

Titre du stage
ANALYSE DE VARIANTES DE L'ALGORITHME « DELTA TRACKING » POUR LES SIMULATIONS MONTE-CARLO DE TRANSPORT DE PARTICULES
Internship title
AN INVESTIGATION OF VARIATIONS ON THE “DELTA TRACKING” ALGORITHM FOR MONTE CARLO PARTICLE TRANSPORT SIMULATIONS
Type de sujet / Topic type
DEVELOPPEMENT DE METHODES ET DE CODES DE CALCUL / DEVELOPMENT OF METHODS AND COMPUTATIONAL CODES
Contexte du stage

Les codes Monte Carlo pour la neutronique simulent les déplacements des particules en divisant le système d'intérêt en « cellules », chacune avec ses propres compositions matérielles. Ces propriétés déterminent la section efficace totale dans la cellule, et donc la distance à laquelle une particule est susceptible de se déplacer avant d'effectuer une collision. Traditionnellement, les codes Monte-Carlo utilisent le « ray tracing ». On échantillonne une distance à la collision avec la section efficace totale. Si elle est inférieure à la distance à la frontière de la cellule, dans la direction de vol, la particule subit une collision. Sinon, la particule est déplacée à la frontière, la section efficace totale est mise à jour (avec les propriétés de la cellule adjacente, où se trouve maintenant la particule), et le processus recommence. Ce processus nécessite de calculer l'intersection de la trajectoire avec la frontière de la cellule pour chaque vol, ce qui peut être coûteux.

Internship context

Monte Carlo codes for neutral particle transport simulate the movement of particles by dividing the system of interest into “cells”, each with its own material properties. These properties affect the total cross section in the cell, determining how far a particle is likely to move before having a collision. Traditionally, ray tracing is used to sample the distance to a collision. With ray tracing, a distance to collision is sampled from the total cross section. This distance is compared to the distance to the boundary of the cell in the direction of flight of the particle. If the distance to collision is shorter, the particle undergoes a collision. If not, the particle is moved to the boundary of the cell, the total cross section is updated to that of the adjacent cell where the particle now is, and the process begins again. This process requires calculating the boundary intersection with the cell for each flight, which can be computationally expensive.

Description du sujet du stage

Une alternative au « ray tracing » est le « delta tracking ». Dans cette méthode, une section efficace majorante (qui doit être supérieure à toutes les cellules présentes dans le système) est utilisée pour échantillonner la distance jusqu'à un site de collision potentiel. Au site potentiel, il existe une probabilité d'avoir une collision réelle (la particule subit alors une interaction), et une probabilité d'une collision virtuelle (l'énergie et la direction restent alors inchangées). Dans ce cas, un nouveau site de collision potentiel est échantillonné avec la section efficace majorante et le processus se poursuit jusqu'à ce qu'une collision réelle soit échantillonnée [1]. La méthode du « delta tracking » permet d'éviter les calculs des intersections de frontière. La probabilité d'avoir une collision réelle est le rapport entre la section efficace totale au site potentiel et la section efficace majorante. L'inconvénient du delta tracking est que la section efficace majorante peut être beaucoup plus grande que la section efficace totale, induisant ainsi de nombreuses collisions virtuelles, diminuant l'efficacité de l'algorithme [2].

Le stage comprendra deux parties. Tout d'abord, le stagiaire étudiera la possibilité d'utiliser une méthode hybride de ray tracing / delta tracking. Cette méthode déterminerait la section efficace majorante en prenant la plus grande section efficace le long de la direction de vol de la particule. Lemaire et al. ont montré [4] que cette méthode devrait entraîner moins de collisions virtuelles, améliorant l'efficacité de l'algorithme. La détermination

de la section majorante de cette manière nécessite le calcul de toutes les croisées de surfaces le long d'une trajectoire, ce qui engendre un coût computationnel élevé. Toutefois, le calcul des croisées facilite l'utilisation d'un estimateur de type « corde » (track length), qui est plus efficace que l'estimateur de collision traditionnellement utilisé avec le delta tracking. Le but du stage sera d'étudier les avantages et les inconvénients d'une telle méthode hybride, ainsi que l'efficacité qui en résulte lorsqu'elle est mise en œuvre dans un code de transport Monte Carlo.

