

**Sujet de stage SERMA / SERMA internship topic N° 1 – Laboratoire/Laboratory : LPEC**

**Titre du stage**

**VALIDATION DE CHAINES ISOTOPIQUES REDUITES PAR LA FORMULATION ADJOINTE DU PROBLEME D'EVOLUTION DE BATEMAN**

**Internship title**

**VALIDATION OF REDUCED NUCLIDE CHAINES BY THE ADJOINT FORMULATION OF THE BATEMAN EQUATIONS**

**Type de sujet / Topic type**

- Vérification et validation de méthodes et de codes de calcul / Verification and validation of methods and computational codes
- Développement de méthodes et de codes de calcul / Methods and computational codes development

**Contexte du stage**

Le Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliqués (SERMA) du Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) développe des logiciels scientifiques et des méthodes de calcul dédiés à la détermination des grandeurs physiques d'intérêt pour la simulation des réacteurs et des environnements exposés à des irradiations ionisantes, afin d'assurer la sûreté et le fonctionnement correct des installations.

Suite aux réactions nucléaires induites par la fluence de particules subatomiques, l'abondance isotopique des éléments sous rayonnement change dans le temps. Ce phénomène bien connu en physique nucléaire est décrit par le modèle mathématique de Bateman, constituant un système d'équations non-linéaire de premier ordre dans le temps. Ce modèle utilise des chaînes d'évolution détaillées décrivant les relations de filiation entre les isotopes, compte tenu de leur position dans l'espace. Des chaînes d'évolution très complexes peuvent être requises dans certaines situations pour reproduire exactement les activités mesurées. La complexité des chaînes affecte en général les performances des calculs lorsque le nombre de milieux évoluant qui résultent de la discrétisation spatiale du problème est important. Un compromis permettant d'éviter un temps de calcul prohibitif serait, pour un milieu évoluant donné, de se limiter aux seuls isotopes les plus importants pendant l'évolution. L'élaboration de ces chaînes d'évolution ciblées est donc pour lui-même un problème spécifique au cas physique analysé.

**Internship context**

The SERMA unit (Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliqués) of CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique) based in Saclay, France, develops scientific computer codes and mathematical methods for the simulation of nuclear reactors and physical problems under radiation exposure.

Because of nuclear reactions, the isotopic abundance of the elements constituting the target medium of an incoming particle flow changes over time. This is the well-known phenomenon in nuclear physics described by the Bateman's mathematical model, which shows a non-linear system of first-order differential equations in time. This model needs accurate depletion chains, specifying the production and removal channels by decay relationships among the different isotopes. Complex depletion chains with many nuclides may be necessary in given problems to reproduce successfully the measured activities. In general, the denser the chains will be, i.e. tracking the evolution of many isotopes, the longer the calculations to compute their nuclide concentrations up to a final time. Hence, a compromise in the number of retained isotopes for the chain is necessary to achieve the target accuracy. It follows that the production of the reduced depletion chains is a case-dependent problem.

**Description du sujet du stage**

Afin d'identifier les isotopes importants (au regard de la grandeur physique d'intérêt) et les voies conduisant à leurs formations, ce stage se concentre sur la formulation du problème adjoint à celui proposé par Bateman avec comme objectif de préciser le concept d'importance des isotopes évoluant. L'objectif du travail est d'acquérir et d'approfondir les connaissances dans le problème dual d'évolution, recherchant l'évidence théorique dans des cas simples d'études disponibles dans la littérature. Ce stage se construit sur des premiers travaux réalisés en 2019. Un sujet de thèse est aussi proposé pour

l'année 2020, en continuation de ces travaux.

Le travail est donc structuré selon les actions ordonnées suivantes:

- Revue de la littérature et reprise des travaux existants
- Étude théorique des formulations directe et adjointes
- Étude de validation des cas tests simplifiés
- Analyse des résultats
- Préparation du rapport final de stage

### Internship topic description

This internship focuses on the formulation of the adjoint problem of the Bateman equations, with the goal of defining the role of the isotopic importance function. In particular, this work addresses the theory of the dual formulation of the isotopic evolution and verifies its conclusion on simple case study. This work continues a former student internship, offering the possibility to pursue with a PhD program starting in 2020.

Internship work plan:

- literature review and retrieval of the existing work
- theoretical derivation of the adjoint formulation
- validation of simple case studies
- analysis of results
- preparation of the final report

### Bibliographie - Références / Bibliography - References

Chiba et Al. *Important fission product nuclides identification method for simplified burnup chain construction*, Physor 2014. Journal of nuclear science and technology, 52(7-8), 953-960 (2015).  
 Stripling, Hayes Franklin, *Adjoint-based uncertainty quantification and sensitivity analysis for reactor depletion calculations*, PhD thesis (2013).  
 Aliberti et Al., *Nuclear data sensitivity, uncertainty and target accuracy assessment for future nuclear systems*, Annals of Nuclear Energy, Elsevier, vol. 33, nb. 8, 700—733 (2006).  
 Williams, Mark Lane, *Development of depletion perturbation theory for coupled neutron/nuclide fields*, Nuclear Science and Engineering, Taylor and Francis, vol. 70, nb. 1, 20—36 (1979).  
 Williams, Mark Lane, *Perturbation and sensitivity theory for reactor burnup analysis*, Oak Ridge National Lab., TN (USA) (1979).  
 Mitani et Al., *A method of the sensitivity analysis of build-up and decay of actinides*, Japan Atomic Energy Research Inst. (1977).

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

Oui/Yes

### Profil du stagiaire / Applicant profile

Master 2 ou 3ème année d'école d'ingénieur – connaissances en informatique scientifique, en physique des réacteurs et en génie atomique requises  
 Master program in nuclear engineering and reactor physics, with skills in computational science

- fundamentals in reactor physics and reactor analysis
- programming (Python, Bash)
- technical editing (LaTeX)



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

#### Durée du stage / Internship duration

Mois / months : 6

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

Nom : Tomatis  
Prénom : Daniele  
e-mail : [daniele.tomatis@cea.fr](mailto:daniele.tomatis@cea.fr)  
Téléphone : +33(0)1 69 08 25 26  
Affiliation : DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC