continuously the expertise and feedback of users (internal and industrial) of its calculation tools in its « R & D » and « Studies » activities. • To set up and lead training courses for criticality-safety occupations and develop methodological guides in this area. • To contribute to the design of reactor experiments (experimental or power) and associated instrumentation, as well as the interpretation of experiments. • To develop basic skills in numerical analysis, algorithmics, computational science, neutronics and propagation of radiation through its actions. • To contribute to the transmission of knowledge in the field of neutronics, radiations propagation and numerical simulation through its participation in university education and engineering schools as well as through its involvement in vocational training.
---	--



Scheme of the different activity areas of the SERMA and their links.

Sujets de stages

Internship topics

Les sujets de stages proposés sont répartis en quatre catégories et numérotés avec une lettre préfixée se référant à la catégorie d'appartenance du sujet :

- **Modélisation** : N° **M1 à M6**
- **Études et benchmarking** : N° **E1 à E7**
- **Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul** : N° **V1 à V4**
- **Développement de méthodes et de codes de calcul** : N° **D1 à D10**

The topics are classified into four categories : and numbered with a prefixed letter referring to the membership category of the topic:

- **Modeling**: N° **M1 to M6**
- **Studies and benchmarking**: N° **E1 to E7**
- **Verification and validation of methods and calculation codes** : N° **V1 to V4**
- **Methods and computational codes development**: N° **D1 to D10**

Modélisation

Modeling

Sujets N° : M1 à M6
Topics N° : M1 to M6

Titre du stage

MODÉLISATION D'UN TRANSITOIRE D'ÉJECTION DE GRAPPE DANS LE E-CŒUR SPERT-III PAR APOLLO3®

Internship title

CALCULATION OF ROD EJECTION ACCIDENT ON THE SPERT-III E-CORE REACTOR BY APOLLO3®

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling
- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Ce stage se situe dans une collaboration internationale visant à calculer un transitoire d'éjection de grappe dans le cœur 'E-Core' du réacteur expérimental SPERT-III. Le candidat contribuera au développement d'un schéma de calcul multiphysique pour la simulation de transitoires rapides en transport neutronique avec contre-réactions thermiques, qui modifient la réactivité du système au cours du transitoire. Le code APOLLO3®, développé au CEA, sera utilisé pour calculer les distributions 3D de flux neutronique en résolvant le problème du transport des neutrons par la *méthode des caractéristiques* (MOC).

Internship context

This internship is proposed in the frame of an international collaboration aiming to calculate a rod ejection transient in the E-Core SPERT-III reactor. The candidate will contribute to the development of a multiphysics calculation scheme in full neutron transport with thermal feedback, which changes the system reactivity during the transient. The computer code APOLLO3®, developed at CEA, will be used to calculate 3D neutron flux distributions by resolving the transport equation with the method of characteristics (MOC).

Description du sujet du stage

Le relâchement d'énergie thermique causé par les réactions nucléaires est issu du phénomène migratoire des neutrons dans un milieu contenant de la matière fissile. Le comportement des noyaux qui interagissent avec les neutrons change notamment avec la température, et la prise en compte du transfert thermique est requise pour calculer correctement la réponse du système au flux des neutrons. En plus de la température, des changements de densité de milieu peuvent aussi se produire, par exemple en présence d'un caloporteur liquide ou gazeux. Ces phénomènes physiques évoluent dans le temps sur des échelles très différentes, ce qui complique davantage la mise en place des simulations numériques.

Le travail de stage porte sur l'implémentation d'un couplage multiphysique visant à reproduire des transitoires de puissance produits par l'éjection d'une grappe cruciforme dans le cœur du réacteur expérimental SPERT-III. Il s'agit d'un petit réacteur construit dans les années '60 pour étudier le comportement des réacteurs à eau sous pression. Plusieurs campagnes d'essais ont été effectuées et nous disposons de mesures expérimentales pour la validation des simulations. La distribution de la puissance thermique produite sera calculée en transport neutronique par le solveur TDT d'APOLLO3®, qui emploie la "méthode des caractéristiques longues" (MOC). Des approximations seront nécessaires pour la réalisation de calculs 3D rapides. Il n'est pas prévu à ce stade d'utiliser la théorie de l'homogénéisation et de l'équivalence pour la modélisation neutronique. Par contre, un modèle thermohydraulique simplifié est préconisé pour cette première étape.

Le travail est donc structuré selon les actions ordonnées suivantes :

- Revue de la littérature et reprise des travaux existants.
- Étude des approximations de transport 3D par synthèse 2D/1D ou méthode dite de fusion.
- Implémentation du modèle thermo-hydraulique simplifié.
- Mise en place du transitoire.
- Validation des résultats avec les mesures expérimentales.
- Préparation du rapport final de stage.

Internship topic description

The release of thermal energy caused by nuclear reactions is mainly due to the migration process of neutrons in media containing fissile materials. As well known, the behavior of the target nuclei interacting with the neutrons changes with their temperature, and heat transfer must be taken into account to compute accurately the system response under a high neutron flux. In addition to local temperature, changes in nuclide concentrations may also occur, like in the case of a liquid or gaseous coolant. These physical phenomena evolve in time with very different scales, yielding a stiff problem to resolve numerically.

This internship concerns the implementation of a multiphysics coupling aimed to reproduce power transients due to the fast ejection of cruciform blades from the E-Core of the SPERT-III reactor. This reactor is a small facility operated in the 60s to study the safety of water reactors. Many experimental campaigns were performed and now we dispose of measurements to validate our simulations with. The power distribution will be computed by the solver TDT available in APOLLO3[®], which resolves the Boltzmann transport equation by the “method of long characteristics” (MOC). Approximations to determine 3D distributions by fast calculations will be considered too. Although homogenization and equivalence theory will not be used, a simplified thermo-hydraulic model will be accepted for these preliminary investigations.

Internship work plan:

- Literature review and retrieval of the existing work.
- Study of possible approximations for 3D transport, like 2D/1D synthesis of fusion techniques.
- Implementation of a simplified thermalhydraulic model.
- Setup of the transient case.
- Validation against measurements and analysis of results.
- Preparation of the final report.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Liangzhi Cao et Al. *Neutronics modeling of the SPERT III E-Core critical experiments with MPACT and KENO*. Annals of Nuclear Energy, 80:207–218, 2015.
- Dugone J. *SPERT III reactor facility: E-core revision*. Technical report, Phillips Petroleum Co., Idaho Falls, Idaho. Atomic Energy Div., 1965.
- Matthew Ellis et Al. *Preliminary coupling of the Monte Carlo Code OpenMC and the multiphysics object-oriented simulation environment for analyzing Doppler feedback in Monte Carlo simulations*. Nuclear Science and Engineering, 185(1):184–193, 2017.
- Olson AP. *Neutronics Calculations for SPERT-III, E-core*. Technical report, Argonne National Lab.(ANL), Argonne, IL (United States), 2013.
- Schneider Didier et Al. *APOLLO3: CEA/DEN deterministic multi-purpose code for reactor physics analysis*. In Proceedings of PHYSOR, 2016.
- Raymond et Al. *Validation of the US NRC coupled code system TRITON/TRACE/PARCS using the Special Power Excursion Reactor Test III*. Nuclear Technology, 183(3):504–514, 2013.
- Andrea Zoia and Emeric Brun. *Reactor physics analysis of the SPERT III E-core with Tripoli-4*. Annals of Nuclear Energy, 90:71–82, 2016.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année d'école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs nucléaires : neutronique, thermo-hydraulique.... Programmation (Python, Bash).

Master of Science 2nd year, Engineering school 3rd year, Fundamentals in thermal-hydraulics, reactor physics and analysis. Programming (Python, Bash).

Durée du stage / Internship duration

Mois/months: 6

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : TOMATIS
Prénom : Daniele
e-mail : daniele.tomatis@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 25 26
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : SANTANDREA
Prénom : Simone
e-mail : simone.santandrea@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 81 78
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° M2 – Laboratoire/Laboratory : LPEC

Titre du stage

CALCUL INNOVANT D'UN PETIT CŒUR À BAFFLE LOURD EN ÉVOLUTION AVEC LE CODE APOLLO3®

Internship title

INNOVATIVE CALCULATION OF A SMALL HEAVY BAFFLE CORE IN DEPLETION WITH APOLLO3®

Type de sujet / Topic type

Modélisation / Modeling

Contexte du stage

Le code APOLLO3® est le nouveau code de calcul neutronique déterministe et multi-filières développé par le CEA, en partenariat avec Framatome et EDF. Il permet, entre autres, le calcul de cœurs dans différentes conditions de fonctionnement afin d'estimer des grandeurs physiques d'intérêt (flux de neutrons, taux de fission, réactivité...) pour la conception ou l'exploitation de réacteurs nucléaires. Il résout pour cela l'équation exacte ou simplifiée du transport des neutrons. L'utilisation de schémas de calcul standards dits « industriels » avec ce code, utilisant une résolution d'une formulation simplifiée de l'équation du transport, permet l'obtention relativement peu coûteuse en ressources informatiques de ces grandeurs d'intérêt.

Ces schémas exigent cependant une validation, soit par des codes Monte-Carlo, soit par des schémas déterministes plus avancés. La validation par un code Monte-Carlo de référence comme TRIPOLI-4® serait idéale, mais se heurte à des temps de calculs élevés et à des limitations quand on s'intéresse à un cœur en évolution isotopique.

Ainsi, pour pouvoir valider des schémas simplifiés en évolution, le SERMA utilise un schéma déterministe avancé 2D se basant sur la *méthode des caractéristiques* (MOC) à 281 groupes d'énergie, avec le code APOLLO3®.

Internship context

APOLLO3® is the new multi-purpose deterministic neutronics code developed by the CEA, in partnership with Framatome and EDF. It enables, among other things, the computation of nuclear cores undergoing different operational conditions, in order to evaluate physical quantities of interest (neutron flux, fission rate, reactivity...) for the design or operation of nuclear reactors. In order to do that, it solves the exact or simplified neutron transport equation. The use of standard industrial schemes with this code, that solve a simplified formulation of the transport equation, enables the calculation of these quantities of interest with a relatively small computational cost.

However, these schemes require validation, either by Monte-Carlo codes, or by more advanced deterministic schemes. Validation by a reference Monte-Carlo code such as TRIPOLI-4® would be ideal, but is constrained by large computational times and limitations when validation of a depleting core is needed.

Thus, to validate simplified scheme in depletion, SERMA uses an advanced 2D deterministic scheme based on the *Method of Characteristics* on 281 energy groups, with the APOLLO3® code.

Description du sujet du stage

L'objectif du stage est l'amélioration d'un schéma déjà existant, appliqué à un cas de petit cœur à baffle lourd, représentatif d'un REP. Un travail de parallélisation d'une étape du calcul a déjà été effectué sur ce schéma, permettant de réduire les temps de calcul. Le travail du stagiaire sera ainsi de :

- Prendre en main le code APOLLO3® à travers le schéma.
- Optimiser le schéma de parallélisation existant.
- Ajouter la boucle en évolution dans le schéma pour calculer l'évolution isotopique du cœur.
- Valider ce schéma amélioré par des simulations TRIPOLI-4®.
- L'appliquer à un cœur commercial, de type REP1300.

Internship topic description

This internship aims at improving an already existing scheme, applied to a small heavy baffle core that is representative of a PWR. A work on parallelizing a step of the calculation has already been undertaken, reducing the computational time. Thus, the work of the intern will be to:

- Learn how to use APOLLO3® through this scheme.
- Optimize the parallelization scheme.
- Add the depletion loop to the scheme in order to compute the core under irradiation.
- Validate these improved scheme by TRIPOLI-4® simulation.
- Apply it to a commercial PWR.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Notions en physique des réacteurs nucléaires et connaissance du langage de programmation Python souhaitables. À travers ce stage, l'étudiant sera formé à la modélisation de systèmes nucléaires complexes, à l'utilisation de codes de neutronique avancés et au concept de parallélisme à mémoire distribuée.

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school – Notions of reactor physics and knowledge of the programming language Python are preferable. Within this internship, the student will be trained to complex nuclear system modeling, to the use of advanced neutronics codes and to the concept of distributed memory parallelism.

Durée du stage / Internship duration

5-6 mois / 5-6 months

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : GERARD CASTAING

Prénom : Nicolas

e-mail : nicolas.gerardcastaing@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 36 36

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° M3 – Laboratoire/Laboratory : CP2C

Titre du stage

CALCUL DE DÉPÔT D'ÉNERGIE DANS L'EAU PORALE DES CEMENTS

Internship title

CALCULATION OF ENERGY DEPOSITION IN THE POROUS WATER OF CEMENTS

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling

Contexte du stage

Les ciments s'obtiennent par hydratation de silicates. L'eau employée dans cette réaction est appelée "eau liée", car liée aux silicates pour former des composés hydratés. Lors du séchage, des pores contenant initialement de l'eau "libre", non liée aux silicates, apparaissent en quantité variable, et pourront être en partie remplis d'air si l'eau libre s'évapore. L'exposition d'un ciment à des particules gamma et bêta (et alpha) peut conduire à un phénomène de radiolyse de l'eau (rupture des liaisons entre H et O) produisant un dégagement de H₂. Pour étudier la radiolyse de l'eau dans le ciment on calcule des dépôts d'énergie dus aux particules gamma et bêta (et alpha) dans l'eau avec le code de transport de particules Monte Carlo TRIPOLI-4®.

Internship context

Cement pastes are prepared by hydrating silicates. The water involved in this chemical reaction is called "bound water" because it bounds to silicates to form hydrated compounds. The excess water, called "free" water (not bounded to silicates) forms pores in variate quantities. During the drying of the cement, the pores that were initially filled by "free" water can be partially or totally filled with air if "free" water is evaporated. The exposure of cement to gamma (or beta or alpha) particles can cause the phenomenon of water radiolysis. This phenomenon produces a release of hydrogen gas. Water radiolysis is studied by a computation of energy deposit due gamma and beta particles with the Monte Carlo particle transport code TRIPOLI-4®.

Description du sujet du stage

Le calcul des dépôts d'énergie dans l'eau du ciment, dus aux particules gamma et bêta (et alpha), est généralement réalisé avec des modèles qui homogénéisent le ciment et l'eau. Ces calculs sont faits sans prendre en compte l'emplacement des pores remplis d'eau libre dans le ciment. Il est intéressant d'étudier les effets de l'homogénéisation de la géométrie sur le calcul des dépôts d'énergie, par rapport à un calcul plus détaillé qui prendrait en compte l'hétérogénéité de la géométrie des pores d'eau dans le ciment (*géométrie stochastique*). La comparaison des dépôts à ceux obtenus avec l'ancienne méthode permettra de valider les calculs, ou de suggérer des pistes d'amélioration.

Internship topic description

To study water radiolysis in cement we calculate energy depositions due to particles, currently by using models that homogenise cement and water together. These calculations are carried out without taking into account the position of the pores filled with "free" water in the cement. It is interesting to study the effects of the homogeneization of the geometry on the calculation of energy depositions and compare it to a more detailed calculation that takes into account the shape and the position of the pores (*stochastic geometry*). The energy depositions calculated with this new method will be compared to those obtained by the current method.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- E. Brun, F. Damian, C.M. Diop, E. Dumonteil, F.X. Hugot, C. Jouanne, Y.K. Lee, F. Malvagi, A. Mazzolo, O. Petit, J.C. Trama, T. Visonneau, A. Zoia, *Tripoli-4[®], CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code*, *Annals of Nuclear Energy* **82**, 151-160 (2015).
- Larmier, C. (2018). *Stochastic particle transport in disordered media: beyond the Boltzmann equation* (Doctoral dissertation).
- Rotureau, P. (2004). *Etude de la radiolyse de l'eau en milieu poreux* (Doctoral dissertation, Evry-Val d'Essonne).

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur.

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : BONIN

Prénom : Alice

e-mail : alice.bonin@cea.fr

Téléphone : 0169086879

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/CP2C

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° M4 – Laboratoire/Laboratory : LPEC

Titre du stage

MISE EN PLACE D'UN SCHÉMA DE CALCUL DE RÉACTEURS AU GRAPHITE

Internship title

Type de sujet/ Topic type

- Modélisation
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul

Contexte du stage

En physique des réacteurs et au CEA, les calculs en irradiation des assemblages combustibles sont réalisés avec le code de transport déterministe APOLLO2. Cette étape de calcul dite « à l'échelle du réseau » permet de déterminer les caractéristiques neutroniques en irradiation, à l'échelle de l'assemblage, propres à chaque type de réacteur (un réacteur étant constitué d'un modérateur, d'un caloporteur et d'un combustible dans une configuration géométrique donnée). A l'issue de cette première étape, les résultats de ces calculs (composition du combustible et sections efficaces macroscopiques pendant l'irradiation) sont utilisés pour des calculs à l'échelle 3D du cœur : calculs déterministes pour simuler l'évolution du réacteur dans le temps, ou calculs Monte-Carlo pour connaître finement les flux de neutrons dans le cœur et au-delà. Les grandeurs d'intérêt sont l'évolution de la composition du combustible, la répartition spatiale du flux neutronique, et l'atténuation du flux hors cœur.

Internship context

Description du sujet du stage

L'objectif du stage proposé sera d'établir les modélisations dans le code de transport APOLLO2 pour un ensemble de cellules / assemblages représentatifs d'un réacteur UNGG, puis d'utiliser les grandeurs de sortie pour réaliser un calcul cœur 3D (modélisant le réacteur en entier) et ainsi obtenir les grandeurs d'intérêt citées auparavant. Enfin, étant donné les différents niveaux de simplification introduits dans ces calculs déterministes, une étape de validation est nécessaire : elle utilisera le code de référence TRIPOLI-4®, développé au CEA.

Internship topic description

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année d'école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique

Localisation du stage / Internship location**Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay**

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : CHEVALLIER

Prénom : Florent

e-mail : Florent.Chevallier@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 13 69

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Titre du stage

ÉTUDES DE CONCEPTION D'UN RÉACTEUR À SELS FONDUS

Internship title

DESIGN STUDIES OF MOLTEN SALT REACTORS

Type de sujet/ Topic type

- Modélisation
- Études

Contexte du stage

Le CEA développe des outils couplés neutronique-thermohydraulique aptes à étudier les *réacteurs nucléaires à sels fondus* (MSR, *Molten salt reactors*). Le SERMA du CEA/Saclay et le SPRC du CEA/Cadarache proposent d'étudier une ou plusieurs esquisses de réacteurs à sels fondus.

Internship context

The CEA is developing neutron-thermohydraulic coupled tools capable of studying *molten salt nuclear reactors* (MSR). The SERMA of CEA / Saclay and the SPRC of CEA / Cadarache propose to study one or more designs of molten salt reactors.

Description du sujet du stage

Les grandes lignes de travail et les objectifs dégagés sont :

1. Étudier la thématique et le contexte des MSR pour en saisir les principes, les grandeurs clés et dégager les points importants. Deux ou trois types de réacteurs (taille, puissance, principe, etc.) seront décidés pour mener les études de conception ;
2. Créer des modélisations neutroniques sur des géométries (d'abord simples) afin de mener des études avec le code déterministe (APOLLO3®) et faire des comparaisons avec le code Monte-Carlo (TRIPOLI-4®) ; puis, créer des géométries plus détaillées pour les études de conception ;
3. Créer des modélisations correspondantes dans le code de thermohydraulique TRIOCFD afin de mener les études thermohydrauliques (principalement au DM2S) ;
4. Faire fonctionner le couplage entre APOLLO3® et TRIOCFD ;
5. Mener des études de scénarios de déploiement de MSR (principalement au SPRC) ;
6. Étendre les géométries pour construire des cas plus réalistes en fonction de ce qui aura été réalisé avant, notamment pour aller vers des géométries évoluant en fonction du temps,

Le stage comportera une phase de bibliographie et une phase rédactionnelle d'un rapport.

Internship topic description

The main lines of work and the objectives are:

1. Study the theme and context of the MSR to understand the principles, the key variables and identify the important points. Two or three types of reactors (size, power, principle, etc.) will be decided to carry out design studies ;
2. Create neutron modelizations on geometries (first simple) to carry out studies with the deterministic code (APOLLO3®)

- and make comparisons with the Monte-Carlo code (TRIPOLI-4®); then create more detailed geometries for design studies ;
3. Create corresponding modelizations in the thermohydraulic code TRIOCFD in order to carry out thermohydraulic studies (mainly in the DM2S) ;
 4. Operate the coupling between APOLLO3® and TRIOCFD ;
 5. Conduct MSR deployment scenario studies (mainly at the SPRC) ;
 6. Extend the geometries to build more realistic cases according to what has been done before, especially to go towards geometries evolving as a function of time ;

The internships will include a bibliography phase and an editorial phase of a report.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Éventuellement / Eventually

Profil des stagiaires / Applicants profile

Préférentiellement, le sujet s'adresse parallèlement à deux étudiant.e.s un.e étudiant.e au DM2S, CEA/Saclay, et un.e étudiant.e au DER/SPRC CEA/Cadarache.

Les étudiant.e.s se « spécialiseront » sur un des aspects dans une démarche collaborative.

Le sujet global comportera une grande part d'initiative personnelle. Elle permet aux étudiants de s'impliquer et de construire une partie de leur travail en proposant des trajectoires optionnelles (en discussion avec les encadrants) en fonction de l'avancement des travaux.

Compétences requises : neutronique, thermohydraulique, physique des réacteurs nucléaires, programmation (C++, python, librairies dynamiques, etc.).

Preferably, the subject is addressed in parallel with two students: one student at DM2S, CEA/Saclay, and one student at DER/SPRC CEA/Cadarache.

The students will "specialize" in one of the aspects, in frame of cooperation approach.

The overall subject will involve a great deal of personal initiative. It allows students to get involved and build part of their work by proposing optional trajectories (in discussion with the supervisors) according to the progress of the work.

Required skills: neutronics, thermohydraulics, physic of nuclear reactor physics, computer science/programming (C++, python).

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA - DEN/DANS/DM2S/STMF
91191 GIF-SUR-YVETTE Cedex

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Cadarache
DEN/DER/SPRC (Service de Physique des Réacteurs et du Cycle)
13108 St Paul lez Durance Cedex

Personnes contacts / Contact persons

Nom : CAMPIONI
Prénom : Guillaume
e-mail : guillaume.campioni@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 31 86
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : KOOYMAN
Prénom : Timothée
e-mail : timothee.kooyman@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 31 86
Affiliation : DEN/CAD/DER/SPRC/LE2C

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° M6 – Laboratoire/Laboratory : LPEC

Titre du stage

UTILISATION DES DERNIÈRES FONCTIONNALITÉS DU CODE APOLLO3® POUR LE CALCUL DE RÉACTEURS À EAU SOUS PRESSION

Internship title

Type de sujet/ Topic type

- Modélisation
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul

Contexte du stage

Dans un cœur de réacteur, on souhaite connaître à tout instant la densité de neutrons. Jusqu'à présent, des modèles en diffusion ou transport simplifié ont été employés pour obtenir cette distribution spatiale. Dernièrement, des modèles plus avancés, fondés sur la résolution de l'équation de transport des neutrons, ont été implémentés au sein du code déterministe APOLLO3®.

Dans le cadre de ce stage, on s'intéressera particulièrement aux dernière fonctionnalités développées dans le code APOLLO3® pour simuler finement le transport des neutrons dans un réacteur à eau sous pression. En effet, afin d'obtenir une méthode de calcul robuste, il est important de bien connaître les options de modélisation et leur impact sur les grandeurs recherchées, ainsi que les effets du solveur de l'équation de Boltzmann.

Internship context

Description du sujet du stage

Le but de ce stage, orienté modélisation, est de mettre en place un modèle de cœur de REP et de déterminer des options de calcul et du solveur permettant un calcul de flux convergé. Pour ces études, on se basera sur des simulations de référence utilisant des données d'entrée (géométrie, composition, données nucléaires, ...) identiques. Les grandeurs d'intérêt seront la distribution spatiale du flux en cœur et également dans le réflecteur.

Le travail du stagiaire consistera ainsi à :

- Prendre en main le code APOLLO3® pour des calculs de cœurs ;
- Prendre en main l'outil ALAMOS pour l'élaboration d'un modèle géométrique détaillé du cœur de REP ;
- Construire, avec TRIPOLI-4®, la modélisation de référence du cœur étudié ;
- Tester les principales options de calcul (maillage spatial, polynômes de reconstruction du flux, anisotropie, options de convergence du solveur, etc) et quantifier leurs effets ;

Vérifier la robustesse des options de calcul ainsi déterminées sur d'autres cœurs de réacteurs.

Internship topic description

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année d'école d'ingénieur – Compétences en mathématiques, informatique scientifique (C++ et Python, pour la phase de modélisation), connaissances en neutronique.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : MAO

Prénom : Hélène

e-mail : helene.mao@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 59 88

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Études, benchmarking

Studies, benchmarking

Sujets N° : E1 à E7
Topics N° : E1 to E7

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° E1 – Laboratoire/Laboratory : LTSD

Titre du stage

ÉVALUATION DES CAPACITÉS DES MÉTHODES D'AUTOPROTECTION DU CODE APOLLO3® DANS LE TRAITEMENT DU PROFIL DE TEMPÉRATURE AU SEIN D'UN CRAYON COMBUSTIBLE

Internship title

ASSESSMENT OF THE CAPABILITY OF THE SELF-SHIELDING METHODS OF APOLLO3® CODE IN THE TREATMENT OF THE NON-UNIFORM TEMPERATURE PROFILE WITHIN A FUEL ROD

Type de sujet / Topic type

- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Ce sujet de stage se situe dans le cadre de la simulation de la physique des réacteurs. La physique des réacteurs étudie les interactions entre les neutrons et la matière dans un réacteur nucléaire. Cette interaction se produit lorsqu'un neutron entre en collision avec un noyau. En général, le réacteur nucléaire est un équipement complexe composé de différents éléments géométriques faits de divers matériaux. La distribution des neutrons dans un réacteur nucléaire est prédite par la résolution de l'équation de transport en trois étapes : d'abord la préparation des sections efficaces, suivie par le calcul du flux dans le réseau des crayons combustibles afin de produire les sections efficaces effectives homogénéisées par cellule ou par assemblage, et à la fin un calcul de cœur avec les sections efficaces homogénéisées.

