

Titre du stage**CONTRIBUTION A LA VERIFICATION ET LA VALIDATION DE LA PHYSIQUE NEUTRON DU CODE DE TRANSPORT MONTE CARLO PATMOS****Internship title****CONTRIBUTION TO THE VERIFICATION AND VALIDATION OF NEUTRON PHYSICS IN THE MONTE CARLO TRANSPORT CODE PATMOS****Type de sujet / Topic type****VERIFICATION ET VALIDATION DE METHODES ET DE CODES DE CALCUL / VERIFICATION AND VALIDATION OF METHODS AND COMPUTATIONAL CODES****Contexte du stage**

L'application PATMOS est un prototype de code Monte-Carlo de transport de particules massivement parallèle, développé au CEA dans le but de tester des algorithmes alternatifs, adaptés aux nouvelles architectures matérielles (outils HPC) [1]. Jusqu'à peu, seuls deux types de particules étaient supportés dans PATMOS: d'une part, des pseudo-particules monocinétiques pouvant subir des collisions très simplifiées, principalement à des fins de vérification ; d'autre part, des neutrons à la physique dite « partielle », pour lesquels seule une partie limitée de l'information contenue dans les bibliothèques de données nucléaires est prise en compte. Cette physique partielle est représentative du point de vue des performances de calcul de simulation mais donne des résultats physiques incorrects. Cette limitation est raisonnable pourvu que ce code soit utilisé en tant que plateforme de tests d'architecture HPC.

Internship context

The PATMOS mini-app is a prototype for a massively parallel Monte Carlo particle transport code, developed at CEA in order to conceive alternative algorithms for novel HPC architectures [1]. Until recently, PATMOS supported only two particle types: on the one hand, single-speed pseudo-particles having very simplified collisions, mainly for code verification purposes; on the other hand, neutrons with « partial » physics with respect to the so-called free gas model, where only a limited amount of the information present in the nuclear data libraries is taken into account. This partial models of neutron physics are representative for the assessment of the simulation performance, but provide poor physical results. This limitation is reasonable as far as this code is used as a framework for HPC architecture testing.

Description du sujet du stage

Afin de rendre la modélisation physique plus réaliste, de nouveaux développements visant à enrichir la physique neutron ont récemment été effectués dans PATMOS, en exploitant pleinement les informations fournies par les bibliothèques de données nucléaires. Dans le cadre des bonnes pratiques de développement, une première partie de tests unitaires visant à vérifier le bon échantillonnage des lois de renvois des particules a déjà été effectuée. Ce stage s'inscrit dans une étape de validation complète d'un calcul de transport réalisé à l'aide de PATMOS.

L'objectif de ce stage est de contribuer à la validation de PATMOS sur la base de comparaisons avec d'autres codes de transport Monte-Carlo (notamment le code Tripoli-4® [2], développé au CEA, le code OpenMC [3] et éventuellement le code Serpent [4]). Il s'agira de lancer des calculs de transport (pour chacun des codes envisagés) sur des configurations simples puis déterminer les observables pertinentes (par exemple flux, taux de réaction et courants de sortie) et comparer les résultats obtenus afin de valider l'implémentation de la physique complète de PATMOS.

Une première approche consiste à modéliser des sphères entourées de vide, contenant chacune un isotope donné à une densité adaptée (garantissant un nombre de collisions raisonnables, en fonction de la taille de la sphère et de la section efficace microscopique de l'isotope) avec une source ponctuelle au centre de cette sphère. Tous paramètres de simulation fixés par ailleurs, on lancera des calculs de simulation pour la configuration décrite ci-avant avec les différents codes de transport, afin de calculer des scores moyennés et les distributions sous-jacentes. Les résultats seront ensuite extraits et comparés entre les différents codes à l'aide de routines automatisées à implémenter, de façon à mettre en évidence d'éventuels écarts sur les résultats pour certains isotopes. Les simulations seront itérées pour tous les isotopes issus de différentes bibliothèques nucléaires (ENDF, JEFF) et post-traités avec un code dédié (NJOY, GALILEE). Dans la mesure du possible, les écarts pourront être investigués par le stagiaire afin de comprendre l'origine du biais constaté. Si le temps le permet, d'autres configurations plus complexes, proposées comme *benchmarks* par la littérature, pourront être étudiées, notamment des configurations issues de l'ICSBEP (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project) [5].

Internship topic description

In order to make the physical models more accurate, new developments aimed at completing neutron physics have been recently implemented in PATMOS, by fully exploiting the information provided by nuclear data. In the spirit of good practices in development, a first part of unit tests has already been done to check whether the sampling of scattering and fission distributions is correct. This internship will concern the complete validation of a transport calculation using the PATMOS Monte Carlo code.

The goal of this internship is contribute to the validation of PATMOS thanks to the comparison with other Monte Carlo transport codes (namely Tripoli-4® [2], developed at CEA, OpenMC [3] and possibly Serpent [4]). We will need to run transport calculations (using each of the codes listed above) for very simple configurations, to compute some relevant observables (for instance keff, flux, reaction rates and leakage currents) and then to compare the obtained results in order to validate the implementation of the complete neutron physics in PATMOS.

A first approach consists in modelling spheres surrounded by void, filled with a given isotope with an appropriate concentration (ensuring a reasonable number of collisions, as a function of the sphere radius and of the microscopic cross section of the isotope) with a point-source at the center of this sphere. All simulation parameters being set, we will perform transport simulations for the configuration described above with the different transport codes, in order to compute the ensemble-averaged scores and the underlying distributions. These scores will be then extracted and compared between different codes with an automatized routine to be implemented, in order to identify possible discrepancies for some isotopes. The simulation calculations will be iterated over all isotopes provided by different nuclear data libraries (ENDF, JEFF) post-processed by a dedicated code (NJOY, GALILEE). The student could investigate these discrepancies in order to understand where the observed bias stems from. If time permits, more complex configurations, proposed as benchmarks by the literature, could also be investigated, in particular configurations from ICSBEP (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project) [5].

Bibliographie - Références / Bibliography - References

[1] E. Brun, S. Chauveau, F. Malvagi, PATMOS: A prototype Monte Carlo transport code to test high performance architectures, in Proc. M&C 2017, Jeju, Korea, April 16-20 (2017).

[2] 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).

[3] Paul K. Romano, Nicholas E. Horelik, Bryan R. Herman, Adam G. Nelson, Benoit Forget, and Kord Smith, OpenMC: A State-of-the-Art Monte Carlo Code for Research and Development, Ann. Nucl. Energy, 82, 90–97 (2015).

[4] Leppänen, J., et al., The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013, Ann. Nucl. Energy, 82, 142-150 (2015).

[5] NEA/NSC/DOC(95)03. ICSBEP Handbook. Organisation for Economic Co-operation and Development / Nuclear Energy Agency (2019).

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

Non/No

Profil du stagiaire

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

Applicant profile

Master of Science 2nd year or 3rd year in engineering school. Skills in mathematics and computer sciences (C++ and Python), educational background in the field of reactor physics.

Localisation du stage / Internship location

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

DES/ISAS/DM2S/SERMA – Bât. 470

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

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

Nom : Larmier

Prénom : Coline

e-mail : coline.larmier@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 23 47

Affiliation : DES/ISAS/DM2S/SERMA/LTSD

ou

Nom : Jinaphanh

Prénom : Alexis

e-mail : alexis.jinaphanh@cea.fr

Téléphone : 01 69 08 62 75

Affiliation : DES/ISAS/DM2S/SERMA/LTSD