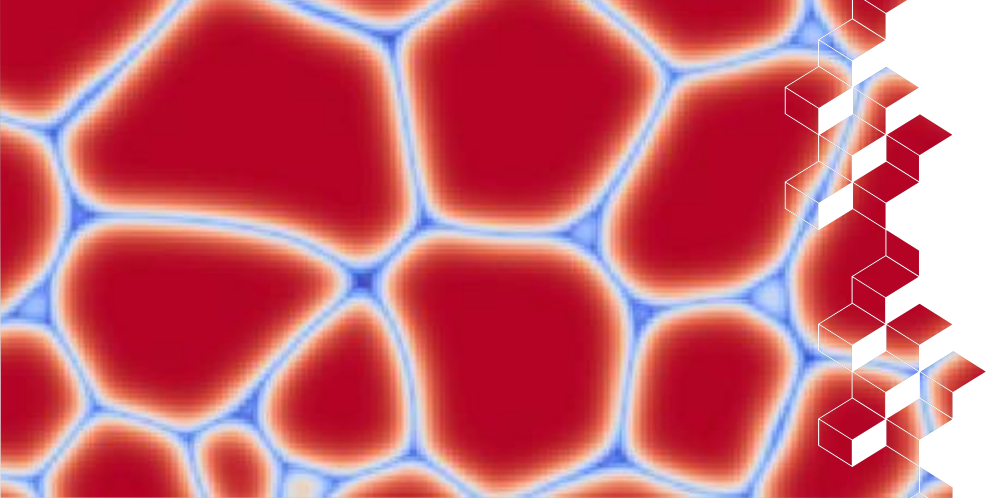


Modélisation multiéchelle des gaz de fission pour un jumeau numérique d'expériences sur les combustibles nucléaires

DEC/SESC/LM2C

Dans les réacteurs nucléaires, le comportement du combustible dépend de nombreux phénomènes physiques qui se produisent à l'échelle microscopique, de l'atome jusqu'aux grains qui constituent le matériau. Ce stage vise à étudier certains de ces phénomènes liés aux gaz de fission à l'aide de méthodes de simulation numérique, afin de mieux comprendre et modéliser leurs conséquences à l'échelle du réacteur.

Contexte

L'énergie nucléaire contribue à la décarbonation de la production d'électricité et devrait voir son rôle se renforcer dans les prochaines décennies. Dans ce contexte, une meilleure utilisation des ressources passe notamment par une connaissance précise du comportement du combustible en réacteur, en particulier du dioxyde d'uranium (UO_2), le plus répandu.

Les gaz de fission (xénon, krypton) jouent un rôle important dans ce comportement. Très peu solubles dans l'UO_2, ils précipitent sous forme de bulles nanométriques à l'intérieur des grains, et une fraction diffuse vers les joints de grains, où des bulles plus grandes peuvent s'interconnecter et conduire au relâchement du gaz. Ces mécanismes contribuent au gonflement du combustible et peuvent limiter la durée de vie de l'élément combustible en réacteur. Des expériences d'irradiation et de post-irradiation permettent de mesurer et de comprendre ces phénomènes. La reproduction de ces expériences par la simulation numérique aide à en interpréter les résultats, à analyser les phénomènes physiques fondamentaux moteurs du comportement observé et à extrapoler à d'autres conditions telles que des situations accidentelles à prévenir.

Objectifs du stage

Le/la stagiaire participera au développement du logiciel Inferno, qui simule l'évolution de la microstructure du combustible en vue de constituer un jumeau numérique d'expériences sur échantillons irradiés. Il s'agira d'enrichir le modèle physique du code par des études multiéchelles, en priorité pour le comportement du gaz à l'intérieur des grains d'UO_2.

Les missions

- Simuler par la méthode du champ de phase l'évolution des bulles de gaz dans l'UO_2, confronter les résultats aux données expérimentales et tester différentes hypothèses de modélisation.
- Effectuer des calculs à plus petite échelle (*rate theory*, dynamique moléculaire) afin d'estimer certains paramètres d'entrée du modèle champ de phase, en particulier ceux qui déterminent la quantité de gaz atteignant les joints de grains.
- Implémenter dans le code Inferno le paramètrage améliorés grâce aux études effectuées.

Compétences à acquérir

- Mise en œuvre de méthodes de simulation numérique à différentes échelles.
- Connaissance des mécanismes physiques régissant le comportement du combustible sous irradiation.
- Démarche scientifique, de la formulation d'hypothèses à leur confrontation avec l'expérience.
- Développement en équipe d'un logiciel scientifique en Python, avec gestion de versions (Git) et tests.

Ce stage permettra de participer à des travaux de recherche sur le combustible nucléaire et d'acquérir des compétences en physique des matériaux, en simulation numérique et en développement logiciel.