Dans les réacteurs à neutrons rapides ou thermiques, les neutrons produits par fission à haute énergie (autour de 2 MeV) sont ralentis à une énergie plus basse par des réactions nucléaires de diffusion. Aux énergies situées entre 100 keV et 1 eV, à cause des résonances des noyaux lourds et intermédiaires, l'absorption résonnante devient prédominante. Ces absorptions entraînent des dépressions locales du flux des neutrons en espace et en énergie, en particulier dans un réacteur thermique. À ce jour, l'utilisation de l'approximation multigroupe en énergie reste nécessaire dans la résolution numérique de l'équation de transport, en raison de la limitation en mémoire et en temps de calcul des ordinateurs actuels. Il est essentiel de calculer des sections efficaces moyennes, aussi appelées les sections efficaces auto-protégées, sur les domaines d'énergie contenant des résonances. Ces calculs, connus sous le nom de *calculs d'autoprotection*, ont un impact direct sur la précision de la simulation et par conséquent sur les taux de réactions et les concentrations isotopiques.

Pour le calcul de réseaux des réacteurs à eau légère (REL), APOLLO3® est équipé de deux techniques d'autoprotection : la méthode du flux de structure fine traditionnelle et la nouvelle méthode des sous-groupes avec SPH (super-homogénéisation) basée sur la technique de cellules équivalentes en facteur de Dancoff. Pour calculer un réacteur avec les contre-réactions thermiques et avec l'évolution du combustible au sein d'un crayon, ces méthodes adoptent actuellement une méthode approximative relative aux profils de température et de composition isotopique, qui pourrait introduire des erreurs importantes. De nouvelles méthodes sont en cours de développement dans le code APOLLO3® afin d'en améliorer le traitement.

Internship context

The topic of this internship is in the framework of reactor physics simulation. Reactor physics studies the interactions between neutron and material in a nuclear reactor. Such an interaction is produced when a neutron collides with the nucleus of a specific nuclide. A nuclear reactor is generally a complex three-dimensional device including different

geometrical parts made of various materials. The neutron distribution in a nuclear reactor is predicted by the solution of the transport equation, which consists of three major steps: first the preparation of detailed neutron cross sections, followed by a lattice calculation for producing pin-wise or assembly-wise homogenized cross sections, and ended by a reactor calculation employing the homogenized cross sections.

In fast or thermal reactors, neutrons produced by fission at high energy (around 2 MeV) are slowed down by collisions to lower energy. At energy between 100 keV to 1 eV, due to heavy and intermediate nuclide resonances, resonance absorption becomes predominant importance. These absorptions result in local depressions of the neutron flux in space and in energy, particularly in a thermal reactor. Today the use of multigroup approximation in energy is essential in numerical solution of the transport equation, due to limitation in memory and in running time of current computer technology. It is crucial to compute averaged cross-section values, also called self-shielded cross sections, over energy domains that contain resonances. These calculations, known as self-shielding calculations, have a direct impact on the reaction rates and the isotopic buildup.

In the lattice calculation of a light water reactor (LWR), APOLLO3[®] has two self-shielding methods: the legacy Fine-Structure Method and the newly-developed subgroup method with SPH (super-homogénéisation) based on the equivalent Dancoff-factor cell technique. To deal with thermal feedback and fuel depletion, these methods adopt currently an approximate method in treating the non-uniform profiles of temperature and nuclide distribution within a pellet, which could introduce important errors. New methods are under development in order to improve their treatment.

Description du sujet du stage

L'objectif principal du stage est d'évaluer les capacités des méthodes d'autoprotection d'APOLLO3[®] existantes et nouvelles dans le traitement du profil de température et du profil de concentrations des isotopes au sein d'un crayon combustible. Les résultats numériques seront comparés aux calculs de référence réalisés avec le code de transport Monte Carlo à énergie continue TRIPOLI-4[®].

À l'issue du stage, l'étudiant acquerra les bases théoriques et pratiques du calcul d'autoprotection, qui peut impacter directement la précision finale du calcul de cœur. L'étudiant se familiarisera avec les fonctionnalités principales d'APOLLO3[®] et de TRIPOLI-4[®] et gagnera en expérience dans le domaine du calcul des réacteurs nucléaires.

Internship topic description

The main objective of this internship is to assess the capability of the self-shielding methods, old and new, in treating the non-uniform temperature profile and the non-uniform nuclide distribution within a pellet. The numerical results will be compared to those of the continuous-energy Monte Carlo transport code TRIPOLI-4[®].

As the result of this internship the candidate will acquire theoretical and practical basics of the self-shielding calculation, which has a predominant impact on the final precision of reactor calculations. The candidate will also become familiar with the main features of the APOLLO3[®] and TRIPOLI-4[®] codes and will obtain work experience with nuclear reactor calculations.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- D. Schneider et al., "APOLLO3[®]: CEA/DEN Deterministic Multi-purpose Code for Reactor Physics Analysis," in "Proc. PHYSOR 2016," Sun Valley, ID, May 1-5, (2016).
- M. Coste-Delclaux, "Modélisation du phénomène d'autoprotection dans le code de transport multigroupe APOLLO2," CEA-R-6114, CEA (2006).
- L. Mao, I. Zmijarevic, K. Routsonis, "Application of the SPH method to account for the angular dependence of multigroup resonant cross sections in thermal reactor calculations," Annals of Nuclear Energy 124 (2019) 98-118.
- L. Mao, I. Zmijarevic, R. Sanchez, "A subgroup method based on the equivalent Dancoff-factor cell technique in APOLLO3[®] for thermal reactor calculations," submitted to Annals of Nuclear Energy.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur. Connaissance de la physique des réacteurs et base acquise de la méthodologie du calcul des réacteurs. Expérience en programmation en C++/Fortran/Python souhaitables.

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school. To be familiar with the reactor physics and with the basics of reactor calculation methodology. Coding experience in C++/Fortran/Python recommended.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : LEI-MAO
Prénom : Li
e-mail : li.leimao@cea.fr
Téléphone : +33 (0)1 69 08 70 51
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Titre du stage

CONTRIBUTION À LA VALIDATION DES SCHÉMAS DE CALCUL COUPLÉS NEUTRONIQUE-THERMOHYDRAULIQUE

Internship title

CONTRIBUTION TO NEUTRONIC-THERMALHYDRAULICS COUPLING VALIDATION

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling
- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

La modélisation en physique des réacteurs s'appuie sur des codes développés dans chacune des grandes disciplines en jeu dans le fonctionnement normal ou accidentel des réacteurs (neutronique, thermo-hydraulique, thermo-mécanique du combustible...). Ces codes sont validés grâce à des expériences dédiées.

Pour certaines situations, il devient nécessaire de coupler plusieurs disciplines entre elles, chaque code « métier » est alors utilisé dans son domaine de validité et fournit des informations aux codes des autres disciplines. L'ensemble des échanges étant piloté par un superviseur.

La validation de ces calculs couplés peut se faire par comparaison à des résultats expérimentaux intégraux mettant en jeu les différentes physiques et leurs contre-réactions.

Internship context

Modelization in reactor physics is based on codes dedicated to each of the main physics at stake for normal and incidental operation of nuclear reactors (neutronics, thermal hydraulics, fuel thermics...). Those codes are validated on dedicated experiences.

For some situations (mainly transients), it becomes necessary to couple the different physics together. Each code is then used inside its domain of validity and gives relevant physical quantities to the codes of other disciplines. Exchanges between the codes and running of the simulation is managed by a standardized supervisor script.

Validation of coupled calculations can be done by comparison to experimental results from integral experiences involving the different physics and their counter-reactions.

Description du sujet du stage

L'objectif de ce stage est de contribuer à la validation des calculs couplés en réalisant la modélisation d'un cœur de réacteur nucléaire de puissance (type REP). Cet exercice s'inscrit dans le cadre d'un benchmark international, les résultats produits pendant le stage viendront alimenter la contribution du CEA à ce benchmark.

Dans un premier temps, le stagiaire devra mettre en place la modélisation neutronique du cœur afin de calculer les grandeurs d'intérêt (distribution de puissance, effets en réactivité...). Le stage se concentrera ensuite sur la mise en place d'un couplage avec la thermohydraulique cœur.

Internship topic description

The purpose of this internship is to contribute to coupled calculation validation. The exercise will be based on a standard PWR design under operating conditions. The case treated is part of an international benchmark and thus, results obtained during the internship will be a part of CEA's contribution to the benchmark.

During the internship, the candidate will have to perform the full core modelization with neutronics tools developed at SERMA in order to get the different values of interest (power distribution, reactivity effects etc.). In a second part of the internship, coupling with thermal hydraulics will be started.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique. Ce stage permettra au candidat d'utiliser et de se familiariser avec divers codes de neutronique (APOLLO2, CRONOS2, APOLLO3[®]) et d'appréhender la modélisation complexe d'un cœur en neutronique.

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school. Knowledge of reactor physics and scientific computing. This internship will allow the candidate to use and become familiar with various neutronics codes (APOLLO2, CRONOS2, APOLLO3[®]) and to understand the complex modeling of a neutron core.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : FARDA

Prénom : Anthime

e-mail : anthime.farda@cea.fr

Téléphone : 01.69.08.35.37

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : PONTIER

Prénom : Jean-Baptiste

e-mail : jean-baptiste.pontier@cea.fr

Téléphone : 01.69.08.04.83

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° E3 – Laboratoire/Laboratory : IRSN/SNC/LN - LTSD

Titre du stage

COMPARAISON DES MÉTHODES DE RÉDUCTION DE VARIANCE POUR LA SIMULATION D'UN RÉACTEUR NUCLÉAIRE (stage co-encadré par l'IRSN et le CEA, essentiellement basé à l'IRSN)

Internship title

COMPARISON OF VARIANCE REDUCTION METHODS FOR THE SIMULATION OF A NUCLEAR REACTOR (IRSN/CEA internship, essentially based at IRSN)

Type de sujet / Topic type

- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Dans un contexte d'étude du vieillissement du parc des réacteurs à eau sous pression français, il est important de disposer d'outils de calcul à même d'estimer et de caractériser l'effet de l'irradiation neutronique et photonique sur les différentes structures des réacteurs. Par exemple, les contraintes imposées par le démantèlement des réacteurs nucléaires imposent de pouvoir apprécier au mieux l'activation des différents composants du réacteur causée par l'irradiation incidente. De même, l'extension de la durée d'exploitation des REP au-delà des 40 années prévues à la conception nécessite de calculer au mieux la fluence neutronique sur la cuve, car l'irradiation occasionne des dommages dans les structures des matériaux conduisant à une éventuelle détérioration des propriétés mécaniques de la cuve.

Dans l'objectif de disposer des outils pouvant caractériser le rayonnement gamma et le flux neutronique dans une géométrie complexe, des simulations Monte-Carlo peuvent être réalisées (codes MCNP6, TRIPOLI-4). Pour des composants se trouvant à distance de la source d'irradiation (le cœur du réacteur), ce type de simulation nécessite la mise en œuvre de méthodes de réduction de variance, dont l'étude fait l'objet de ce stage.

Internship context

In the context of aging of the french PWR nuclear power plants, it is important to be able to rely on calculation tools estimating and characterizing the effect of neutron and photon irradiation on various reactor structures. For instance, dismantling constraints request the best possible knowledge of the different reactor components activation due to the incident irradiation. Life extension of PWR operating, beyond the 40 years initially planned, also requires reliable calculations of neutron fluence on the pressure vessel. Irradiation actually causes damages in the material structures, possibly leading to the deterioration of mechanical properties of the pressure vessel.

Monte Carlo simulations can thus be performed (MCNP6, TRIPOLI-4 codes), with the aim of having tools able to characterize gamma activation and neutron flux in a complex geometry. For components distant to the irradiation source (reactor core), this kind of simulation requires to make use of variance reduction techniques, which will be studied in the frame of this internship.

Description du sujet du stage

Le travail durant le stage portera sur l'évaluation de grandeurs d'intérêt (flux neutrons et gamma) à différentes positions en aval de l'enceinte de confinement en béton, à distance du cœur du réacteur. L'objectif principal sera d'évaluer les performances des différentes méthodes de réduction de variance qui seront testées lors de ce stage, ainsi que de comparer

ces méthodes entre elles, en se basant sur la mesure de l'écart-type et du temps de calcul associée aux grandeurs. Des jeux de données MCNP6 et TRIPOLI-4 seront fournis à l'étudiant(e) dès son arrivée. Afin de prendre en main les codes et les modélisations, l'étudiant(e) devra vérifier que les deux modélisations sont équivalentes. Puis, il/elle devra notamment utiliser la méthode INIPOND implémentée dans le code TRIPOLI-4 pour ajuster les paramètres de réduction de variance pour l'estimation d'une grandeur donnée. Le même travail sera réalisé avec la méthode AMS (Adaptative Multi-level Splitting) implémentée récemment dans TRIPOLI-4. Ces étapes se feront en étroite collaboration avec l'équipe de développement de TRIPOLI-4 au CEA.

Finalement, les résultats obtenus avec ces deux méthodes seront comparés aux résultats déjà disponibles, réalisés avec le code MCNP6 et les différentes méthodes testées avec ce code. Lors de l'analyse des résultats, les cartes de paramètres de réduction de variance entre les différents codes et méthodes pourront être échangées.

Internship topic description

The internship work will focus on the estimation of physical quantities of interest (neutron and gamma fluxes) at various locations down the concrete containment, away from the core. The main objective will be to evaluate the efficiency of the different variance reduction methods tested during the internship and to compare these methods, based on standard deviation of these quantities and calculation time.

The student will be provided with MCNP6 and TRIPOLI-4 input data files at the beginning of the internship. He/she will first check that both models are equivalent, so as to familiarize himself/herself with the codes and models. Then, he will utilize the INIPOND method developed in TRIPOLI-4 code, so as to adjust the variance reduction parameters for the estimation of a given quantity. Same work will be carried on with the AMS (Adaptive Multi-level Splitting) method, which has been recently implemented in TRIPOLI-4. This steps will be undertaken in close collaboration with the CEA development team of TRIPOLI-4.

Last, the results obtained with these two methods will be compared to different MCNP results already available for different methods. The parameters maps for variance reduction could be exchanged between both codes for analyze purpose.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs (neutronique) et en informatique scientifique (simulation Monte-Carlo, Linux).

Ce stage permettra à l'étudiant(e) d'acquérir des compétences en physique des réacteurs et de se familiariser avec les codes de simulation de neutronique, notamment Monte-Carlo, et d'acquérir des bases solides sur les méthodes de réduction de variance. L'étudiant(e) pourra acquérir de l'expérience, d'une part, au sein du laboratoire de neutronique de l'IRSN, et d'autre part, auprès des experts de développement de code Monte-Carlo du CEA.

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school – Knowledge of reactor physics (neutronics) and computer science (Monte Carlo simulation, Linux).

This internship will enable the student to acquire reactor physics skills and to familiarize himself/herself with neutronics simulation codes, especially Monte Carlo codes, and acquire strong foundations for variance reduction techniques. This experience will be gained within the neutronics laboratory of IRSN on the one hand, and close to the CEA experts in Monte Carlo code development on the other hand.

Durée du stage / Internship duration

Environ 5 mois à partir de février-mars 2020 / Around 5 months starting from February-March 2020.

Localisation du stage / Internship location

Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN)

Laboratoire de Neutronique (LN) du Service de Neutronique et des risques de Criticité (SNC)

92262 Fontenay-aux-Roses Cedex

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Paris-Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : BROVCHENKO

Prénom : Mariya

e-mail : mariya.brovchenko@irsn.fr

Téléphone : 01.58.35.98.06

Affiliation : PSN-EXP/SNC /LN

Nom : PETIT

Prénom : Odile

e-mail : odile.petit@cea.fr

Téléphone : 01.69.08.59.43

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Titre du stage

IMPACT DE SCÉNARIOS INNOVANTS DE SUIVI DE CHARGE SUR LA CONDUITE D'UN RÉACTEUR À EAU PRESSURISÉE (REP) DANS LE CONTEXTE DE LA TRANSITION ÉNERGÉTIQUE

Internship title

Type de sujet / Topic type

- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,

Contexte du stage

L'évolution du mix de production électrique français dans les années à venir devrait considérablement modifier les dynamiques d'équilibre de réseau. La part croissante des énergies renouvelables intermittentes (solaire, éolien) et la disparition programmée des énergies fossiles reportent grandement la pression de l'équilibre du réseau sur le parc nucléaire. Ainsi, le parc nucléaire va être amené à devoir effectuer un suivi de charge de plus en plus sollicitant, posant la question de la capacité du parc existant à être suffisamment manœuvrable.

Dans ce contexte, deux thèses (M. Muniglia et V. Drouet) ont été menées au CEA depuis 2014 pour optimiser la capacité d'une centrale type du parc nucléaire français à effectuer des transitoires de suivi de charge. Un modèle simplifié de réacteur couplant la neutronique et la thermohydraulique des circuits primaire et secondaire a été développé ainsi qu'une stratégie de pilotage de réacteur. Certains paramètres de gestion de la centrale ont été optimisés afin de réduire le volume d'effluents générés par la centrale et l'instabilité axiale générée par le transitoire, tout en respectant certains critères de sûreté.

Toutes les analyses réalisées jusqu'à présent ont été conduites sur un transitoire de 24h typique d'une intermittence de demande jour/nuit. Ce scénario bien que très sollicitant, n'est pas représentatif de la diversité des situations que pourrait avoir à gérer un REP dans le futur. Par ailleurs, l'échelle de 24 heures n'est pas suffisante pour voir des effets d'historique, notamment l'impact sur la stabilité du cœur d'un deuxième suivi de charge très rapproché du premier.

Internship context

Description du sujet du stage

L'objectif de ce stage est d'appliquer sur un REP des transitoires très sollicitants et plus longs, afin d'évaluer l'impact sur les différentes observables du réacteur (volume d'effluents, stabilité, sûreté...). Le stage peut-être décomposé en plusieurs étapes :

- Prise en main du simulateur et des différentes stratégies de pilotage disponibles ;
- Identification de transitoires d'intermittence conformes aux scénarios de de transition énergétique ;
- Etude du comportement du réacteur pour ces transitoires en fonction de la stratégie de pilotage ;
- Identification des difficultés de pilotage et propositions de modifications de la conduite pour mitiger ces difficultés.

Une étude d'optimisation des moyens de pilotage pourra être menée avec le simulateur sur un des scénarios identifiés suivant l'avancement du stage.

Références :

- Valentin Drouet, Jean-Michel Do et Sébastien Verel, "Design of a simulator oriented PWR model and optimization of load-follow Operations", ICAPP 2019, Juan les Pins.
- Mathieu Muniglia. *Optimisation du pilotage d'un Réacteur à Eau Pressurisée dans le cadre de la transition énergétique à l'aide d'algorithmes évolutionnaires*. Université Paris-Saclay, 2017.

Internship topic description

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en génie nucléaire/physique des réacteurs et en informatique scientifique (simulation Monte-Carlo, Linux).

Stagiaire de fin d'études de Master / Ecole d'ingénieur, avec des connaissances en génie nucléaire. Des connaissances en gestion de réseaux électriques sont un plus. Le sujet de stage est conçu comme une étude préparatoire à un sujet de thèse consistant à construire un modèle de réseau simplifié afin d'optimiser le comportement de la centrale au sein de ce réseau.

Durée du stage / Internship duration

5-6 mois

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Paris-Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : DO

Prénom : Jean-Michel

e-mail : jean-michel.do@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 27 44

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : DROUET

Prénom : Valentin

e-mail : Valentin.DROUET@cea.fr

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° E5 – Laboratoire/Laboratory : LLPR

Titre du stage

ÉTUDES D'UNE BIBLIOTHÈQUE D'ALBEDOS DOUBLEMENT DIFFÉRENTIELS EN ANGLE ET EN ÉNERGIE POUR LES CALCULS DE DÉBIT D'ÉQUIVALENT DE DOSE PHOTONS GAMMA

Internship title

STUDY OF A DOUBLE ANGULAR AND ENERGY DIFFERENTIAL GAMMA-RAY ALBEDO LIBRARY FOR GAMMA DOSE RATE CALCULATION

Type de sujet / Topic type

- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Les études de radioprotection font appel à différents codes de calculs qui sont notamment répartis selon les hypothèses qu'ils utilisent, la fidélité de leurs résultats par rapport à la réalité, leur domaine d'application, et les temps de calculs qu'ils engendrent. Si d'un côté, des calculs de référence doivent être conduits notamment avec la méthode Monte Carlo, précise mais coûteuse, les contraintes de temps et la systématisme de certaines études réclament le développement et l'usage de méthodes simplifiées et/ou optimisées, qui moyennant certaines hypothèses, parviennent à fournir un résultat rapide mais dont il convient de maîtriser le mieux possible les biais.

Le SERMA développe des outils de calculs pour la radioprotection, notamment le code de référence Monte Carlo TRIPOLI-4[®] et le code simplifié NARMER-1. Ce dernier, successeur du code MERCURE-6, permet un calcul de l'atténuation des photons gamma en ligne droite dans des géométries à trois dimensions pour notamment calculer des débits d'équivalent de dose, en tenant compte du flux provenant de la diffusion par l'intermédiaire de facteurs d'accumulation, appelés *buildup* en anglais. Un second mode de mise en œuvre du code propose d'évaluer la contribution du courant réfléchi des photons par une paroi, en exploitant une bibliothèque pré-calculée d'albédos doublement différentiels en angle et en énergie.

Internship context

Description du sujet du stage

L'objectif du stage est d'étudier une bibliothèque d'albédos doublement différentiels en angle et en énergie pour le calcul du débit d'équivalent de dose photons gamma avec le code NARMER-1. Il s'agira de prendre en main, et d'étudier la bibliothèque existante, ses caractéristiques dans le contexte du transport des photons gamma, de conduire une étude de sa validation vis-à-vis des usages envisagés. Des propositions d'améliorations pourront être formulées et mises en œuvre. Des recommandations de son utilisation pourront être explicitées.

Le stage permettra de mettre en œuvre les connaissances du transport de photons gamma dans la matière. Il sera l'occasion de prendre en main et d'exploiter les codes TRIPOLI-4[®] et NARMER-1 utilisés dans l'industrie. Le stage permettra également de mobiliser des compétences d'analyse et de méthodologie dans la conduite d'une étude qui reposera sur un socle scientifique parfaitement maîtrisé et qui ciblera un fort besoin industriel.

Internship topic description

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur :

- très bonne connaissance de l'interaction rayonnement – matière et du transport des photons en particulier,
- capacité à maîtriser rapidement de nouveaux outils de calculs en leurs caractéristiques,
- capacité à mettre en place une méthodologie et à la conduire,
- capacité rédactionnelle.

Durée du stage / Internship duration

5/6 mois, 5/6 months

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : VISONNEAU

Prénom : Thierry

e-mail : thierry.visonneau@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 45 05

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° E6 – Laboratoire/Laboratory : CP2C

Titre du stage

SÛRETÉ-CRITICITÉ : RÉALISATION DU POINT SANS INCERTITUDES POUR LE BENCHMARK INTERNATIONAL DU WPNCs SUR L'ANALYSE DES SENSIBILITÉS ET INCERTITUDES DE L'INVENTAIRE DU COMBUSTIBLE USÉ

Internship title

CRITICALITY SAFETY: WITHOUT UNCERTAINTY POINT MAKING FOR THE WPNCs INTERNATIONAL BENCHMARK ON THE ANALYSIS OF THE SENSITIVITIES AND UNCERTAINTIES OF THE SPENT FUEL INVENTORY

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling
- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,

Contexte du stage

Le WPNCs (*Working Party on Nuclear Criticality Safety*) est un groupe de travail de l'AEN (Agence pour l'Énergie Nucléaire de l'OCDE) qui traite des questions techniques et scientifiques relatives à la sûreté en matière de criticité. Les domaines d'intérêt spécifiques incluent (sans s'y limiter) les enquêtes sur les configurations statiques et transitoires rencontrées dans le cycle du combustible nucléaire. Celles-ci incluent la fabrication, le transport et le stockage du combustible. Les objectifs du WPNCs sont les suivants :

- échanger des informations sur les programmes nationaux dans le domaine de la sûreté en matière de criticité ;
- orienter, promouvoir et coordonner les activités hautement prioritaires d'intérêt commun pour la communauté internationale de la sûreté en matière de criticité et établir une coopération ;
- suivre les progrès de toutes les activités et faire rapport au Comité des sciences nucléaires (NSC) ;
- publier des bases de données, des manuels et des rapports ;
- faciliter les communications au sein de la communauté internationale de la sécurité en matière de criticité par le biais de sites Web pertinents ;
- coordonner les activités du WPNCs avec d'autres groupes de travail au sein de l'AEN et dans d'autres organisations internationales afin d'éviter la duplication d'activités ;
- fournir une base technique pour les activités d'autres organisations internationales (par exemple, les organisations internationales de normalisation (ISO), l'Agence internationale de l'énergie atomique (AIEA)).

Actuellement, le WPNCs coordonne 7 groupes d'experts et le projet ICSBEP.

Parmi ces groupes, le sous-groupe SG-7 est en charge d'étudier les sensibilités et incertitudes des données nucléaires sur l'inventaire isotopique du combustible irradié. Pour ce faire, le SG-7 a défini un benchmark basé sur les données d'analyse de l'échantillon "GU3", irradié en réacteur, pour le programme international ARIANE, compilées dans la base de données "SFCOMPO 2.0".

Internship context

The WPNCs deals with technical and scientific issues relevant to criticality safety. Specific areas of interest include (but are not limited to) investigations of static and transient configurations encountered in the nuclear fuel cycle. These include fuel fabrication, transport and storage. The WPNCs's objectives are to:

- exchange information on national programmes in the area of criticality safety;
- guide, promote and coordinate high-priority activities of common interest to the international criticality safety

- community and to establish co-operation;
- monitor the progress of all activities and report to the Nuclear Science Committee (NSC);
 - publish databases, handbooks and reports;
 - facilitate communications within the international criticality safety community through relevant websites;
 - coordinate WPNCs activities with other working groups within the NEA and in other international organisations to avoid duplication of activities; and
 - provide a technical basis for the activities of other international organisations (e.g. International Organizations for Standardization (ISO), International Atomic Energy Agency (IAEA)).

