

Titre de la thèse

ANALYSE DES FLUCTUATIONS ET DES CORRELATIONS DANS LES METHODES MONTE-CARLO CINETIQUES

PhD title

ANALYSIS OF FLUCTUATIONS AND CORRELATIONS IN KINETIC MONTE CARLO METHODS

1. 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 réalisées. 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.

1. 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.

2. Sujet proposé

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 (encombrement 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.

2. Proposal topic

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.

3. 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.

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.

3. 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.

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

4. Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Lux, L. Koblinger, Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations, CRC Press, 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



Année académique / Academic year 2019-2020

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 : 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