Formation souhaitée :

Physique du solide
Physique numérique
Science des matériaux
Mécanique des matériaux

Durée du stage :

6 mois (stage de fin d'études)

Méthode/logiciel(s):

Champ de phase, *rate theory*, dynamique moléculaire
Codes : Inferno, Margaret, Sciantix, LAMMPS

Mots clés :

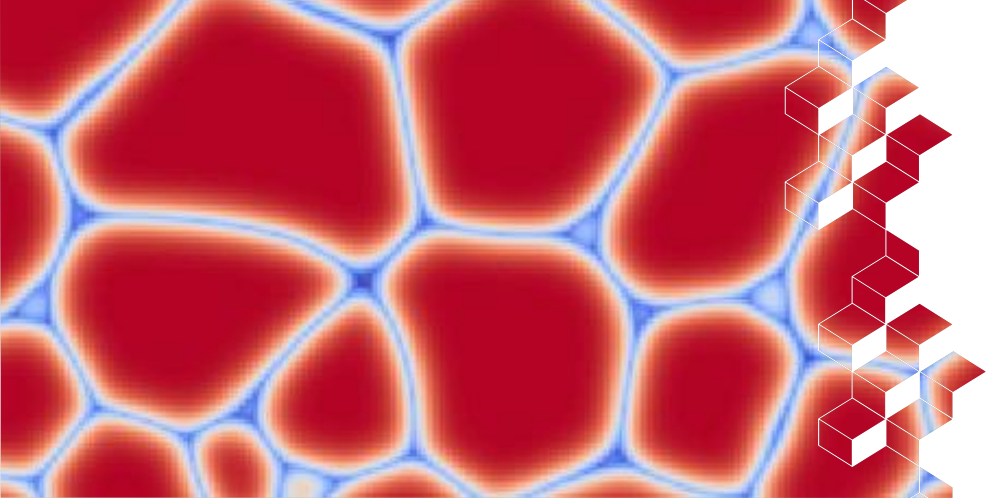
Combustibles nucléaires
Gaz de fission
Microstructure
Simulations numériques

Possibilité de thèse :

Oui

Contact :

MESSINA Luca
luca.messina@cea.fr



Multiscale modeling of fission gas behavior toward a digital twin of nuclear fuel experiments

DEC/SESC/LM2C

The in-reactor performance of nuclear fuel depends on numerous physical phenomena spanning several length scales, from atomic-level mechanisms to microstructural evolution at the grain scale. This internship involves the numerical simulation of the phenomena involving fission gas, with the aim of improving the understanding and prediction of their effects on macroscopic fuel behavior.

Context

Nuclear power contributes to decarbonizing electricity generation, and its role is expected to grow over the coming decades. In this context, a more efficient use of resources requires, among other things, a detailed understanding of in-reactor fuel behavior, especially that of uranium dioxide (UO_2), the most widely used fuel.

Fission gases (xenon and krypton) play an important role in this behavior. Owing to their very low solubility in UO_2, they precipitate as nanoscale bubbles within the grains, while a fraction diffuses to the grain boundaries, where larger bubbles can interconnect and lead to fission gas release. These mechanisms contribute to fuel swelling and can limit fuel rod lifetime in the reactor. Irradiation and post-irradiation experiments are used to measure and understand these phenomena. Reproducing these experiments numerically is important to interpret their results, investigate the fundamental physical processes driving the observed behavior, and extrapolate to other conditions, including accident scenarios relevant to reactor safety.

Internship objectives

The intern will contribute to the development of Inferno, a code that simulates the evolution of the fuel microstructure and, ultimately, to serve as a digital twin of experiments on irradiated samples. The goal of the internship is to improve its physical model through multiscale studies, with a primary focus on intragranular gas behavior in UO_2.

Tasks

- Run phase-field simulations of gas bubble evolution in UO_2, compare the results with experimental data, and test alternative modeling assumptions.
- Perform calculations at smaller length scales (rate theory, molecular dynamics) to estimate selected input parameters of the phase-field model, in particular those that control the amount of gas reaching the grain boundaries.
- Implement in Inferno the improved models and parameters from these studies.

What you'll learn

- Practical experience with numerical simulation methods at different length scales.
- Knowledge of the physical mechanisms governing fuel behavior under irradiation.
- A scientific approach, from formulating hypotheses to testing them against experiments.
- Collaborative development of scientific software in Python, with version control (Git) and testing.

This internship provides an opportunity to take part in nuclear fuel research and to develop skills in materials physics, numerical simulation, and software development.

Desired schooling :

Solid State Physics
Computational Physics
Materials Science
Mechanics of materials

Duration :

6 months (Master's thesis)

Method/software(s):

Phase field, rate theory (Inferno, Margaret, Sciantix)

Key words :

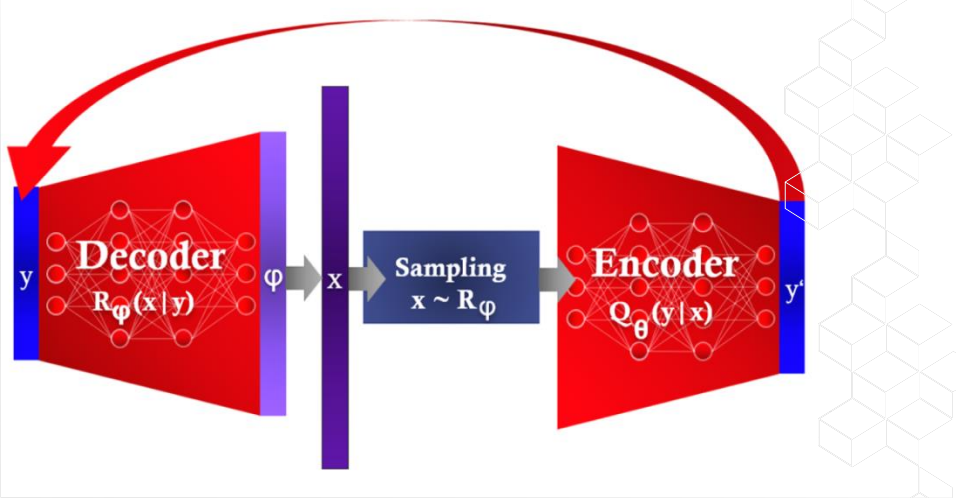
Computational Materials, Simulations, Nuclear fuels, Fission gases, Microstructure

Thesis opportunity :

Yes

Contact :

MESSINA Luca
luca.messina@cea.fr



Descripteurs atomiques pour la modélisation par intelligence artificielle des combustibles nucléaires

DEC/SESC/LM2C

Les propriétés de certains combustibles nucléaires dépendent de la façon dont les atomes se répartissent et se déplacent dans le cristal. Ce stage a pour objectif de contribuer au développement d'une méthode d'intelligence artificielle conçue dans notre laboratoire pour décrire cette répartition et ces déplacements atomiques, afin de mieux prédire les propriétés de ces matériaux.

Contexte

La simulation numérique aidée par l'intelligence artificielle occupe une place croissante dans l'étude des combustibles nucléaires, dont le comportement doit être prédit en fonctionnement normal comme en situation accidentelle. Certains d'entre eux, comme les oxydes mixtes d'uranium et de plutonium (MOX) ou les alliages uranium-molybdène (U-Mo), sont chimiquement désordonnés, c'est-à-dire que leurs éléments sont répartis de façon aléatoire dans le cristal.

Le calcul de leurs propriétés à l'échelle atomique complète les mesures expérimentales, mais il se heurte au très grand nombre d'arrangements possibles des atomes sur le réseau cristallin. La méthode d'intelligence générative PULSE[1,2] aide à contourner cette difficulté grâce à un modèle qui génère un petit nombre de configurations représentatives, dont elle déduit les propriétés thermodynamiques du matériau. Elle place toutefois chaque atome exactement sur un site du cristal, alors que l'agitation thermique et les différences de taille entre éléments l'en écartent. Décrire ces déplacements suppose notamment de représenter l'environnement de chaque atome sous une forme exploitable par le modèle, à l'aide de « descripteurs atomiques ». Ces descripteurs traduisent les positions cartésiennes des atomes et les relations chimiques et géométriques entre eux en vecteurs traitables par les réseaux de neurones.

Objectifs du stage

Le/la stagiaire participera aux travaux visant à étendre la méthode PULSE à la description des déplacements atomiques dans le MOX et les alliages U-Mo. Ils porteront en priorité sur la comparaison de descripteurs atomiques existants, appliqués à ces combustibles et à des systèmes modèles, en vue de proposer des pistes d'intégration dans PULSE.

Les missions

- Générer par dynamique moléculaire, à différentes températures, des configurations atomiques de ces systèmes, et analyser les déplacements des atomes autour de leurs positions d'équilibre.
- Tester en priorité plusieurs descripteurs atomiques existants, notamment leur sensibilité aux petits déplacements et la possibilité de reconstruire les positions atomiques à partir de ces descripteurs.
- Proposer différentes manières d'intégrer ces descripteurs dans PULSE et, le cas échéant, en tester certaines sur un système modèle.

Compétences à acquérir

- Méthodes de simulation à l'échelle atomique et d'apprentissage automatique appliquées aux matériaux.
- Connaissances en physique statistique et en physique des matériaux pour l'énergie nucléaire.
- Démarche scientifique, de l'étude bibliographique à l'analyse critique des résultats.
- Programmation scientifique en Python au sein d'une équipe de recherche.