Currently, the WPNCs co-ordinates 7 Expert Groups and the ICSBEP Project

Among these groups, the SG-7 subgroup is in charge of studying the sensitivities and uncertainties of nuclear data on the isotopic inventory of spent fuel. To do this, the SG-7 has defined a benchmark based on the analysis data of the "GU3" sample, irradiated in a reactor, for the international ARIANE program, compiled in the "SFCOMPO 2.0" database.

Description du sujet du stage

Le sujet proposé consiste à réaliser des calculs, sans propagation des incertitudes dues aux données nucléaires, pour le benchmark proposé par le sous-groupe SG-7 du WPNCs, qui concerne l'analyse des sensibilités et incertitudes liées aux données nucléaires, avec comme référence l'inventaire isotopique de l'échantillon "GU3". Une comparaison des résultats de calcul aux données expérimentales de la base "SFCOMPO 2.0" sera réalisée.

L'étudiant sera amené à utiliser le code "TRIPOLI-4® évoluant", résultant du couplage du code Monte Carlo de neutronique TRIPOLI-4® et du code d'évolution MENDEL, tous deux développés au sein du SERMA.

Internship topic description

The proposed subject consists of performing calculations, without propagation of uncertainties due to nuclear data, for the benchmark proposed by WPNCs sub-group SG-7, which concerns the analysis of the sensitivity and uncertainties related to nuclear data, with reference the isotopic inventory of the "GU3" sample. A comparison of the calculation results with the experimental data of the "SFCOMPO 2.0" database will be performed.

The student will use the evolving TRIPOLI-4® code, resulting from the coupling of the TRIPOLI-4® Monte Carlo code and the MENDEL evolution code, both developed within the SERMA.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui/Yes

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique.

Durée du stage / Internship duration

6 mois/6 month

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : NOYELLES

Prénom : David

e-mail : david.noyelles@cea.fr

Téléphone : +33 (0) 1 69 08 83 25

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/CP2C

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° E7 – Laboratoire/Laboratory : LTSD

Titre du stage

ETUDES AUTOUR DES NOUVELLES POSSIBILITES GEOMETRIQUES DANS APOLLO3®

Internship title

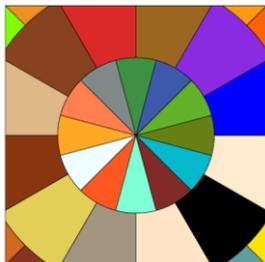
STUDIES AROUND NEW GEOMETRIC CAPACITIES IN APOLLO3® CODE

Type de sujet / Topic type

- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Le code APOLLO3® [1] est le nouveau code de calcul neutronique déterministe et multi-filières développé par le CEA, en partenariat avec Framatome et EDF. Il permet, entre autres, le calcul de cœurs dans différentes conditions de fonctionnement afin d'estimer des grandeurs d'intérêt pour le design ou l'opération de réacteurs nucléaires. Il résout pour cela l'équation exacte ou simplifiée du transport des neutrons.



La description géométrique des cœurs est classiquement composée de motifs répétés que sont les assemblages, qui eux-mêmes sont composés de motifs que sont les cellules. De récents développements dans le code ont permis d'étendre les possibilités de modélisation de ces cellules, en autorisant le rayon des couronnes à dépasser le rayon du cercle inscrit (voir figure). Cela ouvre donc de nouvelles perspectives de discrétisation en terme de maillage.

Internship context

APOLLO3® [1] is the new multi-purpose deterministic neutronics code developed by the CEA, in partnership with Framatome and EDF. It enables, among other things, the computation of nuclear cores undergoing different operational conditions, in order to evaluate quantities of interest for the design or operation of nuclear reactors. In order to do that, it solves the exact or simplified neutron transport equation.

The geometric modelling of reactor cores is generally made from repeated patterns which are assemblies, which themselves are described in terms of smaller patterns which are the cells. Recently some developments in the code have been done to extend the modelling possibilities of these cells, by allowing the radius of the rings to be greater than the incircle radius (see figure). This opens new prospects in terms of mesh creation.

Description du sujet du stage

Le sujet principal de ce stage est l'utilisation des nouvelles possibilités des cellules afin de contribuer à la vérification et la validation de ces récents développements géométriques. L'intérêt de ces nouvelles possibilités de modélisation sera aussi étudié.

Pour cela, le stage commencera par une prise en main générale du code APOLLO3®. Ensuite des cas tests simples déjà existants seront modifiés pour utiliser les nouveaux développements, puis on fera de même pour des cas de calcul plus complexes (notamment des schémas standards dits « industriels »). Cela permettra la vérification et la validation des nouvelles cellules (et aussi indirectement d'autres parties du code dont les solveurs), et l'étude comparative des résultats (précision de calcul, performances, ...).

Une partie de développement (remplacement de certains arcs de cercle par des segments pour obtenir ce qui est appelé « moulin à vent ») pourra être effectuée si une version longue du stage est envisagée. Le travail du stage inclura la rédaction du rapport final de stage.

Internship topic description

The main subject of this internship is to use the new possibilities of the cells to contribute to the verification and validation of this piece of software. Benefits of these new possibilities will also be studied.

In order to accomplish this, the internship will begin with a general use and tour of the APOLLO3® code. Then existing simple test cases will be modified to use the recent developments, before going to more complex test cases (including standard « industrial » schemes). This will provide verification and validation of these new developments (and indirectly other parts of the code including the solvers) and allow comparing the results (precision, performance, ...).

Some development work (replacement of some arcs of circle by segments to obtain what is called “windmill”) may be done if a longer version of the internship is considered. Internship work will include the redaction of a final report.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

[1] D. Schneider *et al.*, “APOLLO3®: CEA/DEN Deterministic Multi-Purpose Code for Reactor Physics Analysis”, *PHYSOR 2016*, Sun Valley, Idaho, USA, May 1-5, 2016.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Préférentiellement Master 1 ou 2^{ème} année école d’ingénieur (Master 2 ou 3^{ème} année école d’ingénieur si version longue) – connaissances en informatique scientifique (C++/C++14, Python, Linux)

Preferably Master 1 or 2nd year engineering school (Master 2 or 3rd year engineering school if longer version) – knowledge in scientific computer science (C++/C++14, Python, Linux)

Durée du stage / Internship duration

2/3 mois, 2/3 months (4/6 mois si version longue, 4/6 months if longer version)

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : BARON

Prénom : Rémi

e-mail : remi.baron@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 28 36

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Vérification & Validation de méthodes et de codes de calcul

Verification & Validation of methods and calculation codes

Sujets N° : V1 à V4
Topics N° : V1 to V4

Titre du stage

VÉRIFICATION ET VALIDATION DES SOLVEURS DÉTERMINISTES (APOLLO3®) ET MONTE CARLO (TRIPOLI-4®) DE BRUIT NEUTRONIQUE : APPLICATION AU RÉACTEUR EXPÉRIMENTAL CROCUS

Internship title

VERIFICATION AND VALIDATION OF NEUTRON NOISE DETERMINISTIC AND MONTE CARLO SOLVERS (APOLLO3® AND TRIPOLI-4®): APPLICATION TO THE CROCUS RESEARCH REACTOR

Type de sujet / Topic type

- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

L'amélioration de la sûreté des réacteurs nucléaires a toujours été un enjeu majeur pour la filière nucléaire mondiale. Les exploitants et les organismes de recherche se doivent d'explorer toutes les pistes tant technologiques que méthodologiques à même d'accroître la sûreté des réacteurs. Parmi ces voies, l'étude du *bruit neutronique* en est une particulièrement prometteuse, qui répondrait à de nombreuses problématiques comme la détection en temps réel de propriétés dynamiques globales du réacteur ou d'anomalies survenant en cours de fonctionnement.

Le bruit neutronique («power reactor noise») [2][3] désigne les fluctuations de la population neutronique induites par des changements déterministes ou stochastiques des sections efficaces macroscopiques lors du fonctionnement à puissance nominale d'un réacteur nucléaire. Ces perturbations peuvent avoir des origines diverses comme une variation de densité du caloporteur ou une vibration d'un élément mécanique (barres de contrôle, assemblages ou crayons combustibles...). Dans les réacteurs de puissance, un éventuel bruit neutronique serait observable par les détecteurs de neutrons placés à l'intérieur et à l'extérieur du cœur. Lorsque ces bruits sont jugés anormaux, tout l'enjeu est de savoir identifier et localiser leurs sources afin de pouvoir mettre en place les mesures de sûreté éventuellement nécessaires au bon fonctionnement de l'installation.

Dans ce contexte, le CEA participe activement au grand projet européen H2020 CORTEX (2017-2021) qui réunit de nombreux acteurs de la filière nucléaire européenne autour du développement d'outils numériques performants pour l'analyse du bruit neutronique [1].

Internship context

Improving the safety of nuclear reactors has always been a major challenge for the nuclear industry. Operators and research organizations must explore all the technological and methodological avenues to increase the safety of reactors. Among these paths, the study of neutron noise is a particularly promising one, which would answer many problems such as the real-time detection of global dynamical properties of the reactor or anomalies occurring during operation.

Neutron noise ("power reactor noise") [2] [3] refers to fluctuations in the neutron population induced by deterministic or stochastic changes in macroscopic cross sections during nominal power operation of a nuclear reactor. These disturbances can have various origins such as a change in coolant density or a vibration of a mechanical element (control rods, assemblies or fuel rods, etc.). In power reactors, a possible neutron noise could be observed by the neutron detectors placed inside and outside the core. When noise is considered abnormal, the challenge is to identify and locate its sources in order to ensure any action necessary for the proper functioning of the facility.

In this context, the CEA actively participates in the European H2020 project CORTEX (2017-2021) which brings together

many players in the European nuclear industry around the development of powerful numerical tools for the analysis of neutron noise [1].

Description du sujet du stage

Les équations générales du bruit neutronique sont issues de la linéarisation et de la transformée de Fourier de l'équation de Boltzmann cinétique perturbée autour de l'état d'équilibre du cœur, en suivant l'hypothèse de petites perturbations et en prenant en compte le couplage avec les équations des précurseurs. Ceci a pour résultat une équation à source dans le domaine fréquentiel. Résoudre cette équation complexe permet de prédire le bruit neutronique pour différents emplacements de détecteurs.

Trois solveurs de bruit neutronique ont récemment été implémentés au SERMA : deux dans le code de transport déterministe multi-filière de nouvelle génération APOLLO3® et un dans le code de transport Monte Carlo TRIPOLI-4® [3][4]. Les deux objectifs principaux du stage portent sur :

1. *Études comparatives entre les trois solveurs* : cette première partie permettra à l'étudiant(e) de prendre en main les solveurs et de comprendre la problématique de la résolution déterministe et stochastique des équations du bruit neutronique. Différentes études vibratoires seront menées sur des assemblages de réacteurs à eau légère UOX et MOX, afin d'appréhender les atouts et les faiblesses de chaque outil dans des configurations réelles et de réaliser une analyse physique de la propagation du bruit induit par vibration dans ces systèmes ;
2. *Participation à l'analyse de l'expérience vibratoire COLIBRI* [5]: cette seconde partie se focalisera sur la modélisation avec les codes APOLLO3® et TRIPOLI-4® de l'expérience COLIBRI réalisée dans le réacteur expérimental CROCUS. Des comparaisons entre codes (voire avec l'expérience) seront réalisées.

Internship topic description

The general neutron noise equations are derived from the linearization and the Fourier transform of the perturbed kinetic Boltzmann equation around the equilibrium state of the core, following the assumption of small perturbations and taking into account the coupling with the precursor equations. This results in a fixed-source equation in the frequency domain. Solving this complex (in the mathematical sense!) equation enables the prediction of neutron noise for different detector locations. Three neutron noise solvers have recently been implemented at SERMA: two in the APOLLO3® deterministic transport code and one in the TRIPOLI-4® Monte Carlo transport code [3] [4]. The two main objectives of the internship are:

1. *Comparative studies between the three solvers*: this first part will allow the student to take charge of the solvers and to understand the key issues of the deterministic and stochastic resolution of neutron noise equations. Various analyses of vibration-induced noise will be conducted on UOX and MOX light water reactor assemblies, in order to understand the strengths and weaknesses of each tool in real configurations and to perform a physical analysis of the vibration-induced noise propagation in these systems ;
2. *Contributing to the analysis of the vibration experiment COLIBRI* [5]: this second part will focus on the modeling (with the APOLLO3® and TRIPOLI-4® codes) of the COLIBRI experiment carried out in the CROCUS experimental reactor (Lausanne, Switzerland). Comparisons between codes (and/or with experience) will be performed.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] CORTEX : <https://fr.slideshare.net/ChristopheDemaziere/cortex-presentation-at-nugenia-2017-forum>
- [2] I. Pázsit, C. Demazière, Noise Techniques in Nuclear Systems, vol. 3. *Handbook of Nuclear Engineering*, Springer Verlag, 2010.
- [3] A. Rouchon, *Analyse et développement d'outils numériques déterministes et stochastiques résolvant les équations du bruit neutronique et applications aux réacteurs thermiques et rapides*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2016.
- [4] CEA, *La neutronique*. Monographie de la Direction de l'énergie Nucléaire, Éditions Le Moniteur, 2013.

[5] Description de l'expérience COLIBRI dans le réacteur expérimental CROCUS : <https://lrs.epfl.ch/page-132413-fr.html>

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique.
Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school – Knowledge in reactor physics and scientific computing.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : ROUCHON
Prénom : Amélie
e-mail : amelie.rouchon@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 78 73
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : ZOIA
Prénom : Andrea
e-mail : andrea.zoia@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 79 76
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Titre du stage

ÉVALUATION DES SENSIBILITÉS AUX DONNÉES NUCLÉAIRES SUR DES CALCULS SOUS CRITIQUE AVEC LE CODE MONTE-CARLO TRIPOLI-4®

Internship title

Type de sujet / Topic type

- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Dans un réacteur, lors de la phase d'approche sous-critique, « l'éveil » des chaînes de détection (instrumentation *in-core* ou *ex-core*) dépend des caractéristiques des sources de démarrage positionnées dans le cœur mais également du facteur d'amplification de ces sources. Ce facteur d'amplification dépend lui-même des propriétés neutroniques du cœur et du niveau de sous-criticité de celui-ci. Du point de vue de la modélisation, la réponse des chaînes de détection est corrélée au niveau de sous-criticité en se basant sur une approche quasi-statique : pour un niveau de sous-criticité donné correspondant à un état du cœur (concentration en bore, état d'irradiation, niveau d'insertion des barres par exemple), on calcule et on propage jusqu'aux détecteurs la distribution des sources correspondante.

Internship context

Description du sujet du stage

Le stage consiste à analyser la sensibilité aux données nucléaires sur les résultats calculés par le code Monte-Carlo TRIPOLI-4® en mode sous critique à sources fixes. Le travail sera appliqué sur un petit cœur expérimental ZEUS dont les données sont issues d'un benchmark de la base ICSBEP (*International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project*).

Dans un premier temps, le travail consistera à mettre en place dans les jeux de données TRIPOLI-4® la prise en compte de plusieurs évaluations et analyser les écarts obtenus pour quantifier la sensibilité à quelques isotopes.

Dans un deuxième temps, il faudra mettre en œuvre des méthodes de perturbation (existantes dans TRIPOLI-4®, méthode des échantillons corrélés..., ou extérieure au code) afin de déterminer les isotopes les plus contributeurs. Les perturbations pourront se faire sur les sections efficaces mais aussi sur les densités des matériaux ou d'autres paramètres de la configuration.

Une caractérisation de la convergence des estimateurs statistiques, notamment autour de la criticité, pourra être établie.

Internship topic description

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique.

Applicant profile

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : COCHET
Prénom : Sandrine
e-mail : sandrine.cochet@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 78 83
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : HUGOT
Prénom : François-Xavier
e-mail : francois-xavier.hugot@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 18 65
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Titre du stage

AMÉLIORATIONS DU CALCUL DE L'ÉCHAUFFEMENT NUCLÉAIRE : METHODOLOGIE DE RÉFÉRENCE ET MÉTHODOLOGIE INDUSTRIELLE

Internship title

NUCLEAR HEATING IN NUCLEAR REACTORS: CALCULATIONS AND EXPERIMENTAL VALIDATION

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

L'échauffement nucléaire est une problématique rencontrée dans tous les réacteurs nucléaires. Elle concerne le dégagement d'énergie dans les milieux non-fissiles dû aux interactions, dans le milieu étudié, de toutes les particules produites dans un réacteur nucléaire : neutrons, électrons/positrons, gammas prompts et gammas retardés.

Pour les réacteurs expérimentaux comme le RJH en construction à Cadarache, dont les expériences d'irradiation nécessitent une température imposée, la connaissance de l'échauffement nucléaire est de toute première importance. De son estimation va dépendre la conception même des expériences (mise en place de refroidissement ou, au contraire, de modes de chauffage supplémentaires). Aujourd'hui, une démarche de calcul de l'échauffement nucléaire existe, et repose sur l'utilisation du code de transport des particules TRIPOLI-4® (code développé au CEA et largement utilisé pour les études de réacteurs nucléaires et en radioprotection). Ces calculs doivent être validés sur une base expérimentale, ce qui est maintenant possible grâce à un dispositif de mesure dédié.

Internship context

Nuclear heating is of great interest in every nuclear reactors. It is defined by the energy deposited in non-fissile materials due to the interaction, with matter, of many types of particles produced by the fission reaction and its by-products (neutrons, electrons/positrons, prompts or delayed gamma rays).

In Material Testing Reactors, like JHR under construction in Cadarache CEA center, irradiation experiments have precise temperature requirements, which means that nuclear heating is very important: for many devices, the expected nuclear heating will imply the addition of electrical heaters or coolers. These technological constraints must be anticipated during the design phase of the experiment. The state-of-the art nuclear heating calculation method is based on a fine reactor modelling and uses the TRIPOLI-4® 3D neutron transport code (CEA reference code for neutron and gamma transport in nuclear reactors and for radiation protection). In order to validate these calculations, an experimental campaign was lead, in which a specific device measured nuclear heating in many reactor configurations.

Description du sujet du stage

Le travail de stage comporte deux volets, bien distincts.

- Le premier consiste à établir une méthodologie de calcul de référence, dont le but est de fournir des évaluations d'échauffement en réacteur. Ce travail s'inscrit dans la poursuite des études déjà menées et consiste à évaluer les différentes sensibilités de la méthodologie, puis à estimer l'échauffement nucléaire dans les configurations similaires à

celles des mesures et à comparer les résultats de calcul avec les mesures. Par ailleurs, il sera intéressant de comparer le flux neutronique, mesuré en même temps que l'échauffement. Enfin, un point sera spécifiquement abordé : l'effet des gammas retardés (émis par les produits de fission), qui selon certains modèles contribuent significativement à l'échauffement. Ceux-ci seront étudiés à l'aide de différentes bibliothèques de données nucléaires ainsi qu'à l'aide de mesures d'échauffement réalisées avant et après l'arrêt du réacteur.

- Le deuxième volet, au contraire du premier, vise à établir une méthodologie de calcul d'échauffement la plus simple possible tout en conservant un accord calculs-mesures qui reste raisonnable. Pour cela, il faudra mettre en place différentes approximations (effets retardés, environnement, usure du combustible, ...), qui se traduiront par un nombre de calculs moindre, et évaluer les biais de calcul ainsi introduits. Un bon compromis coût de calcul / précision sera recherché, dans l'optique de disposer d'une méthode de calcul semi-industrielle.

Internship topic description

This internship will consist of two major steps:

- Development of a reference calculation scheme for nuclear heating using the Monte Carlo code TRIPOLI-4®. In details, several sensibility analyses will be carried on, and their impact on nuclear heating and neutron flux will be assessed. Moreover, comparisons with specific measurement campaigns will help to evaluate and understand calculation biases. In particular, the contribution from delayed gammas varies according to different calculation hypotheses. Induced heating will be examined through different nuclear data libraries and dedicated measurements before and after reactor shutdown.
- Development of a simplified version of the nuclear heating calculation scheme. Indeed, the current nuclear heating calculation scheme is quite complex, which becomes prohibitive for industrial applications. In order to reduce the number of steps in the calculation scheme, different effects will be simplified (delayed contributions, environment or burn-up effects). In other words, the goal of this study is to achieve a satisfying compromise between precision and computational cost.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- H. Carcreff, L. Salmon, F. Malouch, "Recent developments in nuclear heating measurement methods inside the OSIRIS reactor", *Nuclear Inst. And Methods in Physics Research*, A 942 (2019)
- Peron, *Contribution à l'amélioration des méthodes d'évaluation de l'échauffement nucléaire dans les réacteurs nucléaires à l'aide du code Monte-Carlo TRIPOLI-4®*, thèse 2014
- Q. Guillon, "Calcul de l'échauffement nucléaire dans le réacteur OSIRIS et comparaison aux résultats expérimentaux", mémoire de stage 2019

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique.
Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school – Knowledge in reactor physics and scientific computing.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : CHEVALLIER

Prénom : Florent

e-mail : Florent.Chevallier@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 13 69

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° V4 – Laboratoire/Laboratory : LLPR

Titre du stage

ÉTUDES COMPARATIVES DES CALCULS DE DOSES BETA POUR LA TENUE DES MATERIELS SOUS IRRADIATION

Internship title

COMPARATIVE STUDIES OF BETA DOSE CALCULATION FOR THE INTEGRITY OF MATERIALS UNDER IRRADIATION

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling
- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Les études en radioprotection font intervenir différents outils numériques de simulation, basés notamment sur le transport de particules neutres (neutron et photon) et chargées (électron, positron, etc.). Le principal but de ces études est de calculer la dose (ou le débit d'équivalent de dose) dans le matériel et dans les postes de travail dans une installation nucléaire.

Les codes de calcul de transport basés sur la simulation d'histoires de particules par la méthode de Monte Carlo à énergie continue, permettent de fournir des calculs de référence car la résolution de l'équation de transport se fait sans aucune approximation physique (autre que celles portant les données nucléaires de base). En contrepartie, ces simulations nécessitent un temps de calcul important afin de réduire l'erreur statistique.

Dans les études de radioprotection opérationnelle, on fait appel à des codes dits simplifiés qui, moyennant certaines approximations physiques, permettant de réduire le temps de calcul de façons compatibles avec les contraintes d'exploitation. En revanche, il est important de valider le domaine d'utilisation de ces codes par rapport à des calculs de référence.

Internship context

Description du sujet du stage

Le but de ce stage est de réaliser des études comparatives pour des calculs de doses Bêta entre le code Monte-Carlo TRIPOLI-4® développé par le CEA) et le code industriel DOBERMAN (en cours de développement par EDF).

Le calcul de dose bêta avec TRIPOLI-4 est réalisé avec une simulation du transport couplé électron-positron-photo. Avec DOBERMAN, le calcul de dose bêta est basé le transport simplifié des électrons (Atténuation en ligne droite).

Le travail de benchmarking entre les deux codes sera réalisé sur des géométries représentatives de certaines configurations industrielles d'intérêt. Cela permettra de faire des recommandations et d'orienter le choix des modèles physiques simplifiés.

Internship topic description

Bibliographie - Références / Bibliography - References

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique

Durée du stage / Internship duration

5-6 mois / 5-6 months

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : MALOUCHE

Prénom : Fadhel

e-mail : fadhel.malouch@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 98 19

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR

Développement de méthodes et de codes

Methods and computational codes development

Sujets N° : D1 à D10
Topics N° : D1 to D10

Titre du stage

INVESTIGATION SUR LE COUPLAGE NON-LINÉAIRE AVEC L'ÉVOLUTION ISOTOPIQUE DANS LES CODES DE RÉSEAU EN TRANSPORT NEUTRONIQUE

Internship title

INVESTIGATION OF THE NON-LINEAR COUPLING WITH NUCLIDE DEPLETION IN LATTICE TRANSPORT CODES

Type de sujet / Topic type

- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes

Contexte du stage

Ce stage vise la mise en place d'un environnement de développement en Python, pour l'étude des méthodologies de couplage entre le solveur d'évolution isotopique et celui dédié à la résolution du transport neutronique dans des réseaux combustibles typiques de réacteur à eau. Ce couplage est non-linéaire et demande des approximations spécifiques afin d'assurer la solution dans des temps conformes aux contraintes du monde industriel. La modélisation mathématique de ce phénomène physique est utilisée dans plusieurs applications de la conception du cycle et du combustible.

Internship context

This internship focuses on a new development platform in Python to study different coupling methodologies between the depletion solver and the neutron transport solver, which are present in lattice transport codes. This coupling is non-linear and needs specific approximations in order to solve the problem in reasonable time and with ordinary computational resources, still assuring of course high accuracy. These requirements are crucial for industry. The mathematical model describing this physical phenomenon finds many notable applications in cycle and fuel design.

Description du sujet du stage

La production d'énergie thermique dans un réacteur nucléaire est assurée en majorité par les réactions de fission des isotopes lourds. Ces réactions sont provoquées par des neutrons générés par les mêmes réactions, et qui diffusent dans le réacteur en ralentissant à chaque fois qu'ils rencontrent des noyaux légers, comme l'hydrogène dans l'eau (le caloporteur). L'exposition prolongée du combustible nucléaire au flux neutronique comporte progressivement la réduction du contenu isotopique fissile (et fissionable) et la production de différents produits de fission, dont une partie montre des capacités importantes d'absorption neutronique. Ceci induit en général des changements dans le bilan matière qui sont assez très en temps au rapport à la vie du neutron. Cependant, la mise à jour de la distribution de flux neutronique est nécessaire pour le calcul des bons taux de réactions. L'évolution isotopique est gouvernée par la décroissance radioactive et par la transmutation issue des réactions nucléaires avec les neutrons. Ce phénomène est décrit avec le modèle mathématique de Bateman, figurant un système d'équations différentielles ordinaires non-linéaires et au premier ordre dans le temps, où la variation de la concentration des isotopes est donnée comme somme de toutes les réactions possibles de production et de disparition (transmutation, émission par fission, décroissance). Le caractère non-linéaire vient du flux neutronique avec lequel on calcule ces taux de réactions, parce qu'il dépend à son tour des concentrations isotopiques. Quant à la physique des neutrons, il faut recourir à la théorie du transport (linéaire) de Boltzmann pour calculer leur distribution dans l'espace et à l'énergie à laquelle ils se déplacent sur une direction donnée. Dans ce travail, nous utiliserons les solveurs de flux neutronique TDT et IDT implémentés dans le code APOLLO3[®], développé au CEA, pour résoudre cette équation sous forme

intégrale par la méthode des caractéristiques (MOC) dite “longues” (pour TDT) [2] et “courtes” (pour IDT) [1].

