

Titre du stage

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

Internship title

ANALYSIS OF CORRELATIONS AND FLUCTUATIONS IN KINETIC MONTE CARLO SIMULATIONS

Type de sujet / Topic type*

- *Développement de méthodes et de codes de calcul / Code development, simulation algorithms*

Contexte du stage

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 ces faits, la simulation Monte Carlo est considérée comme la méthode de référence pour la neutronique.

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**, ce qui représente un enjeu central pour la sûreté des installations nucléaires. 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 CEA/Saclay.

Internship context

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.

Description du sujet du stage

Dans le cadre de ce stage, 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, le

travail de stage s'articulera autour de l'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 de ces mécanismes est indispensable afin de pouvoir garantir la fiabilité des incertitudes statistiques estimées dans les calculs Monte-Carlo cinétiques. Un focus particulier concernera les effets non-linéaires des **rétroactions physiques** sur l'évolution temporelle de la population neutronique. Les retombées de ce travail devraient assurer une percée majeure pour les méthodes Monte-Carlo cinétiques.

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 d'outils de simulation numérique pour l'analyse de la variance et des corrélations (moments croisés et fonctions « à deux points » en espace et en temps), à l'aide d'un code de transport Monte-Carlo cinétique simplifié.

Internship topic description

In the framework of this internship, 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 internship will be structured around the 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 to preserve the reliability of the statistical uncertainty estimates of kinetic Monte Carlo calculations. Special emphasis will be given to the case where the temporal evolution of the neutron population is coupled to the nonlinear **physical feedbacks** mechanisms. The outcome of this investigation will represent a major advance in the domain of time-dependent Monte Carlo simulation.

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 numerical methods for the analysis of the variance and the correlations ("two-point" correlation functions in space and time), using a simplified kinetic Monte Carlo transport code.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- Lux, L. Koblinger, Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations, CRC PRes, 1991.
- Pázsit, L. Pál, Neutron Fluctuations: A Treatise on the Physics of Branching Processes, Elsevier, Oxford (2008)
- M. Faucher, D. Mancusi, A. Zoia, New kinetic simulation capabilities for Tripoli-4: methods and applications, Ann. Nucl. Energy 120, 74-88 (2018).
- C. De Mulatier, E. Dumonteil, A. Rosso, A. Zoia, The critical catastrophe revisited, J. Stat. Mech., 2015 (8) (2015), p. P08021
- B. L. Sjenitzer, J. E. Hoogenboom, Dynamic Monte Carlo method for nuclear reactor kinetics calculations, Nucl. Sci. Eng., 175 (2013), pp. 94-107
- D. Mancusi, A. Zoia, Zero-variance schemes for kinetic Monte Carlo simulations, Eur. Phys. J. Plus (2020) 135:401

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

Non/No

Profil du stagiaire

Master 2 ou 3^{ème} année école d'ingénieur : connaissances en informatique scientifique (C++, environnement Linux, Python, LaTeX) et en physique des réacteurs

Applicant profile

Master of Science or Engineering diploma : knowledge in scientific computing (C++, Linux OS, Python, LaTeX) and reactor physics

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 39 79
Affiliation : DES/ISAS/DM2S/SERMA/LTSD

Nom : ZOIA
Prénom : Andrea
e-mail : andrea.zoia@cea.fr
Téléphone : +33(0)1 69 08 89 49
Affiliation : DES/ISAS/DM2S/SERMA/LTSD