Ce stage permettra de participer à des travaux de recherche à l'interface entre la physique des matériaux nucléaires et l'intelligence artificielle, et d'acquérir des compétences en simulation atomistique, en physique statistique et en apprentissage automatique.

(1) Karcz et al., Sci. Rep. 16, 14568 (2026).
(2) Bernard et al., arxiv:2605.28594.

Formation souhaitée :

Mathématiques appliquées
Physique numérique
Science des matériaux
Physique/chimie du solide

Durée du stage :

6 mois (stage de fin d'études)

Méthode/logiciel(s):

Dynamique moléculaire, autoencodeurs variationnels, descripteurs, PULSE, LAMMPS

Mots clés :

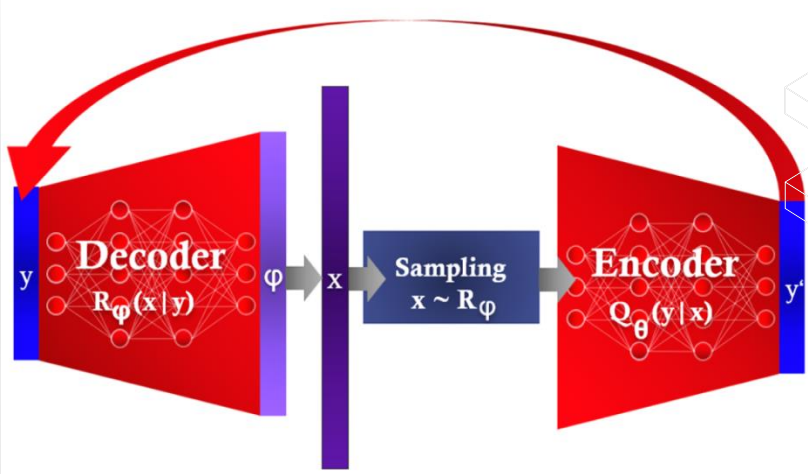
Intelligence artificielle
Combustibles nucléaires
Physique des matériaux
Simulations numériques

Possibilité de thèse :

Oui

Contact :

MESSINA Luca
luca.messina@cea.fr



Atomic descriptors for AI-driven modeling of nuclear fuels

DEC/SESC/LM2C

The properties of several nuclear fuels depend on how atoms are distributed over the crystal lattice and displaced from their lattice sites. This internship contributes to the development of an artificial intelligence method designed in our laboratory to describe this atomic distribution and these displacements, with the aim of improving the prediction of fuel properties.

Context

AI-assisted computer simulations are increasingly used to study nuclear fuels, whose behavior must be predicted under normal operating and accident conditions. Some of these fuels, such as uranium–plutonium mixed oxides (MOX) and uranium–molybdenum (U-Mo) alloys, are chemically disordered, with their elements randomly distributed over the lattice sites.

Atomic-scale calculations are a necessary complement to experimental measurements, but are limited by the combinatorial explosion of the possible atomic arrangements on the lattice. The generative AI PULSE method[1,2] helps overcome this limitation with a model that produces a small set of representative configurations, from which the thermodynamic properties of the material are derived. However, PULSE generates every atom on its equilibrium lattice site, whereas thermal vibrations and atomic size mismatch displace atoms from these positions. Describing these displacements requires representing the local environment of each atom by means of atomic descriptors, which encode atomic positions and their chemical and geometric relationships into vectors suitable as inputs for neural networks.

Internship objectives

The intern will contribute to extending the PULSE method to the description of atomic displacements in MOX and U-Mo alloys. The work will focus primarily on comparing existing atomic descriptors on these fuels and model systems and propose ways of integrating them into PULSE.

Tasks

- Generate atomic configurations of these systems at several temperatures using molecular dynamics, and analyze atomic displacements around equilibrium positions.
- Evaluate several existing descriptors, in particular their sensitivity to small displacements and whether atomic positions can be reconstructed from them.
- Propose different ways of integrating these descriptors into PULSE and, where appropriate, test some of them on a model system.

What you'll learn

- Atomic-scale simulation and machine learning methods applied to materials.
- Statistical physics and materials physics for nuclear energy applications.
- Scientific methodology, from literature review to critical analysis of results.
- Scientific programming in Python within a research team.

This internship provides experience in research at the interface between nuclear materials physics and artificial intelligence, including atomic-scale simulations, statistical physics, and machine learning.

(1) Karcz et al., Sci. Rep. 16, 14568 (2026).
(2) Bernard et al., arxiv:2605.28594.

Desired schooling :

Applied mathematics
Computational Physics
Solid state physics
Materials science

Duration :

6 months (Master's thesis)

Method/software(s):

Molecular dynamics, variational autoencoders, descriptors, PULSE, LAMMPS

Key words :

Artificial Intelligence
Nuclear Fuels
Computational Materials
Materials physics

Thesis opportunity :

Yes

Contact :

MESSINA Luca

luca.messina@cea.fr