Différentes méthodologies sont disponibles dans la littérature pour résoudre le couplage entre les deux physiques. En raison du coût très important en ressources computationnelles dû au transport neutronique, l'on retrouve souvent des schémas itératifs basés sur une première prédiction des taux de réactions faites avec des modèles simplifiés de type polynomial, avec application d'une ou plusieurs corrections. Ces sont les schémas dits « predictor-corrector » qui cherchent à minimiser les appels au solveur du transport. Plusieurs variantes sont disponibles en littérature. Ce stage se concentre sur l'étude des méthodologies existantes pour les comparer sur des cas simples d'évolution isotopique sous irradiation. Comme premier cas d'étude, le problème d'évolution sera analysé dans un crayon combustible UO_2 typique des réacteurs sous pression à eau légère. Parmi les méthodes existantes nous nous concentrerons sur celles permettant des extrapolations d'ordres supérieurs [3] et particulièrement sur celles qui imposent la conservation de la puissance neutronique au cours du calcul. [4]

Le travail est donc structuré selon les actions ordonnées suivantes:

- Revue de la littérature et reprise des travaux existants
- Discussion du problème et de son cadre théorique
- Mise en place de la plateforme de développement
- Mise en place des cas test et vérification de l'implémentation
- Analyse des résultats
- Préparation du rapport final de stage

Internship topic description

The thermal energy production in a nuclear reactor comes mainly from fission reactions with heavy isotopes. These reactions are caused by neutrons released generally by other fissions, after they have slow down to thermal energies thanks to the scattering with light nuclides, like hydrogen in cooling water. Prolonged exposure of nuclear fuel to high neutron flux yields progressive consumption of fissile (and fissionable) isotopes and the production of different fission products, a part of which shows significant neutron absorption. Albeit slow in time compared to the fuel life cycle, these changes in the material inventory cause variations in the neutron flux, especially in its energy spectrum. In turn, the consequent change in reaction rates affects the build-up and depletion of the present nuclides, altering the forthcoming inventory. Specifically, the evolution in time of the nuclide concentrations is described by the Bateman equations, which constitute a system of first order ordinary differential equations in time, where production and removal rates are represented by transmutation, fission yields and radioactive decay. These equations are non-linear because the reactions rates depend on the neutron flux, which is a function of the actual nuclide concentrations. The (linear) Boltzmann transport theory describes instead the physics of neutrons, yielding the flux distribution in space, energy and direction of flight of neutrons. In this work, we will use the two/three-dimensional transport solvers (TDT and IDT) of the APOLLO3 code, developed at CEA, to solve its integral form by the method of characteristics (MOC) with the so-called long characteristics (TDT) [2] or short characteristics [1].

Different methodologies exist in literature to resolve the non-linear coupling between the two physics. Iterative schemes based on a former prediction with simpler polynomial models and successive corrections are often employed, because of the high computational effort requested for the solution of the neutron transport. These schemes are called “predictor-corrector”, and they are introduced with the purpose of reducing the number of transport solver executions. Many variants exist indeed, and this internship is intended to study their numerical performances on simple test cases, starting from a UO_2 fuel pin cell typical of PWR. Among the different existing methods, we will concentrate especially on higher order [3] extrapolative techniques that preserve the neutron power. [4]

Internship work plan:

- literature review and retrieval of the existing work
- Discussion of the problem and of its theoretical background
- Setup of the development platform

- Setup of the test cases and verification of the implementation
- Analysis of results
- Preparation of the final report

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- E. Masiello, R. Sanchez, I. Zmijarevic: “*New Numerical Solution with the Method of Short Characteristics for 2-D Heterogeneous Cartesian Cells in the APOLLO2 Code: Numerical Analysis and Tests*”, Nuclear Science and Engineering, Vol. 161, Number 3, 2009, 257-278. DOI:dx.doi.org/10.13182/NSE161-257.
- S. Santandrea, D. Sciannandrone, R. Sanchez, L. Mao, L. Graziano, “*A Neutron Transport Characteristics Method for 3D Axially Extruded Geometries Coupled with a Fine Group Self-Shielding Environment*”, Nuclear Science and Engineering, 186, pp. 239-276 (2017).
- J. Hykes, R. Ferrer “*A quadratic depletion coupling scheme with adaptive stepsize control in CASMO5*”, April 2017 Conference: M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, Jeju, Korea, April 16-20, 2017.
- E. Isotalo, G. G. Davidson, T. M. Pandya, W. A. Wieselquist, S. R. Johnson “*Flux renormalization in constant power burnup calculations*”, Annals of Nuclear Energy, Volume 96, October 2016, Pages 148-157.
- Chiba et Al. *Important fission product nuclides identification method for simplified burnup chain construction*, Physor 2014. Journal of nuclear science and technology, 52(7-8), 953-960 (2015).
- Stripling, Hayes Franklin, *Adjoint-based uncertainty quantification and sensitivity analysis for reactor depletion calculations*, PhD thesis (2013).

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui/Yes

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année d'école d'ingénieur Connaissances en physique des réacteurs, méthodes numériques et en informatique scientifique (Python, Bash).

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school – Knowledge in reactor physics and scientific computing. – Fundamentals in reactor physics, numerical mathematics, programming (Python, Bash).

Durée du stage / Internship duration

Mois/months: 5-6

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : TOMATIS
Prénom : Daniele
e-mail : daniele.tomatis@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 25 26
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : SANTANDREA
Prénom : Simone
e-mail : simone.santandrea@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 81 78
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Nom : ZMIJAREVIC
Prénom : Igor
e-mail : igor.zmijarevic@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 84 75
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° D2 – Laboratoire/Laboratory : LPEC

Titre du stage

APPROXIMATION D'INTERPOLATION HIÉRARCHISÉE DES SECTIONS EFFICACES À NOMBRE DE GROUPES RÉDUIT À L'AIDE DE POLYNÔMES SOUS FORME DE NEWTON

Internship title

HIERARCHICAL INTERPOLATION OF FEW GROUP CROSS SECTIONS ON SPARSE GRIDS WITH POLYNOMIALS IN NEWTON FORM

Type de sujet / Topic type

- Mathématiques appliquées / applied mathematics
- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

Contexte du stage

Ce stage se concentre sur des méthodologies mathématiques d'approximation polynomiale de fonction pour la reconstruction en ligne des données nécessaires aux calculs de cœur. Ces derniers font partie des simulations multi-physiques plus complexes reproduisant le comportement du réacteur en situation normale pendant l'exploitation, ainsi qu'en situation accidentelle. Les données (sections efficaces homogénéisées) issues de cette reconstruction sont produites en amont des calculs pour différentes configurations physiques afin de constituer une base de données paramétrées en grandeurs physiques macroscopiques. Celles-ci caractérisent la réponse neutronique en terme de la réactivité du système. Ce stage fait suite à des travaux préliminaires qui ont permis de démontrer l'intérêt de la méthode basée sur l'interpolation sur maillage dégradé et hiérarchisé pour des applications industrielles. Les espaces multidimensionnels sont obtenus par construction cartésienne. L'utilisation de la nouvelle librairie numérique PPPACK dédiée à l'interpolation de type polynomiale dans des espaces à plusieurs dimensions est préconisée, conjointement au développement d'algorithmes gérant la hiérarchisation des maillages.

Internship context

This internship focuses on mathematical methods approximating scalar functions by polynomial-like techniques, which are based on hierarchical interpolation and sparse grids. These data, called homogenized cross sections, constitute the input to nuclear computer codes calculating the thermal power distribution inside the reactor core. Reactor simulators perform these calculations in order to implement the complex multi-physics simulations that reproduce the behavior of the reactor at both normal operation and accidental situations. Detailed lattice-transport calculations prepare these data in many representative physical configurations, so that a database is available to the neutron code computing the power. These macroscopic quantities characterize the neutron reactivity of the system. They are assumed as linearly independent, and they build by Cartesian construction the multidimensional space for the data under fit. The goal of the reconstruction is extending continuously on the multidimensional space the discrete information provided by the data library. This internship continues prior efforts that demonstrated the interest of the methodology for industrial applications. The candidate will use the new numerical library PPPACK meant for polynomial-like interpolation on real-valued spaces of arbitrary dimension, and will develop new methods to handle sparse hierarchical grids.

Description du sujet du stage

Le stage se déroule en trois parties séparées. La première partie concerne la prise en main de l'outil informatique qui génère la base de données en utilisant le code APOLLO3®. APOLLO3® résout le problème de Boltzmann du transport des neutrons

dans les éléments de combustible qui seront chargés dans le réacteur. Chaque élément, ou assemblage de crayons combustibles, est calculé à différentes températures du combustible nucléaire et conditions physiques du caloporteur (modérateur de neutrons), pour homogénéiser les données nucléaires exprimant les principaux taux de réactions. Ces données sont appelées sections efficaces homogénéisées et elles deviennent par ce processus des fonctions des grandeurs physiques identifiant chaque calcul tourné avec APOLLO3. Une fois maîtrisée cette procédure, le candidat pourra expérimenter les techniques d'interpolation polynomiale déjà disponibles avec la librairie PPPACK. Seulement des maillages Cartésiens complets seront exploités dans cette deuxième partie, ce qui conduit notamment au problème d'une grande quantité de valeurs à stocker pour la reconstruction en ligne des sections efficaces homogénéisées. La librairie PPPACK offre aussi l'interpolation par B-splines, dont l'utilisation est recommandée sur certains axes où les fonctions à approximer sont moins régulières. L'utilisation de polynômes sous la forme de Newton est demandée pour assurer des hautes performances computationnelles. Dans la dernière partie du stage, l'on passera au développement des services dans la librairie PPPACK pour gérer l'interpolation sur des maillages hiérarchisés et moins denses en point de support pour l'interpolation. Les trois derniers mois du stage seront consacrés à cette partie, avec des résultats attendus pour différents assemblages combustibles utilisés dans les REP.

Le travail est donc structuré selon les actions ordonnées suivantes:

- Revue de la littérature et reprise des travaux existants
- Prise en main de l'outil pour la génération des librairies des sections efficaces homogénéisées avec APOLLO3®
- Implémentation et test de l'interpolation polynomiale à plusieurs dimensions sur maillage Cartésien
- Discussion des limitations des techniques couramment utilisées dans l'industrie
- Développement des services informatiques pour disposer de l'interpolation sur maillage hiérarchisé avec moins de points de support
- Analyse des résultats obtenus avec différents éléments combustibles
- Préparation du rapport final de stage

Internship topic description

The internship has three separate steps. The first addresses the setup of the platform generating the data libraries used to construct the function approximations by interpolation. This tool performs several APOLLO3® calculations resolving the neutron transport problem of Boltzmann on the fuel elements, which will be loaded afterwards in the core of the reactor. Each element, or fuel assembly, is calculated at different fuel temperatures and conditions of the coolant, being also the moderator of neutrons, in order to homogenize the nuclear data that yield the main reaction rates. These data are called homogenized cross sections, and by means of this process, they become functions of the macroscopic quantities identifying the calculations executed by APOLLO3®. After mastering this tool, the candidate will be able to test the interpolation techniques already available in the package PPPACK, which are limited to multivariate interpolation on full Cartesian grids. As well-know, this causes the "curse of dimensionality" problem arising with increasing number of independent variables for the functions to approximate, thus leading to considerable storage requirements. PPPACK offers also B-splines interpolation, whose utilization is recommended on axes where functions are less regular. The use of polynomials in Newton form is requested to achieve high computational performances. The last phase of the internship is devoted to the development of the hierarchical interpolation on sparse grids. This more important phase is expected to cover by itself half of the internship period. The new techniques will be tested with the datasets from different PWR fuel assemblies.

Internship work-plan:

- Literature review and retrieval of the existing work
- Training and setup of the tool to generate the dataset of homogenized cross sections by APOLLO3
- Implementation and test of multivariate polynomial-like interpolation on full Cartesian grids
- Discussion of the problem and of its main drawbacks in the industrial work-frame
- Development of the methods to handle hierarchical interpolation on sparse grids
- Analysis of results obtained with different fuel elements

- Preparation of the final report

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Tomatis Daniele, *PPPACK: a package for polynomial-like multivariate interpolation of real-valued scalar function*, <https://github.com/ndarmage/pppack>, 2017.
- De Boor Carl, "A practical guide to splines". Vol. 27. New York: Springer-Verlag, 1978.
- Botes Dannieell and Bokov Pavel, "Hierarchical, multilinear representation of few-group cross sections on sparse grids", Proc. of the Int. Conf. M&C 2011 Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12 (2011).
- Bokov Pavel, Botes Dannieell and Zimin Vyacheslav, "Pseudospectral Chebyshev representation of few-group cross sections on sparse grids", Proc. of the Int. Conf. PHYSOR 2012 Knoxville, Tennessee, USA, April 15-20, 2012.
- Botes Dannieell and Bokov Pavel, "Polynomial interpolation of few-group neutron cross sections on sparse grids", Annals of Nuclear Energy 64 (2014): 156-168.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui/Yes

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année d'école d'ingénieur – Connaissances en informatique scientifique et mathématiques appliquées
Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school – Knowledge in reactor physics and scientific computing. –
Fundamentals in reactor physics, numerical mathematics, programming (Python, Bash).

Durée du stage / Internship duration

Mois/months: 5-6

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : TOMATIS
Prénom : Daniele
e-mail : daniele.tomatis@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 25 26
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° D3 – Laboratoire/Laboratory : LPEC

Titre du stage

CALCUL DE LA PUISSANCE THERMIQUE PRODUITE DANS LE SOUS-CANAL DES RÉACTEURS REFROIDIS À MÉTAUX LIQUIDES

Internship title

THERMAL POWER CALCULATION IN THE CLOSED CHANNEL OF LIQUID-METAL COOLED REACTORS

Type de sujet / Topic type

- Mathématiques appliquées / applied mathematics
- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

Contexte du stage

Ce stage étudie le couplage multiphysique entre la neutronique et le transfert thermique au sein de l'élément de base d'un réacteur nucléaire conçu sur un réseau de crayons combustibles. Cet élément est couramment appelé le sous-canal. Ce couplage doit reproduire les effets physiques de contre-réaction sur la réactivité du système causés par des variations de température du combustible et/ou des propriétés thermodynamiques du réfrigérant. En particulier, le relâchement d'énergie thermique est issu des interactions des neutrons avec le combustible nucléaire, et il est calculé par un modèle neutronique dérivé de l'équation de Boltzmann. L'énergie transférée au fluide réfrigérant est prise en compte dans les équations de conservation propre au fluide. Cette étude considère premièrement des situations stationnaires en fonctionnement nominal.

Dans un réseau à pas carré, l'élément de base est représenté par quatre crayons limitrophes et le volume de caloporteur autour, alors que seulement trois crayons sont nécessaires avec un réseau à pas hexagonal. La première conception de réseau est typique des réacteurs à eau, tandis que la deuxième est caractéristique des réacteurs à neutrons rapides, qui sont refroidis en général par des métaux à l'état liquide ou par des sels fondus.

En général, le problème couplé est traité numériquement par l'enchaînement successif de calculs dédiés à la résolution séparée de chaque physique (itérations de Picard). D'autres techniques fondées sur la méthode du gradient ont été proposées dans la littérature pour atteindre la solution avec moins d'appels aux solveurs impliqués. Cependant les méthodes existantes ne sont pas à l'abri de problèmes de fausse convergence, et elles demandent des efforts computationnels importants. Récemment, une nouvelle approche a suggéré la reformulation du problème en combinant les différents modèles physiques pour traiter ces problèmes [1]. Cette approche a été appliquée dans un cas simple de sous-canal REP sous l'hypothèse de fluide incompressible. L'objectif du stage est d'appliquer cette nouvelle technique à un sous-canal de réacteur refroidi par un métal liquide, où la simplification d'incompressibilité est pleinement acceptable.

Durant ce stage le candidat sera familiarisé aux principes fondamentaux de la physique des réacteurs nucléaires à fission, et il participera activement aux travaux de recherche impliquant en particulier des développements mathématiques, de la programmation scientifique.

Internship context

This internship studies the multi-physics coupling between neutronics, heat transfer and thermal-hydraulics occurring inside the fundamental element of a nuclear reactor designed on a lattice of fuel pins. This element is also called sub-channel. This coupling must reproduce the thermal feedback on the neutron reactivity of the system due to changes in the fuel temperature and/or in the thermo-dynamical properties of the coolant. In particular, neutrons interacting with the nuclear fuel release the thermal energy, which is computed by a neutron model derived from the Boltzmann equation. The

energy transferred to the coolant is accounted in the conservation equations of the fluid. This work is limited to steady state conditions at normal operation.

In a rectangular lattice, this element is identified by four neighboring fuel rods and the confined volume where the coolant flows, while the hexagonal lattice needs only three rods. The first design is typical of water reactors, whereas fast reactors that are often cooled by liquid metal or molten salt use the second one.

In general, the coupled problem is solved numerically through successive calls to different computer codes, which are resolving separately the physics under coupling (Picard iterations). Specifically, the partial solutions from a given solver are used to linearize the problems solved by the other codes, and the convergence on all input arguments is sought iteratively. Other techniques using the gradient-like methods have been proposed in literature to attain the solution with fewer calls to the separate codes. However, the existing methods can incur into the problem of false convergence, and they demand remarkable computational resources. Recently, a new method suggested to reformulate the problem by combining the coupled equations in a new form, in order to cope with these disadvantages [1]. This method was applied in a simple case of PWR sub-channel under the assumption of incompressible fluid. The goal of the current internship is to apply this technique to a typical sub-channel of liquid-metal cooled reactor, where the fluid incompressibility is a valid assumption.

During this internship, the student will be introduced to the reactor physics fundamentals, contributing actively to the research topic by mathematical methods development and scientific programming peculiarly.

Description du sujet du stage

Les travaux de stage sont articulés en trois parties, ayant l'objectif de modéliser la physique du sous-canal typique d'un réacteur refroidi à métaux liquides. La première s'adresse à la prise en main des travaux existants, à l'étude de la nouvelle méthode et à la définition du problème à traiter [1]. Dans la deuxième partie, un modèle de données propre à ce type de réacteur sera développé à l'aide de corrélations empiriques et standards, et du code APOLLO3[®], pour alimenter correctement les codes de calcul déjà disponibles. Le code APOLLO3[®] permet de résoudre la physique des neutrons décrite par l'équation de Boltzmann, en utilisant plusieurs modèles pour le traitement des données nucléaires de base.

Des schémas de calcul pour la filière des réacteurs à neutrons rapides sont déjà disponibles ; normalement ces réacteurs emploient des réfrigérants métalliques à l'état liquide. APOLLO3[®] calcule le comportement neutronique dans les éléments combustibles dans une situation physique bien identifiée, et produit les données d'entrées aux codes modélisant le sous-canal. Le temps de calcul demandé par APOLLO3[®] est malheureusement très important de sorte que des modèles réduits ou simplifiés, capables d'approcher les résultats du code APOLLO3[®], sont nécessaires.

Le candidat produira donc un modèle réduit pour reconstruire les sections efficaces en fonction des variables thermodynamiques d'intérêt, en utilisant par exemple une simple régression linéaire par moindres carrés ou d'autres méthodes plus raffinées. La troisième partie est consacrée à la mise en place de l'application, à l'analyse des résultats et à l'écriture d'un rapport final.

Le travail est donc structuré selon les étapes suivantes :

- Revue bibliographique et reprise des travaux existants.
- Définition du problème physique du sous-canal.
- Prise en main de l'outil pour la génération des bibliothèques des sections efficaces homogénéisées avec APOLLO3[®].
- Implémentation de l'application pour le sous-canal représentatif.
- Analyse et discussion des résultats.
- Préparation du rapport final de stage.

Internship topic description

The internship plan consists of three separate steps, with the goal of modelling the physics of the typical sub-channel of a

reactor cooled by liquid metals. The first step is about the literature review and the study of the new method [1] motivating this work. This will allow defining carefully the problem for the intended application. The second step is dedicated to produce a data model apt to this type of reactors by means of empirical and standard correlations, and by the APOLLO3 computer code, in order to provide suitable input to the computational model resolving the coupled problem in the channel. This last model, explained in [1], is already available through a specific computer code. The code APOLLO3® resolves the neutron physics described by the Boltzmann equations employing advanced methods to treat the basic nuclear data.

Calculation scheme for fast reactors are already available; these reactors generally use coolant based on liquid metals. APOLLO3® calculates the reaction rates obtained by the neutron distribution inside the fuel elements at given physical conditions, and produce input data by homogenization of these rates for sub-channel codes. The calculation time of APOLLO3® is rather long because of the detailed neutron transport physics that it computes. Thence reduced models are necessary, being much faster to evaluate on demand. Specifically, this model yields the homogenized cross sections at different conditions of the state parameters that characterize the thermal feedback on the neutron reactivity of the system. Their mathematical form is exploited by the new method in [1] to reformulate the coupled problem in the channel.

The candidate is then expected to develop a model based on ordinary least square regression or other more advanced techniques in this part of the internship. The last part of the internship is dedicated to the setup of the sub-channel application, the analysis of the results and the production of a final technical report.

The internship work-plan is the following:

- Bibliographical review and retrieval of the existing work.
- Definition of the sub-channel problem.
- Training and setup of the tool to generate the dataset of homogenized cross sections by APOLLO3®.
- Implementation of the sub-channel application.
- Analysis and discussion of results.
- Preparation of the final report.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Tomatis Daniele, *“Reformulation of the coupled problem for the simplified closed channel”*, Annals of Nuclear Energy 130 (2019): 377-387.
- Todreas, N. E., & Kazimi, M. S. (1990). *“Nuclear systems II: Elements of thermal hydraulic design”* (Vol. 2). Taylor & Francis.
- Stacey, W. M. (2018). *“Nuclear reactor physics”*. John Wiley & Sons.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année d'école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs nucléaires, transfert de chaleur, thermohydraulique, informatique scientifique et mathématiques appliquées.

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school – Knowledge in reactor physics and scientific computing. – Fundamentals in nuclear reactor physics, heat transfer, thermalhydraulics, programming (Python, Bash).

Durée du stage / Internship duration

Mois/months: 4-5

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : TOMATIS

Prénom : Daniele

e-mail : daniele.tomatis@cea.fr

Téléphone : +33(0)1 69 08 25 26

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Titre du stage

DÉVELOPPEMENT D'UN SCHÉMA DE CALCUL MULTIPHYSIQUE (NEUTRONIQUE, THERMO-MÉCANIQUE ET THERMO-HYDRAULIQUE) POUR LA PRODUCTION DE TABLES DE PARAMÈTRES THERMOMÉCANIQUES.

Internship title

DEVELOPMENT OF A MULTIPHYSICS (NEUTRONIC, THERMO-MECHANICS AND THERMO-HYDRAULIC) CALCULATION SCHEME FOR PRODUCTION OF THERMOMECHANICAL PARAMETERS TABLES

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling
- Études et benchmarking / Studies and benchmarking,
- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes
- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

Contexte du stage

Internship context

In the actual state of the art of the reactor physics numerical calculations, it exists a preliminary phase where the main three physics necessary to the simulation are decoupled: these three domains are the thermal-hydraulics of the coolant, the thermo-mechanics of the fuel pin and the neutron distribution needed to determine the power. Since a full-scale heterogeneous multi-physics calculation is beyond the limits of the actual computational capabilities in industrial calculations, the full 3D core calculations are run over homogenised zones while local quantities are retrieved by reconstructing heterogeneous quantities using pre-tabulated values.

As for neutronics, modern deterministic codes like APOLLO3® allow to perform accurate calculations even at the fuel cell or assembly scale. The common approach is to use coarse meshes like the quarter of assembly for calculations at the core level. To produce cross sections for the core calculation, the fuel cell scale calculations describe finely both the fuel temperature and the moderator density. However, the coupling between the temperatures and/or densities of the different materials, due to mechanics and fluid dynamics, is completely neglected. This coupling is only treated at the core level, under the simplifying hypotheses that the cross homogenization does not impact the precision. This is the key point of the so-called 2-step approach, which is still the predominant one for multiphysics calculations, and consists in lattice and core calculations. The first, as we have said before, is an extremely precise calculation on several portions of the problem with very fine spatial and energy meshes, but with simplified boundary conditions. At core level, homogenised sub-domains are represented using data obtained from the low-scale (cell or assembly) calculations. The objective is to produce the set of homogenized cross-sections in different operating conditions of the reactor and arrange them in the form of interpolation tables. Full-core calculations are then run with this simplified material and geometrical description of the system

The scope of the internship is to investigate one of the aspects of the preliminary “library” building phase. In particular, the feedback of the thermo-mechanical behaviour of the fuel is computed by the use of a set of preliminary tables that describe the behaviour of temperature, density and conductance variation in function of the burnup. With respect to this, we remind that the fuel pin is inserted into the cladding with a gap that strongly affects the temperature profile. During the nuclear combustion, this gap disappears while the pin swells. Here the predominant phenomenon is the gap closure, which drastically improves the heat removal and consequently lower the fuel temperature. To give an idea of these variations please check Figure 1 of the appendix. Another very important aspect is the distribution of fission gases inside the pellet.

Fuel performance codes like ALCYONE [3] are able to model the evolution of the fuel pin during its evolution accurately reproducing the geometry variation that results mainly from fuel swelling and cladding creep. The fission rate in the fuel and the fast flux in the cladding drives the gap closure and local variation in temperature, conductance and density profiles. However, ALCYONE relies on two possible neutronics models, both of them very simplified in comparison to APOLLO3® [4].

