

Titre du stage**DÉVELOPPEMENT DU TRAITEMENT DE LA DIFFUSION DES NEUTRONS DU DOMAINE THERMIQUE DANS LE CODE MONTE-CARLO DE TRANSPORT DE PARTICULES PATMOS****Internship title****DEVELOPMENT OF THERMAL NEUTRON SCATTERING TREATMENT IN THE MONTE CARLO PARTICLE TRANSPORT CODE PATMOS****Type de sujet / Topic type***

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

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]. Récemment, les lois d'échantillonnage permettant de modéliser la physique des neutrons en fonction des données nucléaires (sections efficaces microscopiques, lois de renvoi énergétique et angulaire, notamment) ont été implémentées dans PATMOS, dans la limite du modèle dit du « gaz libre ». Cette implémentation a déjà été vérifiée dans le cadre d'un précédent stage. Lors de cette étape, plus de 5000 configurations ont été testées pour un benchmark simple (sphère contenant un seul isotope, irradiée par une source ponctuelle, isotrope et mono-énergétique) : les résultats produits par PATMOS et par d'autres codes Monte-Carlo de référence (tels que TRIPOLI-4® [2] et OpenMC [3]) ont ensuite été comparés entre eux à l'aide de tests statistiques. Ce travail a permis de valider l'implémentation du modèle du gaz libre dans PATMOS. Néanmoins, afin d'améliorer la modélisation de la physique des neutrons, on souhaite munir le code de la fonctionnalité suivante : le traitement de la diffusion dans le domaine thermique, avec prise en compte des effets dus aux structures moléculaires de la matière.

Internship context

The PATMOS mini-app is a prototype ("mini-app") of a massively parallel Monte Carlo particle transport code, developed at CEA in order to conceive alternative algorithms for novel HPC architectures [1]. Recently, the sampling laws for the modelisation of neutron physics as a function of nuclear data (namely microscopic cross sections, angle/energy distributions) have been implemented into PATMOS, within the so-called « free-gas » model. This implementation has been verified in the context of a previous internship. During this preliminary work, more than 5000 configurations have been tested for a simple benchmark (sphere filled with a single isotope, irradiated by a point, isotropic, mono-energy source): the results obtained with PATMOS and with other reference Monte Carlo codes (such as TRIPOLI-4® [2] and OpenMC [3]) have then been compared by resorting to statistical tests. This work has allowed validating the implementation of the free-gas model in PATMOS. Nevertheless, in order to improve the neutron physics modeling, we would like to add the following feature to the code: the thermal neutron scattering treatment, including the molecular bonding effects.

Description du sujet du stage

Les collisions entre les neutrons dits « thermiques » (c'est-à-dire à une énergie inférieure à quelques électronvolts) et les noyaux sont affectées par l'agitation thermique de ces derniers et, dans certains cas, par la présence d'autres noyaux environnants. Dans le modèle du gaz libre, les effets de liaisons chimiques et de structure cristalline sont négligés. Le traitement de la diffusion dans le domaine thermique consiste au contraire

à les prendre en compte.

Ces effets peuvent être modélisés à l'aide d'une représentation complète fournie par les données nucléaires : les tables thermiques $S(\alpha, \beta)$. Dans la plupart des bibliothèques de données nucléaires modernes, telles que l'europpéenne JEFF3.1.1 ou l'américaine ENDF/B-VII, les tables thermiques $S(\alpha, \beta)$ ne sont disponibles que pour quelques isotopes : l'hydrogène lié à l'oxygène dans l'eau, le carbone dans la phase graphite, le béryllium métallique, ou encore l'uranium dans les mélanges céramiques de type UOx. Ces données nucléaires spécifiques au traitement du domaine thermique peuvent ensuite être utilisées pour l'échantillonnage et le traitement d'une collision remplaçant la réaction élastique du modèle du gaz libre (réaction identifiée par le code MT=2 selon le format standard ENDF pour les données nucléaires). Dans ce sujet de stage, on propose au candidat d'implémenter l'échantillonnage des tables thermiques au sein du code PATMOS. Plusieurs sous-événements sont possibles dans le cadre de cette collision : il peut s'agir d'une diffusion élastique ou d'une diffusion inélastique incohérente. Les sections efficaces correspondantes, qui permettent de déterminer la probabilité d'occurrence d'un événement ou de l'autre à une énergie incidente donnée, sont fournies par les données nucléaires. Les lois de renvoi en angle et énergie du neutron diffusé sont également fournies par les données $S(\alpha, \beta)$: distribution de l'angle de sortie pour la diffusion élastique, distribution couplée en angle et en énergie pour la diffusion inélastique. Le langage de programmation du code PATMOS, dans lequel le stagiaire devra implémenter le traitement thermique, est le C++. De plus, le stagiaire pourra être amené à utiliser une routine existante, écrite en Python, permettant d'interfacer les données nucléaires (sous format ACE) et le code PATMOS.

La vérification préliminaire de l'implémentation pourra s'appuyer sur l'environnement de test préalablement développé pour la validation du modèle du gaz libre, pour la comparaison des résultats obtenus avec PATMOS et d'autres codes de transport Monte-Carlo (TRIPOLI-4[®] [2] et éventuellement OpenMC [3]) dans le cadre d'un benchmark simple, pour quelques isotopes. Si le temps le permet, des configurations de type réacteur ou maquette critique seront également examinées.

Internship topic description

Collisions between so-called "thermal" neutrons (that is to say at an energy of less than a few electronvolts) and nuclei are affected by the thermal agitation of the latter and, in some cases, by the presence of other surrounding nuclei. In the free gas model, the effects of chemical bonds and crystal structure are neglected. The treatment of diffusion in the thermal domain consists, on the contrary, in taking them into account.

These effects can be modeled using a complete representation provided by nuclear data: the thermal tables $S(\alpha, \beta)$. In most modern nuclear data libraries, such as the European JEFF3.1.1 or the American ENDF/B-VII, the thermal tables $S(\alpha, \beta)$ are only available for a few isotopes: e.g. hydrogen bound to oxygen in water, carbon in the graphite phase, metallic beryllium, or uranium in UOx type ceramic mixtures. These tables specific to the treatment of the thermal domain can then be used for the sampling and the treatment of a collision replacing the elastic reaction of the free gas model (reaction identified by the code MT = 2 according to the standard ENDF format for the nuclear data). In this internship, the candidate will implement the sampling of the thermal tables within the PATMOS code. Several sub-events are possible within the framework of this collision: it can be an elastic scattering or an incoherent inelastic scattering. The corresponding cross sections, which make it possible to determine the probability of occurrence of one event or the other at a given incident energy, are provided by nuclear data. The laws of deviation in angle and energy of the scattered neutron are also provided by the $S(\alpha, \beta)$ tables: distribution of the exit angle for elastic scattering, coupled angle and energy distribution for inelastic scattering. The programming language of the PATMOS code, in which the student will have to implement the thermal scattering treatment, is C++. In addition, the student may use an existing routine, written in Python, to link the nuclear data (in ACE format) and the PATMOS code.

The preliminary verification of the implementation will be based on the test environment previously developed for the validation of the free gas model, for the comparison of the results obtained with PATMOS and other



Année académique / Academic year 2021-2022

Monte-Carlo stochastic transport codes (TRIPOLI-4[®] [2] and possibly OpenMC [3]) as part of a simple benchmark, for a few isotopes. If time permits, reactor or critical mock-up type configurations will also be considered.

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).

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 : +33(0)1 69 08 23 47

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