La deuxième partie de ce stage (si le temps le permet) sera d'étudier les stratégies de « régionalisation » optimales pour améliorer l'efficacité du delta tracking. Guo et Chen ont montré que la division d'une géométrie en plusieurs régions, chacune avec sa propre section majorante, améliore l'efficacité du delta tracking [3]. Ceci réduit les effets d'un absorbeur fort localisé en augmentant seulement la section efficace majorante dans la région où se trouve ce matériau. La stratégie optimale de partition n'a pas encore été explorée. Deux options que l'on pourrait envisager sont la voxelisation et les arbres k-d, où la géométrie est partitionnée récursivement. Ces possibilités seront étudiées pour mieux comprendre leurs effets sur l'efficacité, ainsi que sur la consommation de mémoire.

Internship topic description

An alternative to ray tracing is delta tracking. In this method, a majorant cross section (which must be larger than the total cross section from all of the cells present in the system) is used to sample the distance to a tentative collision site (which may be in the originating cell). At the site, there is a probability of having a real collision, whereupon the particle has an interaction, and a probability of a virtual collision, whereupon the particle energy and direction are left unchanged. A new tentative collision site is sampled with the majorant cross section in the case of a virtual collision, and the process continues until a real collision is sampled [1]. This method does not need to calculate boundary intersections. The probability of having a real collision, however, is the ratio between the total cross section at the tentative collision site, and the majorant cross section. Therefore, the drawback of delta tracking is that the majorant cross section may be much larger than the total cross section in a region, causing many virtual collisions to occur, decreasing efficiency [2].

The internship will consist of two portions. First, the intern will investigate the possibility of using a hybrid ray tracing/delta tracking method for moving particles. This method would determine the majorant cross section by taking the largest cross section along the direction of flight of the particle, instead of the global majorant. Lemaire et al. have shown [4] that this method of determining a majorant should result in fewer virtual collisions, and an increased efficiency. Determining the majorant in such a manner requires computing all boundary crossings along a particle flight path, which adds to the computational expense of each flight. Computing the surface crossings, however, facilitates the use of a track-length estimator, which is more efficient than the collision estimator traditionally used with delta tracking. The goal of the internship will be to investigate the advantages and drawbacks of such a method, as well as its resulting efficiency when implemented in a Monte Carlo transport code.

The second portion of this internship (should time permit it), will be to investigate the optimal regionalization strategies for improving the efficiency of delta tracking. Guo and Chen have shown that dividing a geometry into multiple regions, each with their own majorant cross section, improves the efficiency of delta tracking [3]. This reduces the effects of a localized heavy absorber by only increasing the majorant cross section in the region where that material is found, leaving the majorant of other regions unchanged. The best way to divide a system into these regions however, has yet to be explored. Two options that one could consider are voxelization and k-d trees, where the geometry is recursively split into sections. These possibilities will be investigated, to better understand their effects on efficiency, and also memory consumption.

Bibliographie - Références / Bibliography - References

- [1] J. Leppänen, "On the use of delta-tracking and the collision flux estimator in the Serpent 2 Monte Carlo particle transport code," *Ann Nucl Energy*, vol. 105, pp. 161–167, 2017, doi: 10.1016/j.anucene.2017.03.006.
- [2] J. Leppänen, "Performance of Woodcock delta-tracking in lattice physics applications using the Serpent Monte Carlo reactor physics burnup calculation code," *Ann Nucl Energy*, vol. 37, no. 5, pp. 715–722, 2010, doi: 10.1016/j.anucene.2010.01.011.
- [3] Q. Guo and Z. Chen, "Multi-Regional Delta-Tracking Method for Neutron Transport Tracking in Monte Carlo Criticality Calculation," *Sustainability-basel*, vol. 10, no. 7, p. 2272, 2018, doi: 10.3390/su10072272.
- [4] V. Lemaire, M. Thieullen, and N. Thomas, "Exact Simulation of the Jump Times of a Class of Piecewise Deterministic Markov Processes," *J Sci Comput*, vol. 75, no. 3, pp. 1776–1807, 2018, doi: 10.1007/s10915-017-0607-4.

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, physique, ou mathématiques. Une compréhension des méthodes de calcul scientifique de base est recommandée. Connaissance de C++ et Python requise.

Applicant profile

Master student in 2nd or 3rd year, studying engineering, physics, or mathematics. An understanding of basic scientific computing methods is recommended. Knowledge of C++ and Python required.

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 :

Prénom :

e-mail :

Téléphone :

Affiliation : DES/ISAS/DM2S/SERMA/LTSD