Even if in a high fidelity physics environment, like that of codes like ALCYONE, the complete coupling between all these physics should be investigated and solved, in practice it is customary to identify some simplified, but representative assumptions to run realistic calculations. The main approximation, accepted for the fuel performance code, is to suppose that it can reconstruct the neutron distribution using a single pin infinite lattice (i.e. periodic) assumption. We believe that very heterogeneous loading pattern fuel assemblies (like those with gadolinium or with the control rods) cannot be accurately described while keeping these hypotheses.

In previous works [2] we have found that feeble effects are to be expected when the realistic density or temperature profiles are inserted into APOLLO3. However we think that for heterogeneous fuel design, ALCYONE should rely on more realistic neutronic calculations, and that the actual "one isolated" pin model should entail important errors.

Multiphysics is currently one of the central topics in reactor physics: just at SERMA, similar subjects are carried out by two PhD students and one Post-doc.

Description du sujet du stage

See the English part.

Internship topic description

The main objective is to build a best-estimate multi-physics scheme by using a fine-mesh neutronic and isotopic depletion calculations into the thermo-mechanics framework.

Previous studies show that the neutronics is relatively independent of the actual power profile in nominal conditions. The latter observation allows decoupling the problem: in the internship we preconize to perform a lattice evolution calculation with APOLLO3® and to communicate then the fuel pin power profiles to ALCYONE in order to produce improved tables of thermo-mechanical parameters. The latter are successively used during core calculation in a decoupled way.

The candidate will improve the previous model that was only a "one-pin" model, by participating to the development of a "whole assembly" model that will allow to produce more realistic ALCYONE tables (of temperatures, density and gap conductance along burn up) that will take into account the realistic assembly environment. The work consists in the implementation and verification of APOLLO3-ALCYONE coupling, the multiphysics calculations and analysis using the examples of representative PWR assemblies, and the comparison with the results of classical approach.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] Bielen, Andrew Scott. "Sensitivity and Uncertainty Analysis of Multiphysics Nuclear Reactor Core Depletion." (2015). (Accessible at: https://deepblue.lib.umich.edu/bitstream/handle/2027.42/111444/asbiele_1.pdf?sequence=1&isAllowed=y)
- [2] Tomatis, Daniele & Zmijarevic, Igor & Cattaneo, Paolo. (2018). "A Simple Multiphysics Coupling For High-Fidelity Neutronic Modelling In Fuel Performance Codes" (Accessible at: https://www.researchgate.net/publication/324919333_A_SIMPLE_MULTIPHYSICS_COUPLING_FOR_HIGH-FIDELITY_NEUTRONIC_MODELLING_IN_FUEL_PERFORMANCE_CODES)
- [3] Thouvenin, G., et al. "ALCYONE: the PLEIADES fuel performance code dedicated to multidimensional PWR studies." *Proceedings of Top Fuel* (2006).
- [4] Schneider, D., et al. "APOLLO3®: CEA/DEN deterministic multi-purpose code for reactor physics analysis." *Proc. Int. Conf. Physics of Reactors (PHYSOR2016)*. 2016.

Appendix

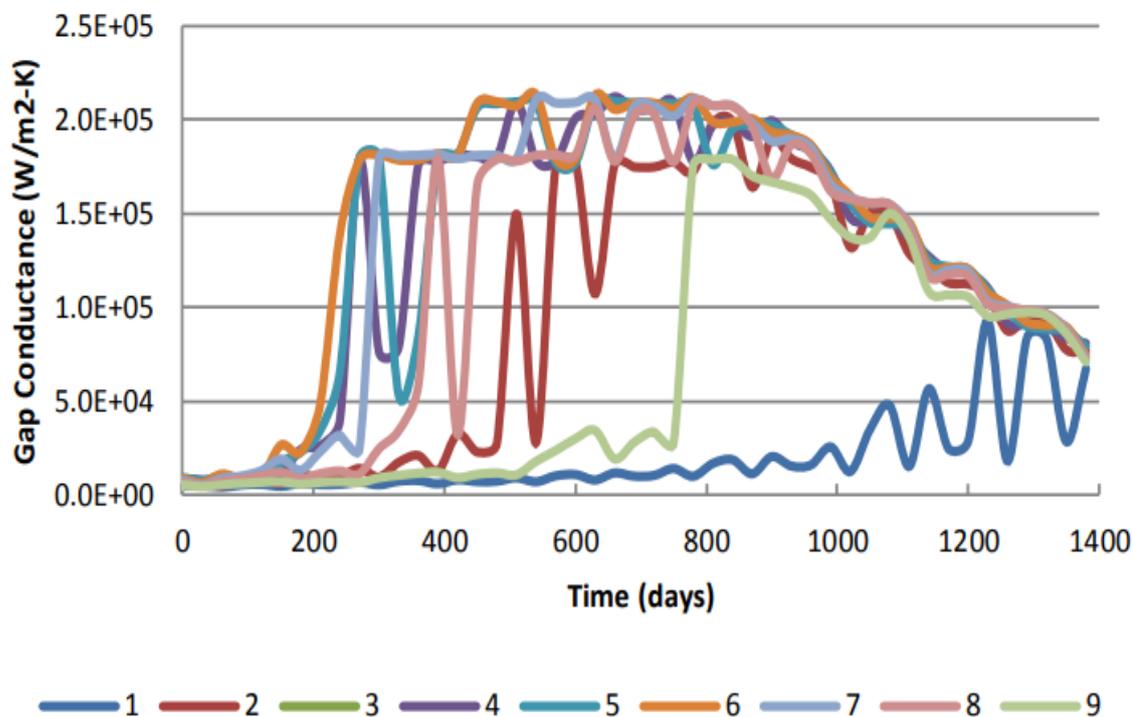


Figure1: Gap conductance evolution in nine axial meshes of a typical PWR fuel rod, figure from page 8 of Reference [1].

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui/Yes (on a connected subject).

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique
Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school. Knowledge of reactor physics and scientific computing.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : ZMIJAREVIC
Prénom : Igor

Téléphone : 01 69 08 84 75
e-mail : igor.zmijarevic@cea.fr
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Nom : SCIANNANDRONE
Prénom : Daniele
e-mail : daniele.sciannandrone@cea.fr
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR

Nom : SANTANDREA
Prénom : Simone
e-mail : simone.santandrea@cea.fr
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Titre du stage

DÉTERMINATION DE LA DEUXIÈME VALEUR PROPRE D'UN CALCUL MONTE-CARLO CRITIQUE

Internship title

DETERMINING THE SECOND EIGENVALUE OF A CRITICALITY CALCULATION BY MONTE CARLO METHODS

Type de sujet / Topic type

- Développement de méthodes et algorithmes / Development of numerical methods and algorithms
- Simulation numérique / Numerical simulation

Contexte du stage

En physique des réacteurs, on cherche à connaître la répartition d'équilibre des neutrons dans le cœur et la variation de la population neutronique entre deux générations successives. Ce problème équivaut mathématiquement à la détermination de la fonction propre fondamentale et de la valeur propre fondamentale associées à l'équation de Boltzmann, qui régit le transport des neutrons dans la matière. L'outil numérique de référence pour la solution des problèmes à valeurs propres est la méthode dite de *l'itération de la puissance*, qui est implémentée dans la plupart des codes de transport neutronique, déterministes ou stochastiques (Monte-Carlo).

Les méthodes de Monte Carlo se basent sur la simulation d'un très grand nombre de trajectoires aléatoires de neutrons. Les moyennes sur l'ensemble des trajectoires simulées permettent d'accéder aisément aux observables physiques d'intérêt. Chaque trajectoire décrit une *marche aléatoire* dont les propriétés mathématiques sont déterminées en accord avec les lois physiques sous-jacentes. Par itération des trajectoires des neutrons entre générations successives (une génération étant définie comme l'ensemble d'événements entre une naissance d'un neutron par fission et sa disparition par fission, capture ou fuite géométrique), on peut démontrer que la répartition des neutrons simulés converge vers la fonction propre fondamentale et que le rapport entre la taille de la population à deux générations successives converge vers la valeur propre fondamentale.

Récemment, il a été montré qu'il est possible de généraliser l'itération de la puissance dans les simulations Monte-Carlo, afin de déterminer aussi la deuxième valeur propre et la deuxième fonction propre associées à l'équation de Boltzmann. Ces paramètres physiques jouent un rôle très important dans l'étude de la sûreté des réacteurs, la séparation entre les deux premières valeurs propres étant liée aux oscillations de la puissance autour de la valeur moyenne.

Internship context

In reactor physics, the key goal is to determine the equilibrium distribution of neutrons in the core and the variation of the neutron population between two successive generations. This problem is mathematically equivalent to the determination of the fundamental eigenfunction and the fundamental eigenvalue associated with the Boltzmann equation, which governs the transport of neutrons in matter. The numerical reference tool for solving eigenvalue problems is the so-called power iteration method, which is implemented in most neutron transport codes, either deterministic or stochastic (Monte Carlo).

Monte Carlo methods are based on the simulation of a very large number of random trajectories of neutrons. The averages over the ensemble of simulated trajectories allow easy access to the physical observables of interest. Each trajectory describes a random walk whose mathematical properties are determined in accordance with the underlying physical laws. By iteration of the trajectories of neutrons between successive generations (a generation being defined as the set of events between a birth of a neutron by fission and its disappearance by fission, capture or leakage), it is possible to show that the

distribution of the simulated neutrons converges towards the fundamental eigenfunction and that the ratio between the size of the population with two successive generations converges towards the fundamental eigenvalue.

Recently, it has been shown that it is possible to generalize the power iteration in Monte Carlo simulations, in order to also determine the second eigenvalue and the second eigenfunction associated with the Boltzmann equation. These physical parameters play a very important role in the study of the reactor safety, the separation between the first two eigenvalues being related to the oscillations of the power around the average value.

Description du sujet du stage

L'étudiant analysera d'abord la littérature disponible sur la détermination de la deuxième valeur propre par approche probabiliste et s'appropriera des techniques mathématiques et des méthodes Monte-Carlo qui en découlent. L'objectif du stage sera d'implémenter dans une maquette numérique (en python ou en C++) les algorithmes Monte-Carlo pour la détermination de la deuxième valeur propre et de les améliorer si nécessaire. La convergence des algorithmes développés – particulièrement difficile – sera ensuite analysée et comparée à celle de l'itération de la puissance classique. Ensuite, l'étudiant analysera les performances de ces nouveaux algorithmes par rapport à quelques configurations de type réacteur (simplifiées afin de pouvoir disposer de solutions analytiques de référence). En fonction de l'avancement du stage, l'étudiant pourra enfin vérifier la généralisation de ces méthodes à des problèmes plus réalistes, notamment dans le cadre du transport à énergie continue, en prévision de l'implémentation dans le code Monte-Carlo TRIPOLI-4[®], développé au SERMA.

Internship topic description

The student will first analyze the available literature on the determination of the second eigenvalue by a probabilistic approach and will apprehend the mathematical techniques and the associated Monte-Carlo methods. The goal of the internship will be to implement in a simplified Monte Carlo code (written in python or in C++) the algorithms for the determination of the second eigenvalue and to improve them if necessary. The convergence of the developed algorithms - particularly challenging - will be then analyzed and compared to that of the classical power iteration. Then, the student will assess the performances of these new algorithms based on some reactor configurations (simplified in order to be able to obtain analytical solutions as a reference). Depending on the progress of the internship, the student will finally be able to evaluate the generalization of these methods to more realistic problems, especially in the context of continuous-energy transport, in anticipation of their implementation in the Monte Carlo code TRIPOLI-4[®], developed at SERMA.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- T. E. Booth and J. E. Gubernatis, Improved criticality convergence via a modified Monte Carlo power iteration method, International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (2009)
- T. E. Booth and J. E. Gubernatis, Monte Carlo determination of multiple extremal eigenpairs, Phys. Rev. E 80, 046704 (2009)

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur : connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique
Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school. Knowledge of reactor physics and scientific computing.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : JINAPHANH

Prénom : Alexis

e-mail : alexis.jinaphanh@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 62 75

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Nom : ZOIA

Prénom : Andrea

e-mail : andrea.zoia@cea.fr

Téléphone : +33(0)1 69 08 79 76

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° D6 – Laboratoire/Laboratory : LTSD

Titre du stage

DÉVELOPPEMENT D'UN SCHÉMA DE SURFACE D'ORDRE SUPÉRIEUR POUR LA MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES RÉSOUVANT L'ÉQUATION DU TRANSPORT DES NEUTRONS DANS DES MAILLAGES NON STRUCTURÉS.

Internship title

DEVELOPMENT OF A HIGHER ORDER SURFACE SCHEMES FOR THE METHOD OF CHARACTERISTICS SOLVING THE NEUTRON TRANSPORT EQUATION IN UNSTRUCTURED MESHES.

Type de sujet / Topic type

- Modélisation / Modeling
- Equation du transport / Transport equation,
- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

Contexte du stage

See the English part.

Internship context

Starting from their conception until their decommissioning, nuclear reactors need many studies allowing assuring their proper operation, their safety, their effectiveness, etc.. Due to the difficulties (and even the impossibility in some cases) of performing physical measurements inside the nuclear reactor core, the most part of these studies are realized with numerical simulations.

The complete simulation of a nuclear reactor involves many scientific domains (thermo-hydraulic, mechanical, neutronics,...) and therefore requires the use of very different calculation codes. Simulating the behavior of the neutron population is one of the fundamental steps, since it allows, among other things, to calculate the power density or fuel depletion rates. Neutron simulation is based on the Boltzmann equation to model the neutron population. Among the different numerical techniques to solve the stationary Boltzmann equation, the characteristics method has the advantage of using unstructured geometries, and offers a good precision over calculation time's ratio. This is therefore one of the most suitable methods for neutron simulation of nuclear reactor cores with modern calculation means

Description du sujet du stage

See the English part.

Internship topic description

This internship is on the line of research carried out in recent years to DM2S / SERMA concerning new solving techniques of the neutron transport equation in unstructured geometries within the TDT solver of the APOLLO3® code. In particular it concerns the improvement of a numerical technique called of "linear surface" characteristics scheme.

In this technique the volume values (neutron flux or collision of sources) are reconstructed from an interpolation made from surface values. Currently the calculated surface values have a constant representation in surfaces and a linear representation in volume. The interpolation is rescaled to preserve surface numerical values and region conservative averages.

In a first internship part, we will replace this representation by another in which the interpolations are made through local base functions of higher order polynomial. The preconized way is to use a parabolic base that will permit us to force preserving balance linear flux moments. After that, it will remain to address the important problem of the acceleration. Indeed, the transport problem solution with the method of characteristics is always based on the so called "free iterations". In these iterations the collision source is calculated by successive estimates, by calculating the angular flux result of the spread of a given source. Then the source is updated with the new stream until convergence. This process can become very heavy, especially when the prevailing conditions are those of a very high number of collisions.

Different types of acceleration methods have already been effectively implemented in TDT solver for the characteristics methods with linear surface representations. The main method used is a method that belongs to the family of methods known as "synthetic" and it will be on it that the candidate will have to focus.

The candidate of this internship will first become familiar with the subject and then see how these techniques can be reproduced in the new part of the surface higher-order methods. Note that the acceleration is in itself the most difficult subject for the characteristics method, and that without effective acceleration no method can achieve the status of an efficient industrial tool. It will be very important to take into account the optimization techniques of the resolution of the synthetic problem and to ensure that previous algorithms (or new ones) also work for the new higher order method.

The initial part of the work deals with unstructured two-dimensional geometries, which is the usual environment of the transport calculations in reactor physics. Depending on the progress, however we can also consider the case of 3D geometry called "axially extruded", that is to say geometries with a privileged axis so that its different transversal geometric sections are limited. These kinds of geometries cover the cases of most power reactors, and most experimental reactors.

An important aim of the internship is to provide a mathematical analysis at least of the most efficient proposed methods. Analytical results of the robustness and stability of methods have been done for previous methods and similar paths can be taken for the new approach. This project is therefore based on different tasks that require interaction on each part:

- Numerical and mathematical analysis of the various possible methods. The applicant must conduct preliminary bibliographical studies to identify approaches, already present in the literature, which may be adopted in TDT.
- Programming in TDT code of at least one of the solutions proposed on assemblies calculations. This multidisciplinary project (neutron, methods, programming) will use the code TDT in APOLLO3[®] and ask programming tasks and algorithms in C++ and (mostly) Fortran 90.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

1. S. Santandrea, R. Sanchez, P. Mosca: "A Linear Surface Characteristics Approximation for Neutron Transport in Unstructured Meshes" Nuclear Science and Engineering / Volume 160 / Number 1 / September 2008 / Pages 23-40 Technical Paper / dx.doi.org/10.13182/NSE07-69.
2. S. Santandrea, J.C. Jaboulay, P. Bellier, F. Fevotte, H. Golfier: "Improvements and validation of the linear surface characteristics scheme", Annals of Nuclear of Nuclear Energy, Vol. 36 Issue 2, Pages 46-59, January 2009.
3. R. Sanchez, S. Santandrea: "Convergence Analysis for the Method of Characteristics in Unstructured Meshes" Nuclear Science and Engineering / Volume 183 / Number 2 / June 2016 / Pages 196-213.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui/Yes (on a connected subject).

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur : connaissances en physique des réacteurs et en informatique scientifique
Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school. Knowledge of reactor physics and scientific computing.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : SANTANDREA

Prénom : Simone

Téléphone : 01 69 08 81 78

e-mail : simone.santandrea@cea.fr

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° D7 – Laboratoire/Laboratory : LLPR

Titre du stage

RECONSTRUCTION DES NAPPES DE PUISSANCE D'UN RÉACTEUR NUCLÉAIRE À PARTIR DE MESURES PAR UNE MÉTHODE D'INTERPOLATION EMPIRIQUE GÉNÉRALISÉE

Type de sujet / Topic type

- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

Contexte du stage

Afin de piloter au mieux un réacteur nucléaire, il convient de disposer de nombreux dispositifs de mesures permettant de remonter au niveau de puissance global. D'autre part, la modélisation du réacteur permet d'obtenir la *nappe de puissance* à partir de résultats de simulation numérique. Cette quantité physique est importante car elle permet de connaître la position des points chauds. On souhaite corriger les résultats de simulation à partir des observables mesurées.

Étant donné qu'il est impossible d'instrumenter chaque assemblage combustible, il convient de reconstruire les nappes de puissance à partir des mesures dans le cœur du réacteur (*in-core*). La méthode de reconstruction étudiée sera fondée sur la méthode d'interpolation empirique généralisée [1] reliant les données ponctuelles (mesures) à un modèle de la nappe de puissance 3D.

Description du sujet du stage

Le but de ce stage est multiple. Il conviendra, à partir d'une bibliographie de déterminer l'état de l'art puis, en se basant sur des simulations d'un petit cœur expérimental réalisées par le stagiaire avec les codes déterministes et stochastiques du CEA de calculer les nappes numériques de puissance. Ces simulations numériques permettront de générer les bases d'apprentissage. Ces bases seront ensuite exploitées afin d'inférer par apprentissage statistique le modèle inverse de la nappe de puissance. On se limitera à une estimation paramétrique d'un modèle de la nappe de puissance constitué d'une composante radiale et d'une composante azimutale.

Cette méthodologie par définition indépendante du code de calcul pourra être implémentée dans un schéma de calcul d'un cœur expérimental.

Le stagiaire devra mettre en œuvre :

- des calculs avec les codes de neutronique du CEA, APOLLO2 et CRONOS2 pour les calculs déterministes et TRIPOLI-4® pour les calculs stochastiques (calculs qui seront réalisés avec l'appui des équipes du SERMA),
- l'implémentation d'une approche basée sur l'interpolation empirique généralisée.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

[1] J.-P. Argaud, B. Bouriquet, F. de Caso, H. Gong, Y. Maday, et O. Mula, "Sensor placement in nuclear reactors based on the generalized empirical interpolation method," *Journal of Computational Physics*, vol. 363, pp. 354–370, 2018.

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Non/No

Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en mathématiques appliquées et/ou physique des réacteurs.

Durée du stage / Internship duration

6 mois

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : MADIOT

Prénom : François

e-mail : francois.madiot@cea.fr

Téléphone : 01.69.08.92.70

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR

Nom : COLLIN

Prénom : Antoine

e-mail : antoine.collin@cea.fr

Téléphone : 01.69.08.39.26

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Titre du stage

PRODUCTION D'UNE BIBLIOTHÈQUE DE SECTIONS EFFICACES MULTIPARAMÉTRÉES DE HAUTE-FIDÉLITÉ POUR LE BENCHMARK BEAVRS

Internship title

HIGH-FIDELITY MULTIPARAMETRIC CROSS-SECTION LIBRARY FOR THE BEAVRS BENCHMARK

Type de sujet / Topic type

- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

Contexte du stage

La simulation d'un réacteur nucléaire est effectuée usuellement par une procédure en deux étapes. La première étape de ce schéma consiste en une modélisation détaillée de l'évolution isotopique de l'assemblage à l'aide de l'approximation en *milieu infini* 2D, qui représente une juxtaposition à l'infini du même motif ou assemblage. Cette première étape permet de caractériser les propriétés physiques du combustible et / ou des matériaux de structure. Ces données sont collectées dans une bibliothèque de sections efficaces de quelques groupes (appelée "*bibliothèque de sections efficaces multi-paramétrées*") pour quelques isotopes importants caractérisant le comportement du combustible. Cette information est ensuite utilisée par les *codes de cœur* pour la simulation du réacteur en *théorie de la diffusion* (ou *transport simplifié*).

Malgré son efficacité, cette procédure en deux étapes présente une limite de précision importante en présence de fortes hétérogénéités. De plus, les approximations de diffusion et/ou de transport simplifié, typiques des simulations du cœur, fonctionnent mal le long de l'interface entre le cœur et le réflecteur, surtout en présence de métal lourd.

Internship context

A typical reactor simulation is performed by a two-step procedure. The first step of this scheme consists in a detailed modelling of the assembly depletion using the 2D infinite-lattice approximation. This first step allows for the characterization of the physical properties of the fuel and/or of the structural material. Those data are collected in a few-group cross-section library (called *multi-parametrized cross section library*) for a few important isotopes characterizing the operational behavior of the fuel. This information is then used by the core codes for the simulation of the full reactor.

Despite of its effectiveness, this two-step procedure exhibits substantial accuracy limit in presence of strong heterogeneities. Moreover, the diffusion and/or simplified transport approximations, which are typical in core simulations, perform poorly along the interface between the core and the heavy metal reflector.

Description du sujet du stage

Les progrès du calcul parallèle ont rendu possible la mise au point d'outils de haute-fidélité pour la conception et l'analyse des cœurs de réacteurs nucléaires. De tels outils nécessitent une vérification et une validation approfondies. L'objectif du stage est la production d'une bibliothèque de sections efficaces multi-paramétrées à haute-fidélité pour un ensemble d'assemblages PWR typiques du benchmark BEAVRS [1] (référence pour l'évaluation et la validation de simulations de réacteurs) à l'aide du code APOLLO3® [2]. L'appauvrissement isotopique des assemblages sera simulé selon une approximation "réseau infini" pour plusieurs paramètres de point d'état, tels que la densité de l'eau, les températures du combustible et du modérateur, la concentration en bore. La nouveauté sera le stockage de sections efficaces microscopiques de référence effectives dans un format de bibliothèque externe lisible par le code APOLLO3®. Les bibliothèques de référence produites, avec des coupes transversales microscopiques de haute qualité, seront étiquetées

par le point d'état et réutilisées par le code APOLLO3[®] dans des simulations complètes. En outre, un outil d'interpolation sera également développé pour fournir les sections efficaces effectives au point d'état réel de la simulation centrale. Il en résulte une mise à niveau du calcul en deux étapes qui pourrait permettre une réduction considérable du temps de calcul dans les simulations multiphysiques tout en optimisant la précision des calculs.

Le stage comporte les trois principales étapes suivantes :

- La modélisation 2D des assemblages PWR à l'aide du code APOLLO3[®] en utilisant les spécifications du benchmark BEAVRS.
- Le développement d'une fonction de la commande de sortie de APOLLO3[®] pour écrire et stocker la section efficace microscopique interne auto-protégées efficace à chaque pas d'évolution dans un fichier de sortie en classifiant les sections efficaces à l'aide des paramètres de calculs, c'est-à-dire la température du combustible, la température du modérateur, la densité du modérateur et la concentration de bore.
- Le développement, la vérification et la validation de l'outil d'interpolation basé sur l'utilisation des fonctions splines pour calculer la section efficace microscopique à un point d'état donné.

Internship topic description

Advances in parallel computing have made possible the development of high-fidelity tools for the design and analysis of nuclear reactor cores, and such tools require extensive verification and validation. The goal of the internship is the production of high-fidelity multi-parametric cross-section library for a set of typical PWR assemblies of the BEAVRS benchmark (*Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations*) by using the APOLLO3[®] code. The isotopic depletion of the assemblies will be simulated in an infinite-lattice approximation for several state-point parameters, such as the water density, the fuel and moderator temperatures, the boron concentration. The novelty will be the storage of reference effective microscopic cross sections in an external library format readable by the APOLLO3[®] code. The produced reference libraries, with high-quality microscopic cross sections, will be tagged by the states point and re-used by the APOLLO3[®] code in full-core simulations. Furthermore, an interpolation tool will also be developed to provide the effective cross sections at the actual state point to the core simulation. This results in an up-grade of the two-step calculation that could provide a huge reduction of the computational time in multiphysics simulations while optimizing the accuracy of the calculations.

The internship includes three main steps:

- The modelling of 2D depleted assemblies of the typical PWR BEAVRS configurations using the APOLLO3[®] code.
- The development of an upgrade function for the output command of APOLLO3 to write and store the internal effective self-shielded microscopic cross section at each depletion step in an output file tagging the cross sections by the calculation parameters.
- The development, verification and validation of the interpolation scheme based on spline functions for computing the effective microscopic cross sections in any state point.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] "Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations", RELEASE rev. 2.0.2, MIT Computational Reactor Physics Group, April 11 2018,
http://crpg.mit.edu/sites/default/files/css_injector_images_image/BEAVRS_2.0.2_spec.pdf
- [2] "APOLLO3[®] : CEA/DEN Deterministic Multi-purpose Code for Reactor Physics Analysis",
https://www.researchgate.net/publication/316684557_APOLLO3_R_CEAEN_DETERMINISTIC_MULTI-

PURPOSE CODE FOR REACTOR PHYSICS ANALYSIS

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui/Yes

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs, en informatique scientifique et mathématiques appliquées.

Applicant profile

Master 2nd ou 3rd year, engineering school – Reactors physics, scientific programming, C++ and FORTRAN languages, good attitude for applied mathematics.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : MASIELLO
Prénom : Emiliano
e-mail : emiliano.masiello@cea.fr
Téléphone : 01.69.08.86.09
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° D9 – Laboratoire/Laboratory : LTSD

Titre du stage

ÉTUDE DU COUPLAGE NEUTRONIQUE– THERMOHYDRAULIQUE POUR UN CRAYON COMBUSTIBLE DE RÉACTEUR À EAU SOUS PRESSION EN UTILISANT LE SOLVEUR DE TRANSPORT S_N IDT ET LE CODE DE THERMOHYDRAULIQUE THEDI

Internship title

STUDY OF NEUTRONIC THERMO-HYDRAULIC COUPLING FOR A PWR FUEL PIN CELL BY USING THE S_N TRANSPORT SOLVER IDT AND THE THERMOHYDRAULIC SOLVER THEDI

Type de sujet / Topic type

- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

Contexte du stage

Le fonctionnement d'un réacteur nucléaire est régi par des phénomènes non-linéaires complexes. La simulation de ces phénomènes comporte le couplage des plusieurs physiques, notamment entre la neutronique (N) et thermohydraulique (TH). Ces dernières jouent un rôle central pour simuler l'effet des contre-réactions neutroniques au réchauffement/refroidissement du combustible et/ou du modérateur suite à l'énergie thermique générée par la fission nucléaire.

Jusqu'à présent le couplage neutronique-thermohydraulique a été étudié au SERMA en utilisant une représentation simplifiée des assemblages en diffusion ou en théorie du transport simplifié à peu de groupes énergétiques, avec une géométrie non détaillée. Dans ces configurations, les crayons combustibles sont généralement homogénéisés avec leur gaine et avec la partie du modérateur qui les entoure.

Internship context

The operation of a nuclear reactor is governed by complex non-linear phenomena. The simulation of these phenomena involves the coupling of several physics, in particular between neutronics (N) and thermohydraulic (TH). The latter plays a central role in simulating the effect of the neutron feedback on the heating/cooling of the fuel and/or of the moderator following the thermal energy generated by nuclear fission.

Until now, neutron-thermohydraulic coupling has been studied in our service, SERMA, using a simplified and non-detailed representation of the geometry of the fuel assemblies in diffusion or in simplified transport theory using few energy groups. In these configurations, the fuel rods are generally homogenized with their clad and with the surrounding moderator.

Description du sujet du stage

Dans ce stage nous proposons le couplage neutronique-thermohydraulique avec une description détaillée du crayon en utilisant le solveur de transport aux ordonnées discrètes IDT du code APOLLO3[®]. La partie thermohydraulique sera traitée par le code THEDI développé au SERMA.

Dans le cadre du stage, on se limitera à l'étude d'un seul crayon combustible d'un réacteur à eau sous pression qui permettra d'étudier et de calibrer plusieurs configurations du maillage thermohydraulique. Pour simuler la présence du cœur autour du crayon (qui génère un gradient de la population neutronique traversant le crayon) on s'affranchira de l'hypothèse du milieu infini sera remplacée par un modèle avec albédo. Plus précisément, le k-effectif sera utilisé comme paramètre tandis que le coefficient d'albédo sera calculé de manière itérative en tant que valeur propre afin d'ajuster la

fraction de neutrons sortants qui rentrent dans la cellule pin.

Le stage se concentrera particulièrement sur l'étude des schémas itératifs entre le transport et le modèle simplifié TH. En particulier, les méthodes itératives non-linéaires envisagées seront le *schéma de relaxation de Anderson*, le schéma connu sur le nom de *Jacobian-Free Newton Krylov* (JNFK), et *l'algorithme de Brent*. De plus, une étude sur la stabilité du schéma sera proposée avec un modèle de transport simplifié 1D.

Le stage comporte 4 étapes:

- Étude bibliographique des couplages N/TH, et prise en charge du code APOLLO3[®], en particulier, en utilisant le code de neutronique IDT et thermohydraulique THEDI.
- Couplage entre les deux codes.
- Mise en place des schémas itératifs N/TH et leur comportement en termes de stabilité-sensibilité aux maillages spatiaux et de rapidité de résolution.
- Étude sur la convergence des schémas utilisant un modèle de transport simplifié.

Internship topic description

In this internship, we propose the neutron-thermohydraulic coupling with a detailed description of the fuel pin using the transport solver IDT of the APOLLO3[®] code. The thermohydraulic part will be solved by the the THEDI code developed at SERMA.

As part of the internship, we will limit ourselves to the study of a single fuel rod of a pressurized water reactor that will allow to verify and to calibrate several configurations of the neutronics and thermohydraulic meshes. The presence of the nuclear reactor core around the fuel pin cell generates a gradient of the neutron population crossing the pin cell. To simulate such an effect, the infinite medium approximation will be replaced by the albedo model. More precisely, the k-effective will be used as parameter while the albedo coefficient will be computed iteratively as an eigenvalue to regulate the fraction of outgoing neutrons that re-enters into the pin cell.

The internship will focus particularly on the study of iterative schemes between transport and the simplified TH model. In particular, the non-linear iterative methods considered during the internship will be the *Anderson relaxation scheme*, the *Jacobian-Free Newton Krylov method*, and the *Brent algorithm*. In addition, a study on the stability of the scheme will be proposed with a simplified 1D transport model.

The internship includes 4 steps:

- Bibliographic study of N/TH couplings and the APOLLO3[®] code environment, in particular, using IDT and thermohydraulic code THEDI.
- Coupling between the two codes.
- Implementation of the iterative N/TH schemes and their behavior in terms of stability-sensitivity to spatial meshes and speed of resolution.
- Study on the convergence of schemas using a simplified transport model.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- S. Palmtag et al., "Coupled Neutronics and Thermo-Hydraulic Solution of a Full Core PWR Using VERA-CS", PHYSOR 2014, Kyoto, Japan, September 28 – October 3, 2014
- M.N. Avramova. "CTF: A thermal Hydraulic Sub-Channel Code, User's Manual", PSU, Feb 2009.
- R. Salko, *et al.*, "Initial COBRA-TF Parallelization", CASL-I-2013-0180-000, August 2013

- “APOLLO3[®] : CEA/DEN Deterministic Multi-purpose Code for Reactor Physics Analysis,”
https://www.researchgate.net/publication/316684557_APOLLO3_R_CEAEN_DETERMINISTIC_MULTI-PURPOSE_CODE_FOR_REACTOR_PHYSICS_ANALYSIS

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse / Possible opening on a thesis proposal

Oui/Yes

Profil du stagiaire/ Applicant profile

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur – Connaissances en physique des réacteurs, informatique scientifique, mathématiques appliquées.

Applicant profile

Master 2nd ou 3rd year engineering school – Reactors physics, scientific programming, C++ and FORTRAN languages, Applied mathematics.

Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : MASIELLO
Prénom : Emiliano
e-mail : emiliano.masiello@cea.fr
Téléphone : 01.69.08.86.09
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Nom : LENAIN
Prénom : Roland
e-mail : roland.lenain@cea.fr
Téléphone : 01.69.08.24.45
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR

Titre du stage

MODÈLE D'APPRENTISSAGE MACHINE APPLIQUÉ À DES MODÈLES PHYSIQUES COMPLEXES.

Type de sujet / Topic type

- Développement de méthodes

Contexte du stage

Collaboration entre les équipes du CEA/SERMA (*Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées*), du CEA/SMTA (*Service Mesure et modélisation des Transferts et des Accidents graves*) et du Centre de Mathématiques et de Leurs Applications (CMLA) de l'ENS-Paris-Saclay.

Les outils de simulation numériques sont fréquemment utilisés pour l'étude de phénomènes physiques. Un calcul, basé sur un système d'équations complexes, peut nécessiter plusieurs heures de calcul pour obtenir une variable d'intérêt qui peut-être une valeur scalaire, un vecteur multi-varié ou une courbe. Dans ces conditions, des méthodes alternatives, comme par exemple des méthodes fondées sur des procédures d'apprentissage peuvent s'avérer particulièrement intéressantes.

Deux applicatifs serviront de support à la mise en place des méthodes d'apprentissage machine. Le premier cas portera sur les phénomènes physiques qui apparaissent lors de la mise en contact entre un liquide très chaud et un autre plus froid et volatil, comme, par exemple, lors d'accidents graves de réacteurs nucléaires à eau pressurisée pendant lesquels le magma fondu issu de la fusion du cœur du réacteur peut entrer en interaction avec de l'eau. Cette interaction peut donner lieu à des explosions, phénomènes totalement non linéaires, qui peuvent mettre en péril les barrières radiologiques de la centrale. L'amélioration de la sûreté des réacteurs nécessite la modélisation et la prise en compte de ces phénomènes. Le second cas portera sur la modélisation des sections efficaces. En neutronique, le calcul de la puissance dans le réacteur repose sur l'interpolation de sections efficaces tabulées par un calcul réalisé à une échelle plus réduite. La méthode historique d'interpolation multilinéaire utilisée pour reconstruire les sections efficaces est robuste, mais elle nécessite de mobiliser une taille mémoire très importante pour atteindre la précision visée.

Description du sujet du stage

Un plan d'expérience permettant de récupérer des données à partir d'un simulateur numérique sera mis en place afin de compléter la base de données existante pour le phénomène étudié.

Dans un premier temps, la variable d'intérêt étudiée sera un scalaire. Plusieurs méthodes d'apprentissage statistiques (Hastie et al. [2006]) seront mises en œuvre sur la base de données précédemment obtenue, comme par exemple les SVM, arbres de régression, réseaux de neurones, processus gaussiens (Rasmussen et Williams [2006]) et des méthodes d'ensemble : *bagging*, *random forest*, *boosting*, ...

Les capacités prédictives des différents modèles seront étudiées. On étudiera également l'intérêt d'utiliser, à partir des premiers modèles mis en œuvre, des méthodes d'agrégation ou de *stacking*. Pour une variable d'intérêt multi-variée, des modèles multi-tâches, seront étudiés et comparés à plusieurs instances des méthodes modélisant une seule variable. Pour une variable d'intérêt de type courbe, des méthodes de régression fonctionnelle pourront être mises en place.

Un point intéressant sera d'évaluer si les méthodes d'apprentissage mises en œuvre sont compatibles avec les contraintes physiques des modèles sous-jacents ayant fourni les données. On étudiera la possibilité d'intégrer des contraintes physiques dans la mise en place de certains modèles (Da Veiga et Marrel [2012]).

Bibliographie - Références

- Hastie, T., Tibshirani R. et Friedman J. (2006). *The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction*, Springer, Second edition.
- Rasmussen, C. E. et Williams, C. K.I. (2006). *Gaussian processes for machine learning*. The MIT Press, Cambridge.
- Da Veiga, S. et Marrel, A. (2012). "Gaussian process modeling with inequality constraints". *Annales de la Faculté des Sciences de Toulouse*, 21(3):529-555.
- A. Fischer, S. Has et M. Mougeot (2019). "Consensual aggregation of clusters based on Bregman divergences to improve predictive models", à paraître, <https://pydio.ensiie.fr/public/64a8b5>

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse

Oui

Profil du stagiaire

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur : connaissances en mathématiques appliquées et en informatique scientifique.

Localisation du stage

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Des visites et/ou séjour sur le centre de Cadarache sont prévues.

Personne(s) contact(s)

Nom : AMMAR

Prénom : Karim

e-mail : karim.ammar@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 00 26

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Sujets de thèses

PhD topics

T1 à T7 / T1 to T7

1. Titre de la thèse / PhD topic title

ÉTUDE D'UN SCHÉMA NUMÉRIQUE POUR RÉSOUDRE L'ÉQUATION DE TRANSPORT NEUTRONIQUE BASÉ SUR LA MÉTHODE P_N ET LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS DISCONTINUS AVEC DES MAILLAGES 3D NON STRUCTURÉS ET CURVILIGNES.

2. Contexte de la thèse / PhD context

Les méthodes déterministes permettant de résoudre l'équation de transport neutronique se distinguent en deux parties :

- La première traite finement de l'équation de Boltzmann, tant en espace qu'en énergie, sur une petite zone du cœur du réacteur (un assemblage, un motif de quelques assemblages...). Cette étape permet de disposer des sections efficaces homogénéisées en espace et condensées en énergie.
- La seconde consiste à résoudre l'équation de Boltzmann sur le cœur complet du réacteur en 3D, en retenant des maillages spatiaux et énergétiques moins détaillés que dans la première étape.

Les solveurs de transport neutronique disponibles dans le code APOLLO3® [5] sont dédiés à l'une ou l'autre de ces étapes. La première étape des calculs est appelée « calcul spectral » ou « calcul de réseau », alors que la seconde est dite « calcul de cœur ». Les solveurs principaux du code APOLLO3® sont TDT et MINARET : le premier est spécialisé pour les calculs réseau et le second trait des calculs de cœur.

Les deux solveurs TDT et MINARET permettent de résoudre l'équation de Boltzmann en faisant appel à des techniques différentes liées aux problèmes à résoudre. Ces solveurs sont basés sur la méthode dite des ordonnées discrètes (méthode SN) pour le traitement de la variable angulaire. Le schéma numérique objet de la thèse est en revanche basé sur la méthode des harmoniques sphériques dite aussi méthode P_N .

La méthode à étudier dans la présente thèse vise à disposer d'un solveur numérique offrant la possibilité de traiter du calcul de réseau et du calcul de cœur à la fois.

3. Description du sujet / Topic description

Un schéma numérique résolvant l'équation du transport neutronique, proposé dans [1] pour les géométries 2D, est déjà implémenté en C++ dans le solveur NYMO du code APOLLO3®. L'objet de la thèse est d'étendre la méthode aux géométries 3D.

NYMO intègre deux solveurs NYMO-CG et NYMO-DG. Ces deux solveurs sont fondés sur la même formulation variationnelle et les deux utilisent l'approximation P_N pour la variable angulaire mais ils se distinguent sur l'approximation spatiale. NYMO-CG utilise la *méthode des éléments finis continue* et NYMO-DG utilise la *méthode des éléments finis discontinue*. La version CG de NYMO traite des géométries 1D, 2D et 3D mais elle est limitée à des maillages structurés et conformes.

La présente thèse concernera uniquement la version NYMO-DG. La méthode utilisée dans le solveur NYMO-DG pour les géométries 2D est détaillée dans [1]. La généralisation aux géométries 3D, objet de la thèse, est esquissée dans [1]. La différence entre les géométries 2D et 3D réside principalement dans le calcul des coefficients des matrices élémentaires. Le travail demandé dans le cadre de la thèse consiste à détailler les calculs des coefficients des matrices à l'instar de ce qui est fait pour les géométries 2D ainsi que l'implémentation dans le solveur NYMO-DG du code APOLLO3®.

La nouveauté du travail réside du fait que d'une part on utilise une formulation variationnelle présentée dans [2], et à notre connaissance cette dernière n'a pas été explorée ni en P_N ni en S_N . D'autre part, on traite des maillages non structurés et non conformes. De tels maillages sont traités essentiellement par la méthode des caractéristiques (MOC). Et finalement,

on utilise une technique d'intégration de polynômes sur des régions complexes en s'appuyant sur le théorème de divergence. Le point fort de la méthode réside dans le fait que nous pouvons calculer exactement les intégrales définissant les coefficients des matrices élémentaires résultant de l'approximation adoptée, et ceci pour des régions de formes arbitraires. De plus, les matrices impliquées dans l'approximation ne dépendent que de la géométrie et non pas des sections efficaces, et donc pas des groupes d'énergie, cela rend la méthode peu gourmande en terme de stockage en mémoire.

4. Programme de travail envisagé / Envisaged work agenda

Le travail de l'étudiant sera découpé en quatre grandes étapes :

- La première étape servira pour la prise en main théorique et informatique du travail déjà réalisé pour les géométries 2D.
- La deuxième étape sera consacrée à la réduction d'un document généralisant la méthode pour les géométries 3D en détaillant le calcul des coefficients des matrices élémentaires résultant des approximations adoptées. En suite l'implémentation en C++ dans le solveur NYMO-DG du code APOLLO3®.
- La troisième étape a pour objet l'implémentation d'une technique d'accélération dite P_N/P_N proposée dans [1].
- La dernière étape consiste à valider la méthode sur des cas tests appropriés en mettant au clair les points forts et les points faibles de la méthode.

5. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] L. Bourhrara. A new numerical method for solving the Boltzmann transport equation using the $\{ \backslash pn \}$ method and the discontinuous finite elements on unstructured and curved meshes. *Journal of Computational Physics*, Volume 397, (2019).
- [2] L. Bourhrara. New variational formulations for the neutron transport equation. *Trans. Theory Statist. Phys.*, 33:93-124, (2004).
- [3] L. Bourhrara. H1 Approximations of the neutron transport equation and associated diffusion equations. *Trans. Theory Statist. Phys.*, 35:89-108, (2006).
- [4] L. Bourhrara. WN Approximations of neutron transport equation. *Trans. Theory Statist. Phys.*, 38:195-227, (2009).
- [5] D. Schneider, F. Dolci, F. Gabriel, J.-M Palau, et al. Apollo3: CEA/DEN deterministic multipurpose platform for core physics analysis. In Proc. of Int. Mtg. on the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems, *PHYSOR 2016*, Sun Valley, USA, (2016).
- [6] Andrew Scott Bielen. Spherical harmonics solutions to second order forms of the Boltzmann transport equation using particle transport code SCEPTRE. *Thesis Master of Science*, Pennsylvania State University. Department of Mechanical and Nuclear Engineering, (2008).
- [7] C.B. Carrico, E.E. Lewis and G. Palmiotti. Three dimensional variational nodal transport methods for cartesian, triangular, and hexagonal criticality calculations. *Nucl. Sci. Eng.*, 111, 168, (1992).
- [8] C.R.E. De Oliveira. An arbitrary geometry finite element method for multigroup neutron transport with anisotropic scattering. *Progress in Nuclear Energy*, 28(1/2): 227-236, (1986).
- [9] D.A. Di Pietro, A. Ern. Mathematical aspects of discontinuous Galerkin methods. Springer, (2012).
- [10] V.M. Laboure, R.G. McClarren and C.D. Hauck. Implicit filtered PN for high-energy density thermal radiation transport using discontinuous Galerkin finite elements. *Journal of Computational Physics*, 321, pp.624-643, (2016).
- [11] G. Palmiotti, E.E. Lewis. and C.B. Carrico. VARIANT: Variational anisotropic nodal transport for multidimensional cartesian and hexagonal geometry calculations. *Technical Report ANL-95/40*, Argonne National Laboratory, (1995).

6. Profil du doctorant / Applicant profile

Il est recommandé pour le candidat d'avoir une prédilection pour le développement de méthodes numériques. Une certaine maîtrise de la programmation est également souhaitable.

7. Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

8. Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : BOURHRARA

Prénom : Lahbib

e-mail : lahbib.bourhrara@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 59 87

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

1. Titre de la thèse / PhD topic title

SCHÉMA AUX CARACTÉRISTIQUES DE SURFACE POUR L'ÉQUATION DU TRANSPORT DES NEUTRONS DANS DES GÉOMETRIES 3D EXTRUDÉES ET NON CONFORMES.

SURFACE SCHEMES WITH THE METHOD OF CHARACTERISTICS FOR THE NEUTRON TRANSPORT EQUATION IN NON-CONFORMAL EXTRUDED 3D GEOMETRIES.

2. Contexte de la thèse / PhD context

The subject takes place in the frame of elaboration of advanced calculation methodologies for reactor physics. More specifically, the work concerns the development of a three-dimensional (3D) method for the neutron transport with volume approximation of the higher-order order flow, the latter being the standard approach for industrial calculations. The goal is to make available for a simulation method that does not require the construction of a spatial grid too thin, so as to reduce the memory space and the computational cost.

3. Description du sujet / Topic description

This doctorate is on the line of research carried out in recent years to DM2S / SERMA concerning new solving techniques of the neutron transport equation in unstructured geometries within the *Three Dimensional Transport* (TDT) solver of the APOLLO3® code by using the *Method Of Characteristics* (MOC). Roughly speaking, this method uses the chords intersected over the computational geometry for a set of angle belonging to a numerical quadrature formula discretizing the unit sphere. This set of chords is generally called "tracking". The MOC propagates the neutrons through these numerical trajectories and uses this method to estimate numerically the angular average fluxes. The numerical procedure using the tracking sweeping strategy is based on the physical background of the so-called "free" iterations where neutrons of different generations are cumulated until a satisfying approximation of the full-converged neutron population is reached.

Recent works for the 2D MOC solver have shown the interest of using higher order spatial approximations, in particular with the improvement of a numerical technique called "Linear Surface" (LS) [1,2,3] characteristics scheme. In this technique the volume values (neutron flux or collision of sources) are reconstructed from an interpolation made from surface values. Currently the calculated surface values have a constant representation in surfaces and a linear representation in volume. The surface numerical values are rescaled to preserve the region conservative averages. At the same time but independently from the LS, we have developed a 3D MOC numerical scheme for extruded geometries. In this last development, we have used the simple and robust *Step Characteristics* (SC) approximation in the radial plane. For the 3D MOC numerical scheme, the main difficulties arise from the fact that the numerical "tracking" takes very big dimensions. To reduce the impact of this problem we have conceived and implemented an algorithm of data compression and online reconstruction that attains important gains in memory reduction without being time consuming. Another crucial point is to provide an acceleration scheme to the "free" iterations that can be excessively slow in practical reactor physics calculations. In this respect, many progresses have recently been accomplished [4], that have permitted to effectively accelerate 3D MOC with a synthetic low-order operator.

4. Programme de travail envisagé / Envisaged work agenda

In a first part of the PhD, we propose the candidate to transpose the LS numerical scheme to the 3D geometries. The main difficulties will be to generalize the reduction-reconstruction tracking algorithm to include some supplementary geometrical data necessary for the new scheme. It will be necessary then to conceive a numerical form of the neutron transmission equation coherent with the new hypotheses, and able to preserve all the numerical optimizations implemented in the actual version of TDT for the previous numerical scheme.

In a second part of the PhD we will address the subject of generalizing the acceleration synthetic operator to include the hypotheses of the 3D LS. The feasibility and the cost of the synthetic approach has much to do with the possibility of using a “classification” approach that avoids to “sweep” the full tracking to compute the transmission and escape coefficients that define a current-interface method like the DP_N one [4].

The candidate of this doctorate will first become familiar with the subject and then see how to reproduce these techniques in the new framework of the 3D surface methods. Note that the acceleration is the most difficult subject for the characteristics method, and that without effective acceleration no method can achieve the status of an efficient industrial tool. It will be very important to take into account the optimization techniques of the resolution of the synthetic problem and to ensure that previous algorithms (or new ones) also work for the new 3D method.

An important aim of the doctorate is to provide a mathematical analysis at least of the most efficient proposed methods. Analytical results of the robustness and stability of methods have been produced for previous methods and similar paths can be taken for the new approach.

This project is therefore based on different tasks that require interaction on each part:

- Numerical and mathematical analysis of the various possible methods. The applicant must conduct preliminary bibliographical studies to identify approaches, already present in the literature, which may be adopted in TDT solver.
- Programming in TDT code of at least one of the solutions proposed on assembly or cluster calculations.
- This multidisciplinary project (neutron, methods, programming) will use the code TDT in APOLLO3® and ask programming tasks and algorithms in C++ and (mostly) Fortran 90.

5. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] S. Santandrea, R. Sanchez, P. Mosca: “A Linear Surface Characteristics Approximation for Neutron Transport in Unstructured Meshes”, *Nuclear Science and Engineering*, Volume 160, Number 1, September 2008, Pages 23-40 Technical Paper.
- [2] S. Santandrea, J.C. Jaboulay, P. Bellier, F. Fevotte, H. Golfier: “Improvements and validation of the linear surface characteristics scheme”, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 36 Issue 2, Pages 46-59, January 2009.
- [3] R. Sanchez, S. Santandrea: “Convergence Analysis for the Method of Characteristics in Unstructured Meshes”, *Nuclear Science and Engineering*, Volume 183, Number 2, June 2016, Pages 196-213.
- [4] Simone Santandrea, Laurent Graziano & Daniele Sciannandrone: “Accelerated polynomial axial expansions for full 3D neutron transport MOC in the APOLLO3 code system as applied to the ASTRID fast breeder reactor”, *Annals of Nuclear Energy* 113 (2018) 194–236.

6. Profil du doctorant / Applicant profile

The candidate is supposed to have a predilection for the numerical methods development. Rudimental knowledge of reactor physics and especially of the numerical methods developed in this domain are suitable. Some mastery of programming language would also help the candidate.

7. Localisation de la thèse / PhD location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 GIF-SUR-YVETTE Cedex

8. Personnes contacts / Contact persons

Nom : SANTANDREA

Prénom : Simone

e-mail : simone.santandrea@cea.fr

Téléphone : +33(0)1 69 08 81 78

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

1. Titre de la thèse / PhD topic title

CONTRIBUTION NEUTRONIQUE A LA MODÉLISATION MULTIPHYSIQUE COUPLÉE DES TRANSITOIRES DE PUISSANCE ET À LA DÉMARCHE INNOVANTE DE VALIDATION ASSOCIÉE - APPLICATION AU RÉACTEUR CABRI.

2. Contexte de la thèse / PhD context

Le réacteur CABRI est un réacteur de recherches situé sur le centre d'études du CEA Cadarache, et dédié à l'étude des accidents de réactivité (RIA) dans les *Réacteurs à Eau sous Pression* (REP) [1]. Le réacteur CABRI permet, grâce à la dépressurisation de barres préalablement remplies d'un gaz neutrophage (^3He), de réaliser des pulses de puissance représentatifs de ceux qui pourraient survenir lors d'un accident de réactivité dans un REP. Au centre du cœur composé de 1487 crayons UO_2 , une cellule d'essai accueille un tronçon de crayon irradié pour le tester en conditions de RIA dans les conditions thermohydrauliques d'un REP (155 bars, 300 °C). Le CEA est chargé de la préparation, de la réalisation et de la sûreté des essais CABRI en lien avec l'IRSN, pilote du programme CIP (*CABRI International Program*), sous l'égide de l'OCDE. Le programme expérimental en cours aujourd'hui a pour objectif d'étudier les phénomènes survenant après les premières centaines de millisecondes (assèchement et éclatement des gaines), ainsi que les conséquences sur les structures du réacteur en termes d'onde de pression d'une éventuelle dispersion de combustible dans le réfrigérant. Ces phénomènes sont corrélés au taux de combustion du tronçon de combustible étudié et aux caractéristiques du transitoire (en particulier la quantité d'énergie déposée dans le tronçon).

Le développement de modélisations multiphysiques pour simuler les transitoires réalisés dans le cœur du réacteur CABRI est nécessaire pour la maîtrise et l'optimisation des essais, et plus largement pour le développement d'une approche générale de validation des outils multiphysiques pour la conception, l'exploitation et la sûreté des réacteurs. Cette approche de validation existe dans le cas où chaque physique est considérée séparément, avec des degrés de maturité différents en fonction du domaine, mais reste à construire dans un cadre multiphysique [10].

La mise au point de modélisations multiphysiques doit être progressive au niveau de la complexité et du couplage physique (neutronique / thermohydraulique cœur et système / thermomécanique) pour la simulation des transitoires de CABRI. Ceci fait l'objet d'efforts importants depuis quelques années. Des outils de simulation simplifiés ont été développés (SPARTE [2] et CATHARE2/PALANTIR [3]) ; ils ont permis de bien identifier la phénoménologie des transitoires. Ces outils ont cependant des limites liées aux hypothèses des modèles employés : cinétique ponctuelle pour la neutronique, introduction de modèles simples pour prendre en compte la dépendance du coefficient de contre-réaction Doppler moyen sur le cœur à la température du combustible, modèle 1D multicanal en thermohydraulique, etc. Les effets 3D neutroniques et thermohydrauliques qui ne sont donc pas pris en compte aujourd'hui lors de la modélisation des transitoires CABRI le pourront grâce à l'utilisation de manière couplée de codes de référence en neutronique (APOLLO3® [4]) et en thermohydraulique (FLICA4 [5] et CATHARE3 [6], qui incluent des modèles de thermomécaniques simplifiés). Ces codes sont développés par le CEA, et peuvent être couplés dans la plateforme de couplage CORPUS [7] sous SALOME [8].

3. Description du sujet / Topic description

L'objectif de la thèse est de contribuer au développement et à la validation de cette modélisation multiphysique couplée, en faisant un focus sur la neutronique.

Il sera nécessaire au cours de la thèse de développer un nouveau schéma de calcul neutronique 3D cinétique du cœur CABRI, avec prise en compte de contre-réactions (a minima la contre-réaction Doppler, qui est la contre-réaction majoritaire intervenant dans CABRI), avec le code de nouvelle génération multifilière APOLLO3®. Le travail de thèse pourra s'appuyer sur le PIRT (Phenomena Identification and Ranking Table) qui a été développé [9] pour identifier les phénomènes prépondérants intervenant dans les pulses de puissance du réacteur CABRI ; ce PIRT servira à orienter les choix de modèles.

En amont du développement du schéma, on essaiera de définir les incertitudes cibles sur les paramètres d'intérêt (notamment dépôt d'énergie dans le tronçon d'essais) à atteindre par le nouveau schéma.

Le schéma neutronique comportera 2 étapes : une première étape qui permettra, à partir des calculs sur des motifs géométriques restreints (assemblages, traverses 1D, etc.) en stationnaire à 2D d'obtenir des bibliothèques de données nucléaires autoprotégées, condensées en espace et en énergie. La deuxième étape consistera à faire le calcul 3D en dynamique du cœur au cours du transitoire, en utilisant les données nucléaires tabulées (en fonction de la température combustible, de la densité d' ^3He , etc.) et calculées à l'étape précédente. Les contre-réactions seront calculées en utilisant les modèles simplifiés de thermique dans le code APOLLO3[®]. Il faudra veiller à ce que le schéma de calcul ainsi défini nécessite des ressources et temps de calcul raisonnables, compatibles avec une possibilité de couplage multiphysique.

Le développement de ce schéma neutronique devra être associé en parallèle à la mise en place d'une démarche de validation innovante qui s'intégrera dans le processus de validation globale de la modélisation multiphysique couplée du cœur CABRI. Rappelons que la validation globale doit pouvoir s'appuyer sur la validation des modélisations « stand-alone », c'est-à-dire la validation du modèle neutronique seul, la validation des modèles thermohydrauliques seuls puis la validation du couplage des modèles.

Les schémas neutroniques développés par le CEA sont validés traditionnellement en régime permanent (en configuration stationnaire ou lors de l'évolution du combustible), et cela sera la première fois qu'il faudra valider un schéma neutronique en dynamique. L'étape de validation se décompose en deux phases :

- Une première phase dite de validation numérique, pendant laquelle on compare les résultats du nouveau schéma développé à des résultats issus de calculs de référence. Dans le cadre de la thèse, on pourra notamment utiliser les nouvelles fonctionnalités de calcul de cinétique développées dans le code stochastique TRIPOLI4[®].
- Une deuxième phase, dite de validation expérimentale, pendant laquelle on compare les résultats du nouveau schéma développé à des résultats expérimentaux du réacteur CABRI. Le nombre de paramètres mesurés pendant les transitoires est restreint (cela concerne essentiellement la puissance du cœur, la température moyenne de l'eau en entrée et en sortie, le débit à l'entrée du cœur et la pression de ^3He au cours du transitoire) ; le doctorant pourra être amené à exprimer des besoins mesurables et proposer des ébauches de scénarios d'essais instrumentés, en lien avec l'équipe d'expérimentation sur le réacteur CABRI, en vue de proposer des éléments complémentaires de validation.

On pourra ensuite s'intéresser dans la thèse à une première quantification des incertitudes dues aux données nucléaires et aux incertitudes technologiques du réacteur CABRI sur les paramètres calculés pour le nouveau schéma de calcul neutronique.

Le schéma APOLLO3[®] sera ensuite intégré dans la plateforme de couplage CORPUS en vue du couplage avec les codes de thermohydraulique à terme.

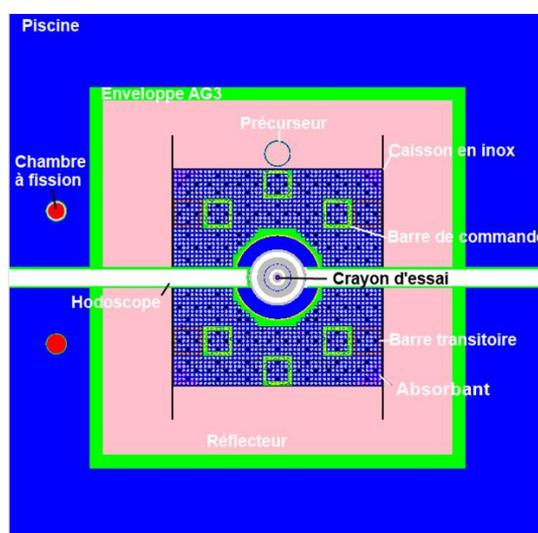
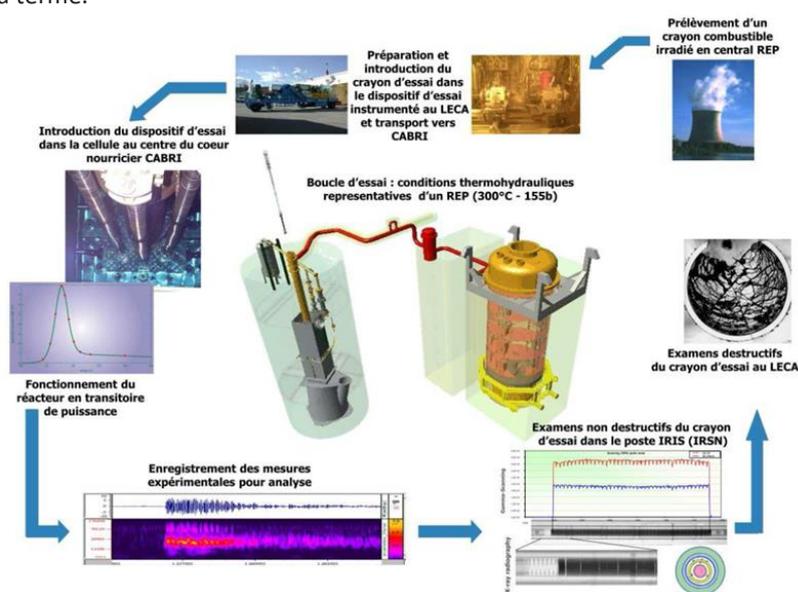
4. Programme de travail envisagé / Envisaged work planning

Le doctorant sera intégré dans l'équipe du *Laboratoire des Projets Nucléaires* (LPN), au sein de la *Direction de l'Énergie Nucléaire* (DEN) du CEA Cadarache (Bouches du Rhône). Ce laboratoire est en charge du développement et de la validation des schémas de calcul neutroniques dédiés aux réacteurs expérimentaux et embarqués. Le doctorant travaillera en étroite collaboration avec *Service d'Étude des Systèmes Innovants* (SESI) qui est en charge du développement et de la validation des modélisations multiphysiques couplées pour les études de conception et de sûreté des réacteurs.

Il sera aussi une liaison directe avec le DM2S (*Département de Modélisation des Systèmes et Structures*) au CEA Saclay, qui développe APOLLO3[®], et avec l'équipe d'expérimentation du réacteur CABRI.

Les différentes phases du déroulement de la thèse sont explicitées à titre indicatif ci-dessous :

- Étude bibliographique sur le réacteur CABRI, les schémas de calcul neutroniques des réacteurs expérimentaux, les modèles de cinétique,
- Analyse (et éventuel complément) du PIRT déjà réalisé sur les pulses de puissance du cœur CABRI, analyses des performances pour la sûreté et les essais attendus ; définition des paramètres d'intérêt du schéma de calcul neutronique à développer et de ses incertitudes-cibles ;
- Développement du schéma de calcul neutronique 3D cœur en cinétique, avec prise en compte de contre-réactions (a minima Doppler) ;
- Validation numérique du nouveau schéma de calcul neutronique ;
- Validation expérimentale du nouveau schéma de calcul neutronique ;
- Si le temps le permet, à la fin de la thèse, éléments de quantification d'incertitudes (données nucléaires / paramètres technologiques) sur les paramètres d'intérêt calculés par le nouveau schéma neutronique ;
- Intégration du schéma neutronique dans la plateforme de couplage CORPUS en vue du couplage avec les codes de thermohydraulique à terme.



5. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] J. Couturier, M. Schwartz, "État des recherches dans le domaine de la sûreté des réacteurs à eau sous pression", EDP Sciences, Collection Sciences et Techniques, 2017. Disponible sur le web : https://www.irsn.fr/FR/Larecherche/publications-documentation/collection-ouvrages-IRSN/Documents/RDreacteurs_francais_WEB.pdf.
- [2] O. Clamens, "Analyses et propagation des incertitudes associées à la dépressurisation d'hélium-3 sur les transitoires de puissance du réacteur CABRI", Thèse de doctorat, Université Grenoble-Alpes, 2018. Disponible sur le web <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01975146>.
- [3] J.M. Labit, "Contribution à la démarche de validation expérimentale des outils de calculs scientifiques multi-physiques et application au transitoire de puissance dans le réacteur CABRI", thèse en cours (2017-2020), Université Grenoble Alpes Université.
- [4] D. Schneider *et al.*, "APOLLO3®: CEA/DEN Deterministic Multi-Purpose Code for Reactor Physics Analysis", *PHYSOR 2016*, Sun Valley, Idaho, USA, May 1-5, 2016.
- [5] I. Toumi, A. Bergeron, D. Gallo, E. Royer, D. Caruge, "FLICA-4: A three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications", *Nuclear Engineering and Design*, 200, 139-155, 2000
- [6] J.-C. Le Pallec, K. Mer-Nkonga, "Neutronics/Fuel Thermomechanics coupling in the framework of a REA (Rod Ejection Accident) Transient Scenario Calculation", *PHYSOR 2016*, Sun Valley, Idaho, USA, May 1-5, 2016
- [7] P. Emonot, A. Souyri, J.L. Gandrille, F. Barré, "CATHARE3 : A new system code for thermal-hydraulics in the context of the NEPTUNE project", *Nuclear Engineering and Design*, 241, 4476-4481, 2011
- [8] SALOME, disponible sur le web <https://www.salome-platform.org>
- [9] J.M. Labit, N. Marie, J.P. Hudelot, E. Merle, "An advanced experimental validation methodology of multiphysics calculation tools on CABRI transients", *Proc. Int. Conf. M&C2019*, Portland, USA, 2019
- [10] C. Vaglio-Gaudard *et al.*, "Some challenges to be addressed for the implementation of the VVUQ-T process for multiphysics simulation tools for reactor design, safety demonstration and operation", *Proc. Int. Conf. PHYSOR2020*, Cambridge, UK, 2020.
- [11] T. Valentine *et al.*, "OECA-NEA expert group on Multiphysics Experimental Data, Benchmarks and Validation", *Proc. Int. Conf. ICONE26*, Londres, Angleterre, 2018.

6. Profil du doctorant / Applicant profile

Formation en physique des réacteurs nucléaires souhaitée.

Le doctorant développera au cours de la thèse des compétences sur la simulation neutronique et multiphysique, et sur les réacteurs expérimentaux.

Le doctorant sera amené à présenter le résultat de ses travaux lors de communications orales en conférence. Il pourra également présenter ses travaux lors de réunions de l'*Expert Group on Multi-physics Experimental Data, Benchmarking and Validation* (EGMPEBV) [11] à l'OCDE/AEN. Le doctorant fera également la synthèse de ses résultats dans une ou plusieurs publications en revue à comité de lecture.

7. Localisation de la thèse / PhD location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Cadarache

Laboratoire des Projets Nucléaires (LPN)

CEA Cadarache

13108 Saint-Paul-lez-Durance

8. Personnes contacts / Contact persons

Nom : JEURY
Prénom : Florence
e-mail : florence.jeury@cea.fr
Affiliation : DEN/DER/SPRC/LPN

Nom : AMMAR
Prénom : Karim
e-mail : karim.ammar@cea.fr
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

1. Titre de la thèse / PhD subject title

RÉALISATION D'UN RÉACTEUR NUMÉRIQUE « PRATIQUE » POUR DES ÉTUDES « HAUTE-FIDÉLITÉ » DU CYCLE DU COMBUSTIBLE DES RÉACTEURS À EAU SOUS PRESSION

2. Contexte de la thèse / PhD context

L'actuelle disponibilité de machines de calcul à haute performance ouvre sur la perspective de simulations « étalons » des réacteurs nucléaires. Ces simulations permettent l'analyse des phénomènes multi-physiques complexes qui se produisent dans un réacteur nucléaire. Elles assurent notamment d'obtenir une qualité numérique à haute-fidélité. Ces calculs fournissent également une description détaillée du comportement des composants.

Parmi les différentes lois régissant la physique du cœur d'un réacteur, la neutronique et la thermohydraulique (TH) sont les plus importantes en ce qui concerne l'analyse des performances du combustible et de sûreté. À cet égard, le développement des simulateurs de réacteur « haute-fidélité » s'est concentré sur le couplage des codes neutroniques et TH. Le paradigme de base du calcul « étalon » est la simulation neutronique en théorie du transport, en utilisant des méthodes déterministes ou probabilistes et des modèles de dynamique (ou mécanique) des fluides numérique (en anglais, *Computational Fluid Dynamics*, CFD) faisant abstraction des modèles empiriques de corrélations. Ceci diffère de manière importante du schéma industriel classique du calcul de cœur de réacteur en deux étapes qui, quant à lui, est basé sur la théorie de la diffusion et sur un modèle TH simplifié. Contrairement au calcul en deux étapes, le calcul « étalon » en transport ne nécessite aucune homogénéisation préalable des assemblages combustibles ou des crayons composants les assemblages : les distributions détaillées des nucléides et de la température à l'intérieur de chaque pastille de combustible sont explicitement modélisées pour représenter le comportement du cœur de façon réaliste.

Un premier essai de la construction d'un réacteur nucléaire numérique (en anglais *Numerical Nuclear Reactor*, NNR) (Weber *et al.*, 2007) a été développé conjointement par l'Institut coréen de recherche sur l'énergie atomique (KAERI) et l'Argonne National Laboratory (ANL) pour les applications de réacteur à eau légère (LWR).

Toutefois, malgré une qualité numérique reconnue, ces calculs, dits « *best estimate* », sont loin d'être applicables à des études de conception « haute-fidélité » de routine, aussi bien pour les industriels que pour les instituts de recherche. La raison en réside dans la nécessité de disposer des ressources de calculs conséquentes, en terme de nombre d'unités de calculs et de mémoire ainsi que de temps de simulation qui ne se hissent pas actuellement à l'échelle des contraintes industrielles.

3. Description du sujet / Topic description

Ce projet de thèse propose l'exploration d'une voie de simulation connue sous le nom de « Réacteur Numérique Pratique » (Joo *et al.*, 2013) (en anglais, *Practical Numerical Reactor*, PNR). Ceci implique trois acteurs principaux : le solveur de neutronique en transport, qui détermine la distribution de puissance détaillée, le solveur d'évolution, calculant la composition isotopique du combustible irradié, et le solveur simplifié T/H, qui détermine la température et la densité du modérateur et la distribution de température des pastilles. À la différence des calculs étalons, le PNR emploie un solveur simplifié T/H au lieu de la CFD, tout en gardant une simulation détaillée en théorie du transport pour le calcul de la distribution de puissance.

Le PNR vise à assurer la mise à disposition d'un outils d'analyse du cycle du combustible en employant des ressources informatiques abordables pouvant s'étendre de quelques dizaines à quelques centaines de nœuds de calcul permettant une simulation à haute-fidélité pour des situations nominales. Toutefois, afin d'éviter toute complexité inutile, le développement de la première version de PNR ciblera uniquement les cœurs de réacteur à eau sous pression (REP) fonctionnant en conditions nominales et la simulation de transitoires limités aux situations sans ébullition.

Le principal objectif de la thèse est la prise en compte de l'effet de contre-réaction thermo-hydraulique sur une

modélisation détaillée de l'évolution du combustible. Le calcul sera obtenu avec une distribution tridimensionnelle non-uniforme de la température des pastilles ainsi qu'une prise en compte du changement des sections efficaces par effet Doppler. Cette modélisation à échelle fine est nécessaire pour la modélisation de l'« *effet de peau* » prédominant dans l'usure des crayons combustibles.

4. Programme de travail proposé / Proposed work agenda

La réalisation pratique du PNR se déroulera dans un environnement de travail « maquette » ou « Proto-app ». Le projet de thèse sera composé de quatre phases principales.

Une première phase constituera l'étude bibliographique des différentes plateformes en multiphysique.

La deuxième phase se concentrera sur la mise au point des modélisations nécessaires aux différentes échelles physiques. Le candidat devra coupler trois outils de base développés au CEA :

- Le solveur de neutronique IDT (*Integro-Differential Transport*), qui résout l'équation du transport des neutrons par la méthode des caractéristiques courtes en maillage 3D localement extrudé.
- Le solveur d'évolution MENDEL, qui résout l'équation de Bateman régissant les concentrations isotopiques du combustible, des absorbants et des matériaux de structure.
- Le solveur de thermo-hydraulique simplifié THEDI, qui résout les équations de l'écoulement du modérateur en employant une approximation monodimensionnelle à canal fermé.

La neutronique, l'évolution isotopique et la thermo-hydraulique seront vérifiées séparément avec une mise au point de cas tests simulant progressivement les crayons, les assemblages et le cœur. Cette phase sera très importante pour dimensionner les ressources nécessaires au calcul cœur.

Une attention particulière sera portée à la décomposition de données, ceci étant la base pour accéder aux calculs parallèles. Pour les solveurs de neutronique IDT et d'évolution MENDEL, la distribution des données s'appuiera sur l'existante technique de décomposition du domaine dont dispose le solveur IDT. Pour ce faire, la géométrie du réacteur sera divisée en sous-domaines. Chacun des sous-domaines devra assurer le calcul du flux et, donc, des taux des réactions ainsi que l'évolution isotopique des milieux combustibles. De cette manière, le solveur d'évolution sera instancié avec un nombre égal au nombre de sous-domaines géométriques. Le calcul T / H sera lui aussi parallélisé mais, cette fois, il sera parallélisé séparément en considérant chaque canal d'eau indépendamment (schématiquement, le « canal » est la portion d'eau comprise entre quatre crayons de combustible).

La troisième phase aura un caractère numérique plus accentué et sera consacrée à la détermination de la distribution tridimensionnelle de puissance et de température en régime stationnaire. Les méthodes actuelles reposent sur l'utilisation d'une « *itération de Picard* », en alternant la résolution des deux physiques, c'est-à-dire neutronique et T / H. L'itération de Picard présente des inconvénients importants : il n'est pas inconditionnellement stable et il présente au mieux un taux de convergence linéaire. De plus, des schémas de relaxation définis par l'utilisateur sont généralement nécessaires pour atteindre la convergence sur des maillages grossiers fixes.

Cette thèse propose l'exploration de méthodes basées sur les « *itérations de Newton* ». Cependant, les méthodes basées sur la technique de Newton de recherche du zéro se sont révélées globalement convergentes avec des taux de convergence quadratiques. L'inconvénient de ces méthodes est l'accès plus intrusif dans les codes de calcul, en requérant des informations supplémentaires pour le calcul des matrices « Jacobiennes ». Alors que la détermination analytique des matrices jacobiennes est généralement infaisable, les méthodes de Newton-Krylov sans Jacobien (en anglais, *Jacobian-Free Newton Krylov*, JFNK) peuvent être utilisées pour tirer parti des avantages des méthodes basées sur Newton tout en ne nécessitant qu'une estimation des fonctions non linéaires. Bien que les méthodes JFNK aient été appliquées avec succès dans de nombreux domaines, l'application aux simulations de réacteurs en a été limitée à des approximations basées sur la théorie de la diffusion à deux groupes ou restreintes à l'équation du transport avec des modèles analytiques de rétroaction, qui ne permettent pas une analyse précise du réacteur. Dans ce travail de recherche, nous proposons

l'investigation et l'analyse des performances de plusieurs techniques non-linéaires de recherche du minimum basées sur les itérations de Newton, telles que JFNK, l'« *accélération d'Anderson* » et l'« *algorithme itératif de Brent* ».

Le quatrième point sera la validation et vérification (V&V) des méthodologies et des résultats obtenus sur des benchmarks. En particulier, l'étude du cycle d'un réacteur nucléaire commercial à eau sous pression sera visée avec une description détaillée des assemblages combustibles, des absorbants, des chambres à fission et de toutes les composants mécaniques.

En particulier, le cas test BEAVRS (*Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations*) sera considéré comme cible ultime pour la validation des méthodologies employées.

Comme annoncé, la thèse vise à la création d'une plateforme multi-outil basée sur le langage interprété Python. Cette plateforme encapsulera les solveurs de base qui permettront l'enchaînement du calcul. La lecture et l'interpolation en températures des sections efficaces ainsi que les solveurs IDT, MENDEL et THEDI seront pilotés et encapsulés de manière à pouvoir expérimenter les techniques de résolution non-linéaires requises.

5. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Y. S. Jung, C. Bo Shim, C. H. Lim, H. G. Joo, "Practical numerical reactor employing direct whole core neutron transport and subchannel thermal/hydraulic solvers", *Annals of Nuclear Energy* 62 (2013) 357–374.
- S. Lahaye, A. Tsilanizara, P. Bellier, T. Bittar, "Implementation of a CRAM solver in MENDEL Depletion Code System," *M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering*, Jeju, Korea, April 16-20, 2017, on USB (2017).
- Available from:
https://www.researchgate.net/publication/317606592_Implementation_of_a_CRAM_solver_in_MENDEL_Depletion_Code_System.
- E. Isotolo et al., "Flux renormalization in constant power burnup calculations", *Annals of Nuclear Energy* 96 (2016) 148–157.
- E. Masiello, B. Martin, J.-M. Do, "Domain decomposition and cmfd acceleration applied to discrete-ordinate methods for the solution of the neutron transport equation in XYZ geometries," *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)* Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011, on CD-ROM, Latin American Section (LAS) / American Nuclear Society (ANS) ISBN 978-85-63688-00-2.
- BEAVRS: Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations, RELEASE rev. 2.0.2 MIT Computational Reactor Physics Group April 11, 2018
Available from: http://crpg.mit.edu/sites/default/files/css_injector_images_image/BEAVRS_2.0.2_spec.pdf
- C.L. Wheeler et al., "COBRA-IV-I: An Interim Version of COBRA for Thermal-Hydraulic Analysis of Rod Bundle Nuclear Fuel Elements and Cores". Battelle Pacific Northwest Laboratory, Report, BNWL-1962.

6. Profil du doctorant / Applicant profile

Le candidat devra avoir à un fort goût pour la physique de réacteurs ainsi que des compétences en mathématiques appliquées et en analyse numérique. Une formation acquise en physique des réacteurs nucléaires est souhaitée. L'intégration correcte des solveurs dans le schéma de calcul nécessitera l'utilisation des langages Fortran, pour le solveur IDT, et C++, pour les solveurs THEDI et MENDEL. Des connaissances de ces langages seront appréciées, à défaut un intérêt important pour leur apprentissage. De même, la programmation parallèle en mémoire partagée (*a priori* en *OpenMP*) et distribuée (*MPI*) sera aussi utilisée au cours de cette thèse. Une formation sur ces langages pourra être proposée.

7. Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

8. Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : MASIELLO
Prénom : Emiliano
e-mail : emiliano.masiello@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 86 09
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Nom : COCHET
Prénom : Sandrine
e-mail : sandrine.cochet@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 78 83
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

Nom : LENAIN
Prénom : Roland
e-mail : roland.lenain@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 24 45
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR

1. Titre de la thèse

DÉVELOPPEMENT D'UNE MÉTHODOLOGIE D'ANALYSE DE STABILITÉ SEMI-ANALYTIQUE ET APPLICATION À UN COUPLAGE NEUTRONIQUE – THERMOHYDRAULIQUE DIPHASIQUE

2. Contexte de la thèse / PhD context

Dans le domaine de la physique des réacteurs, les modélisations mises en œuvre pour la description de l'état du cœur d'un réacteur nucléaire en situation de fonctionnement normal, incidentel et accidentel répondent à un objectif de prédiction de plus en plus poussé. Cette tendance est fortement motivée par les avancées réalisées en génie/architecture logiciel et en mathématiques appliquées, permettant le déploiement d'outils de simulation de plus en plus précis.

Ce gain en précision s'accompagne souvent d'une complexification des modélisations utilisées, de plus en plus multi-physiques, et donc parfois de l'analyse des résultats. En particulier, lorsque la simulation est instable, il est parfois difficile de déterminer si cette instabilité est d'origine numérique (due au modèle numérique) ou physique. Des instabilités physiques sont notamment attendues en cas de forte ébullition du caloporteur.

La théorie des systèmes dynamiques est la branche des mathématiques qui étudie les propriétés d'un système dynamique, notamment sa stabilité. Dans le cadre de la physique des réacteurs, elle a été utilisée avec succès dans les années 70 pour cartographier les zones de stabilité des réacteurs à eau bouillante (Saha and Zuber 1978, Lahey 1986, Rizwan-Uddin et al. 1986). Une thèse récente a appliqué cette théorie à l'ébullition du sodium (Bissen 2019), et a débouché sur le développement d'un nouvel outil, BACCARAT (*Bifurcation Analysis of a vertiCal Channel based on the Asymptotic numeRiCAl meThod*). Parmi les nouveautés introduites dans cette thèse, la théorie des systèmes dynamiques y a été utilisée sur des équations aux dérivées partielles discrétisées, plutôt que sur des équations aux dérivées ordinaires (beaucoup moins riches en informations, notamment spatiales).

Cette approche est complémentaire au développement standard des codes de calcul puisqu'elle donne les outils permettant d'identifier, de comprendre et d'analyser les instabilités qui ne peuvent qu'être constatées par les approches classiques, basées sur l'intégration temporelle de équations du problème.

3. Description du sujet / Topic description

L'objectif de cette thèse est de reprendre les travaux de la thèse précédente (Bissen 2019) et de les étendre dans deux directions, applicative et méthodologique :

1. Côté applicatif : introduction de la neutronique pour comprendre l'influence que peut avoir le couplage à cette discipline sur les instabilités thermohydrauliques ;

Comme dans la thèse précédente, nous resterons dans le cadre de l'étude des réacteurs à neutrons rapides à caloporteur sodium (RNR-Na). Ils offrent un bon cas d'application, une très forte ébullition (donc potentiellement instable) étant susceptible de se produire lors de certains accidents. Des simulations multi-physiques récentes ont d'ailleurs décrit l'établissement d'un régime oscillant (oscillations thermohydrauliques couplées à des oscillations de puissance) en fin de certains transitoires accidentels. Les travaux réalisés pendant cette thèse pourront peut-être permettre de comprendre l'apparition de ce régime, l'influence qu'a la neutronique, et de justifier de sa stabilité.

2. Côté méthodologique : développement méthodologique pour décrire les solutions périodiques, voire déterminer leur stabilité.

L'outil actuel est capable de prédire l'apparition d'un régime périodique, mais pas de l'explorer (évolution et sensibilité aux paramètres opératoires, ainsi qu'en étudier sa stabilité). Il existe cependant des outils théoriques qui pourraient permettre de combler cette lacune. Nous souhaiterions, lors de cette thèse, évaluer le potentiel de ces méthodes pour nos

applications, voire les expérimenter.

4. Programme de travail proposé / Proposed work agenda

Le travail de thèse envisagé peut être décomposé en trois parties :

1. État de l'art et extensions de l'outil existant

Dans la première partie de la thèse, l'outil existant sera pris en main et complété, toujours sur un applicatif purement thermohydraulique. Quelques voies d'amélioration sont envisageables : meilleure prise en compte des changements de géométries (variation brutale de diamètres), et passage au multi-1D notamment.

Un travail bibliographique sera également demandé sur la théorie des systèmes dynamiques et son application aux solutions périodiques. Une première application de ces méthodes, basées sur la transformation de Fourier (méthode de continuation de branches de solution périodiques par « Harmonic Balance Methods », Cochelin and Vergez 2009), pourra éventuellement être faite.

2. Introduction du couplage thermo-hydraulique-neutronique

La deuxième partie de la thèse consistera à introduire les équations de la neutronique. L'utilisation d'un modèle de diffusion est envisagée. Une attention particulière devra être portée quant à la régularité du modèle implémenté. Une régularisation de ses paramètres (comme les sections efficaces qui sont souvent considérées comme constantes par morceaux), sera a priori nécessaire. Un schéma numérique d'ordre élevé sera ensuite écrit et résolu avec la Méthode Asymptotique Numérique (MAN), méthode de continuation d'ordre élevé basée sur des développements de Taylor. La MAN permet de calculer toutes les solutions stationnaires d'un système en fonction d'un paramètre donné.

En plus de la neutronique et de la thermohydraulique, la thermique des solides est la troisième discipline majeure de la physique des réacteurs. Il est anticipé que son impact sur la stabilité du système est moindre que celui des deux autres disciplines. Sa prise en compte pourrait néanmoins se révéler nécessaire. Une modélisation simplifiée des transferts conductifs dans les solides serait alors à envisager.

Les différentes modélisations développées (neutronique, thermohydraulique et peut-être thermique) seront alors à coupler de façon monolithique (résolution commune des équations discrètes) avec les outils de la Méthode Asymptotique Numérique. La stabilité du système ainsi obtenu sera étudiée avec les outils de la Théorie des Systèmes Dynamiques déjà testés sur la thermohydraulique seule.

3. Étude de la stabilité des régimes périodiques

Cette troisième partie est optionnelle. Il est probable que, dans certains régimes de fonctionnement, le système multi-physique obtenu à l'étape précédente exhibe des solutions périodiques. Si la thèse a bien avancé et que les méthodes théoriques permettant de décrire ces solutions, identifiées pendant la recherche bibliographique, semblent applicables, il pourra être envisagé de les implémenter et de les tester.

5. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Saha P. and Zuber N. (1978). An analytical study of the thermally induced two-phase flow instabilities including the effect of thermal non-equilibrium". International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 21(4), pp. 415-426.
- Lahey R. T. (1986). Advances in the analytical modeling of linear and nonlinear density-wave instability modes". Nuclear Engineering and Design 95, pp. 5-34.
- Rizwan-Uddin et al. (1986). Some nonlinear dynamics of a heated channel". ResearchGate, vol. 93(1), pp. 1-14.

- Bissen E. (2019). Semi-analytical methodology for stability and bifurcation analysis in a low pressure boiling channel for GENIV SFR safety R&D on two-phase flow limit cycles. PhD Aix-Marseille University and CEA.
- Cochelin B. and Vergez C. (2009). A high order purely frequency-based harmonic balance formulation for continuation of periodic solutions. Journal of Sound and Vibration, vol. 324, pp. 243–262.

6. Profil du doctorant / Applicant profile

7. Localisation de la thèse / PhD location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay
DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

8. Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : PATRICOT
Prénom : Cyril
e-mail : cyril.patricot@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 79 70
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC

1. Titre de la thèse

ANALYSE DES FLUCTUATIONS ET DES CORRÉLATIONS DANS LES MÉTHODES MONTE-CARLO CINÉTIQUES

1. PhD title

ANALYSIS OF FLUCTUATIONS AND CORRELATIONS IN KINETIC MONTE CARLO METHODS

2. Contexte de la thèse

Dans le cadre de la sûreté des installations nucléaires, le développement d'outils de calcul prédictifs, fiables et rapides permettant la simulation multi-physique des cœurs des réacteurs nucléaires (couplage du flux neutronique avec contre-réactions thermo-hydrauliques, en conditions stationnaires et transitoires) fait l'objet d'un programme de recherche très poussé.

Jusqu'à très récemment, la composante neutronique des calculs de transitoires se basait exclusivement sur des méthodes déterministes, en général très rapides en régime stationnaire. Les approximations des codes déterministes étant spécifiques à chaque typologie de réacteur, la validité des résultats obtenus et la quantification des incertitudes associées aux grandeurs physiques d'intérêt dépendent de la configuration étudiée. Afin de s'affranchir de ces contraintes et de pouvoir valider les codes déterministes en régime non-stationnaire, il est capital de disposer d'une méthode de calcul de référence permettant de pallier la pénurie de données expérimentales relatives aux transitoires accidentels.

La simulation Monte-Carlo se fonde sur la réalisation d'un très grand nombre de trajectoires aléatoires de neutrons, dont les lois de probabilité sont déterminées en accord avec les lois physiques sous-jacentes (probabilité d'interaction particule-matière, lois de renvoi en angle et énergie, etc.), et un traitement exact de la géométrie du système simulé est en principe possible. L'absence quasiment totale d'approximations est contrecarrée par un coût de calcul très élevé, les incertitudes sur les grandeurs estimées étant inversement proportionnelles à la racine carrée du nombre d'histoires de particules simulées. Par ce fait, la simulation Monte-Carlo est considérée comme la méthode de référence pour le calcul du transport des neutrons.

Grâce à la puissance croissante des ordinateurs, il devient envisageable aujourd'hui que la simulation Monte-Carlo s'ouvre à la solution de problèmes non-stationnaires. Pour ce faire, le principal verrou scientifique à lever est la prise en compte des échelles de temps très différentes des neutrons prompts et des neutrons retardés dans les transitoires longs (Monte-Carlo « cinétique »). Les méthodes cinétiques ont fait l'objet d'un effort de recherche important ces dernières années, ce qui est témoigné entre autre par les évolutions récentes du code TRIPOLI-4[®], développé au Service d'Etude des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées (SERMA) du CEA/Saclay.

2. PhD context

In the context of nuclear reactor safety, the development of predictive, reliable and fast calculation tools for multiphysics simulation of the nuclear reactor cores (coupling the neutron flux with thermal-hydraulics feedbacks, under stationary and transient conditions) is the subject of a very extensive research program.

Until very recently, time-dependent neutron transport calculations were based almost exclusively on deterministic methods, generally very fast for stationary problems. Since the approximations inherent to deterministic codes are specific to each reactor type, the validity of the results obtained and the quantification of the uncertainties associated with the physical quantities of interest depend on the configuration under analysis. In order to overcome these constraints and to be able to validate non-stationary deterministic codes, it is essential to have a reference calculation method, especially so due to the very limited available experimental data for accidental transient regimes.

Monte Carlo simulation is based on the realization of a very large number of random neutron trajectories, whose probability laws are determined in accordance with the underlying physical laws (probability of particle-matter interaction, angle and energy distributions, etc.), and an exact treatment of the geometry of the simulated system is in principle possible. The almost total absence of approximations is thwarted by a very high calculation cost, the uncertainties on the estimated quantities being inversely proportional to the square root of the number of stories made. As a result, Monte Carlo simulation is considered as the reference method for calculating neutron transport.

Thanks to the increasing computer power, it becomes possible today to address non-stationary problems by Monte Carlo simulation. For this purpose, the main scientific challenge is to take into account the very different time scales of prompt and delayed neutrons in long transients ("kinetic" Monte Carlo). Kinetic methods have been the subject of major research efforts in recent years, as witnessed for instance by the recent evolution of the TRIPOLI-4® code, developed at SERMA.

3. Description du sujet

Les méthodes Monte-Carlo cinétiques ont été récemment appliquées avec succès à l'analyse de transitoires en situation nominale ou accidentelle dans des systèmes nucléaires tels que des assemblages ou des petits réacteurs de recherche. Pour franchir cette étape, des techniques de réduction de variance adaptées aux problèmes cinétiques ont été développées. En dépit de ces résultats très prometteurs, la simulation cinétique de systèmes de grande taille (tels qu'un cœur de réacteur de puissance) reste inaccessible à ce jour, principalement pour des raisons de temps de calcul extrêmement longs afin d'atteindre une précision statistique acceptable sur les grandeurs d'intérêt.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous proposons de nous doter des outils conceptuels permettant de comprendre et maîtriser les fluctuations statistiques et les corrélations des calculs Monte Carlo cinétiques. En particulier, la thèse s'articulera autour des thématiques suivantes :

- Développement d'une stratégie unifiée et cohérente pour *réduire la variance* des calculs cinétiques : l'approche que nous proposons vise à utiliser la solution de l'équation adjointe de Boltzmann dépendante du temps (couplée aux équations des précurseurs des neutrons retardés) afin de construire un schéma « optimal » pour l'échantillonnage des marches aléatoires des neutrons. Cette formulation permettrait d'obtenir idéalement des réponses Monte-Carlo à variance nulle, si la fonction adjointe était connue exactement (en ce sens, elle correspondrait à une généralisation de la méthode Consistent Adjoint-Driven Importance Sampling – CADIS – historiquement développée pour les problèmes stationnaires). Dans la pratique, la fonction adjointe est obtenue généralement par des calculs approchés (solutions déterministes, cinétique ponctuelle, etc.) et l'exploitation de cette information est partielle (engorgement mémoire, complexité algorithmique, etc.). Par conséquent, la variance du jeu Monte-Carlo quasi-optimal ne pourra pas être nulle ; néanmoins, les gains attendus sur le temps de calcul pour une précision donnée pourraient être très grands ;
- Analyse des *fluctuations et des corrélations en espace et en temps* dans les calculs cinétiques. Des études récentes ont mis en évidence deux phénomènes propres aux simulations non-stationnaires : la présence de mécanismes spontanés de regroupement spatial (« clustering ») des neutrons et la présence d'une forte persistance temporelle des tendances sur les fluctuations. L'origine de ces deux effets est liée à la présence de corrélations en espace et temps induites par les chaînes de fission : la compréhension théorique et la quantification (mise en équations) de ces mécanismes est indispensable afin de pouvoir garantir la fiabilité des incertitudes statistiques estimées dans les calculs Monte-Carlo cinétiques, et ce spécialement en vue de la comparaison avec les codes déterministes.

Les deux thèmes étant intimement liés, ces analyses seront accompagnées d'une étude des interactions entre les méthodes de réduction de variance et les corrélations (il est connu par exemple que l'introduction de méthodes de contrôle global de la population, telles que le « combing » ont un effet "dramatique" sur les corrélations et sur la variance). Enfin, en fonction de l'avancement de la thèse, il sera possible d'étendre ces considérations au cas où l'évolution temporelle de la population neutronique est couplée à des rétroactions physiques.

Les retombées de ce travail de thèse devraient assurer une percée majeure pour les méthodes cinétiques et la transposition

dans le code TRIPOLI-4® permettra d'accéder par ce biais à la simulation Monte-Carlo de systèmes de grande taille en régime transitoire.

3. Topic description

Recently, kinetic Monte Carlo methods have been successfully applied to the analysis of transients in nominal or accidental situations in nuclear systems such as assemblies or small research reactors. To this end, it was necessary to develop variance reduction techniques suitable for kinetic problems. Despite these promising early results, the kinetic simulation of large systems (such as a power reactor core) remains inaccessible to date, mainly because of the extremely long computing times required to achieve an acceptable statistical accuracy on the quantities of interest.

In the framework of this thesis, we propose to establish the conceptual tools necessary to understand and control the statistical fluctuations and the correlations of kinetic Monte Carlo computations. In particular, the thesis will be structured around the following themes:

- Development of a unified and coherent strategy to reduce the variance of kinetic calculations: the approach we propose aims to use the solution of the time-dependent Boltzmann adjoint equation (coupled to delayed neutron precursor equations) in order to construct an "optimal" scheme for sampling the neutron random walks. This formulation would yield zero-variance Monte Carlo scores, provided that the adjoint function is known exactly (in this sense, it would correspond to a generalization of the Consistent Adjoint-Driven Importance Sampling method - CADIS - historically developed for stationary problems). Practically, the adjoint function is generally the result of approximate calculations (deterministic solutions, point kinetics, etc.) and the exploitation of this information is partial (memory limits, algorithmic complexity, etc.). Thus, the variance of the quasi-optimal Monte Carlo game does not vanish; still, the expected gains in computing time for a given target accuracy could be very large;
- Analysis of fluctuations and correlations in space and time in kinetic calculations. Recent studies have highlighted two phenomena specific to non-stationary simulations: the presence of spontaneous mechanisms of neutron clustering and the presence of a strong temporal persistence of fluctuation trends. The origin of these two effects is related to the presence of correlations in space and time induced by the fission chains: the theoretical understanding and the quantification of these mechanisms is essential for guaranteeing the reliability of the statistical uncertainty estimates of kinetic Monte Carlo calculations, especially in the context of the comparison with deterministic codes.

Since the two themes are intimately related, these analyses will be integrated by a study of the interaction between variance reduction methods and correlations (it is known, for example, that the introduction of global population control, such as "combing", has a dramatic effect on correlations and variance). Finally, depending on the progress of the thesis, it may be possible to extend these considerations to the case where the temporal evolution of the neutron population is coupled to physical feedbacks.

The outcome of this thesis should result in a major breakthrough for kinetic methods and the implementation in the TRIPOLI-4® code will unlock access to the Monte Carlo simulation of large systems in transient regime.

4. Programme de travail proposé

L'étudiant s'appropriera avant tout de l'état de l'art des méthodes Monte-Carlo pour le traitement des problèmes cinétiques, en particulier concernant les techniques de réduction de variance (contrôle de la population, méthodes « sans branchement », décroissance forcée des précurseurs, etc.). Ensuite, le travail sera focalisé sur le développement du formalisme théorique pour l'analyse de la variance et des corrélations (moments croisés et fonctions « à deux points » en espace et en temps), notamment par l'intermédiaire des formules de Feynman-Kac et les « équations des moments » pour les estimateurs Monte-Carlo. Les avancées théoriques et les algorithmes qui en seront inspirés seront évalués en termes de précision et performances sur la base des simulations réalisées à l'aide d'un code de transport Monte-Carlo cinétique simplifié.

4. Proposed work agenda

The student will first investigate the state of the art of Monte-Carlo methods for the treatment of kinetic problems, in particular with regard to variance-reduction techniques (population control, "branchless" methods, forced decay for the precursors, etc.). Work will then focus on the development of the theoretical formalism for the analysis of the variance and the correlations ("two-point" correlation functions in space and time), notably via the Feynman-Kac formulas and the "moment equations" for Monte Carlo estimators. These theoretical advances, and the algorithms they will inspire, will be evaluated with respect to their accuracy and performance using a simplified kinetic Monte Carlo transport code.

5. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Lux, L. Koblinger, Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations, CRC PRes, 1991.
- M. Faucher, D. Mancusi, A. Zoia, New kinetic simulation capabilities for Tripoli-4: methods and applications, Ann. Nucl. Energy 120, 74-88 (2018).
- G. I. Bell, S. Glasstone Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand Reinhold, USA (1970)
- E. Brun, et al., Tripoli-4, CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code, Ann. Nucl. Energy, 82 (2015), pp. 151-160
- C. De Mulatier, E. Dumonteil, A. Rosso, A. Zoia, The critical catastrophe revisited, J. Stat. Mech., 2015 (8) (2015), p. P08021.
- Pázsit, L. Pál, Neutron Fluctuations: A Treatise on the Physics of Branching Processes, Elsevier, Oxford (2008).
- B. L. Sjenitzer, J. E. Hoogenboom, Dynamic Monte Carlo method for nuclear reactor kinetics calculations, Nucl. Sci. Eng., 175 (2013), pp. 94-107.

6. Profil du doctorant / Applicant profile

Les compétences requises pour la thèse sont : des bases solides en théorie de la probabilité et statistique et un goût prononcé pour la simulation numérique.

The skills required for the thesis are a solid understanding of probability theory and statistics and a marked taste for numerical simulation.

7. Localisation du stage / Internship location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

8. Personne(s) contact(s) / Contact person(s)

Nom : MANCUSI
Prénom : Davide
e-mail : davide.mancusi@cea.fr
Téléphone : 01 69 08 78 72
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

Nom : ZOIA
Prénom : Andrea
e-mail : andrea.zoia@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 79 76
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LTSD

1. Titre de la thèse

ESTIMATEURS D'ERREUR A POSTERIORI POUR UN PROBLÈME AUX VALEURS PROPRES NON-SYMMÉTRIQUE : APPLICATION A UN OPÉRATEUR DE BOLTZMANN ET À UNE MÉTHODE DE BASES RÉDUITES EN NEUTRONIQUE

1. PhD title

A POSTERIORI ERROR ESTIMATE FOR A NON-SYMMETRIC EIGENVALUE PROBLEM: APPLICATION TO A BOLTZMANN OPERATOR AND A REDUCED BASIS IN NEUTRONICS.

2. Contexte de la thèse

Pour certaines applications concernant les réacteurs d'irradiation technologique (Material Testing Reactors), telle que l'optimisation du placement des assemblages, la difficulté est de pouvoir réaliser des calculs en un temps extrêmement court tout en conservant ou maîtrisant, voire réduisant, les biais et les erreurs de calcul.

2. PhD context

For some applications concerning Material Testing Reactors, such as optimization of the placement of the assemblies, the difficulty is to perform computations in a relatively short amount of time while controlling the accuracy.

3. Sujet proposé

On cherche à proposer une méthodologie qui permet des calculs en un temps court tout en conservant ou maîtrisant, voire réduisant, les biais et les erreurs de calcul. Une approche de type « bases réduites » pourrait répondre à cette contrainte.

Dans le cadre des bases réduites [2,4], on construit un espace d'approximation associé à une équation aux dérivées partielles dépendant d'un espace de paramètres. La construction de cet espace d'approximation comporte une phase d'exploration de l'espace des paramètres dans laquelle il est important de quantifier l'erreur entre la solution obtenue à partir de l'espace d'approximation (en construction) et la solution obtenue avec un calcul standard (discrétisation fine).

Cette étape cruciale permet de certifier la construction de la base réduite. Récemment, des travaux ont été menés pour obtenir un estimateur d'erreur calculable sur des problèmes aux valeurs propres symétriques [1]. Dans le contexte de la neutronique [3], on s'intéresse à des problèmes aux valeurs propres généralisés non-symétriques. Typiquement, on considère un opérateur de Boltzmann linéaire de la forme :

Trouver (u, v) tel que $Lu = Hu + vFu$,

où Lu est l'opérateur d'advection, Hu est l'opérateur de transfert qui modélise les collisions des neutrons, Fu est l'opérateur de fission et l'inconnue u représente le flux de neutrons.

Cette équation est aussi appelée l'équation de transport des neutrons. Le caractère non-symétrique de ce problème aux valeurs propres vient notamment de l'opérateur de transfert.

L'objectif de la thèse est de fournir des bornes d'erreur pour un problème aux valeurs propres non-symétrique issu d'un modèle de neutronique.

3. Proposal topic

We are interested in a methodology that perform a computation in a very short amount of time while preserving the accuracy. A reduced basis approach could meet this requirement.

In the framework of the reduced basis methods [2,4], we devise an approximation space associated to a parameter-dependent partial differential equation. The construction of this approximation space includes a phase of exploration of the space of parameters where it is important to quantify the error between the solution obtained from the approximation space (in construction) and the solution obtained from a standard (fine) discretization.

This crucial step allows to certify the construction of the reduced basis. Recently, some error estimates have been derived for symmetric eigenvalue problems [1]. In the context of neutronics [3], we are interested in generalized non-symmetric eigenvalue problems.

Typically, we consider a linear Boltzmann operator of the form:

Find (u, v) such that $Lu = Hu + v Fu$,

where Lu is the advection operator, Hu is the scattering operator that modelize the collisions of the neutrons, Fu is the fission operator and the unknown u represents the neutron flux.

The equation is also called the neutron transport equation. The fact the operator is not symmetric comes from the scattering operator.

The objective of this thesis is to provide error bounds for a non-symmetric eigenvalue problem arising from a neutronics model.

4. Programme de travail proposé

Le travail de thèse comportera les deux principales étapes suivantes :

- L'étude d'un modèle de diffusion multi-groupes, avant d'aborder l'équation de transport des neutrons proprement dite, à la fois sur les aspects théoriques et sur les expérimentations numériques.
- L'application des précédents travaux à une approche bases réduites.

4. Proposed work agenda

During the thesis, we will study a multigroup diffusion model before the neutron transport equation (first and second year), both for theoretical aspects and numerical experiments. We will then consider the application to a reduced basis approach.

5. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] G. Dusson. Error estimation for linear and nonlinear eigenvalue problems arising from electronic structure calculation. Mathematical Physics. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2017.
- [2] Y. Maday, O. Mula, A generalized empirical interpolation method: application of reduced basis techniques to data assimilation. *Analysis and Numerics of Partial Differential Equations*, XIII:221-231,2013.
- [3] O. Mula, Some contributions towards the parallel simulation of time dependent neutron transport and the integration of observed data in real time, Chapter 1, 2014.
- [4] G. Rozza, D. Huynh, and A. Patera, "Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for affinely parametrized elliptic coercive partial differential equations," *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 15, no. 3, pp. 1-47, 2008.

6. Profil du doctorant / Applicant profile

Les compétences requises pour la thèse sont : des bases solides en analyse et méthodes numériques.

The skills required for the thesis are a solid bases in numerical analysis and methods.

7. Localisation de la thèse / PhD location

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DEN/DANS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

8. Personne(s)-contact(s) / Contact person(s)

Nom : MADIOT

Prénom : François

e-mail : francois.madiot@cea.fr

Téléphone : 01.69.08.92.70

Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR