



STAGE DE 1^{ÈRE} ANNÉE

Organigramme d'un code maquette existant et réalisation d'un développement pour le transport Monte Carlo des neutrons

Angel URIOT

24 mai 2019 — 29 juillet 2019

Bâtiment 470 • 91191 Gif-sur-Yvette

Tutrice (entreprise): -----
Tuteur (école): ------

Remerciements

Je remercie le centre CEA Paris-Saclay de m'avoir permis de réaliser ma première expérience en tant que stagiaire.

Je remercie toutes les personnes avec qui j'ai eu l'occasion de travailler pour les apports qu'elles m'ont fait.

Je souhaite également remercier -----, ------ et les autres stagiaires pour m'avoir accueilli agréablement.

Pour finir, j'adresse un grand merci à ma tutrice ----- pour avoir eu confiance en moi et mes compétences pour une mission de ce type malgré mon niveau actuel d'études, ainsi que pour toutes les compétences techniques et humaines qu'elle a su m'apporter.

C'était ma première expérience dans le domaine et ce fut un énorme plaisir d'avoir pu travailler avec eux.

Sommaire

I/ Présentation de l'entreprise

II/ Ma mission

- A. Compréhension d'un code existant et création d'une documentation
- B. Ajout de la fission
- C. Ajout d'une source modulable
- D. Ajout du mode multiple
- E. Résultats et impacts de ma mission

III/ Les apports du stage

- A. Les apports techniques
- B. Les apports méthodologiques
- C. Les apports humains

IV/ CV et démarches

- A. Curriculum Vitæ
- B. Lettre de motivation

I/ Présentation de l'entreprise

Le Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (ou C.E.A.) est un organisme public de recherche à caractère scientifique, technique et industriel.

Acteur majeur de la recherche, du développement et de l'innovation, le CEA intervient dans quatre domaines : la défense et la sécurité, les énergies bas carbone (nucléaire et renouvelables), la recherche technologique pour l'industrie et la recherche fondamentale (sciences de la matière et sciences de la vie). S'appuyant sur une capacité d'expertise reconnue, le CEA participe à la mise en place de projets de collaboration avec de nombreux partenaires académiques et industriels.

Reconnu comme un expert dans ses domaines de compétences, le CEA est pleinement inséré dans l'espace européen de la recherche et exerce une présence croissante au niveau international. C'est le deuxième déposant de brevets en Europe.

Le CEA a été créé après la seconde guerre mondiale, par le général de Gaulle qui était convaincu de la nécessité de fonder un organisme national consacré à l'énergie nucléaire nouvellement découverte. Frédéric Joliot se voit confier, à partir du 2 janvier 1946, le poste de haut-commissaire, chargé des questions scientifiques et techniques, alors que Raoul Dautry, premier Administrateur général du nouvel organisme, prend en main les questions administratives et financières. Ces deux figures emblématiques de la France de l'époque deviennent les deux premiers dirigeants du CEA.

La mission historique confiée au CEA a irrigué plusieurs domaines de recherche en lien direct ou indirect avec les sciences de l'atome. Aujourd'hui le nucléaire reste un sujet d'étude central du CEA. Mais pour accomplir sa mission, l'organisme a dû élargir le champ de ses recherches en physique, en chimie et en biologie et développer de nouvelles connaissances en microélectronique, dans les matériaux et les nouvelles technologies de l'énergie.

Depuis sa création, le CEA constitue donc un acteur majeur de la recherche, du développement et de l'innovation, au service de grands enjeux stratégiques et industriels de notre pays.

Aujourd'hui, le haut-commissaire du CEA est Patrick Landais nommé par Emmanuel Macron en 2019 (plus de détails dans la figure ci-dessous).



Figure 1 : Organigramme du CEA

Le CEA c'est:

- 5 milliards d'euros de budget
- 9 centres de recherche (plus de détails dans la figure ci-dessous)
- 15 942 techniciens, ingénieurs, chercheurs et collaborateurs en CDI
- 51 unités de recherche sous co-tutelle du CEA et de partenaires académiques
- 64 accords cadres en vigueur avec les universités et écoles
- 762 dépôts de brevets prioritaires en 2017
- 27 Equipex (équipements d'excellence)
- 33 Labex (laboratoires d'excellence)
- 3 Idex (initiative d'excellence)
- 204 start-up technologiques depuis 1972 dans le secteur des technologies innovantes
- plus de 600 partenaires industriels
- 424 projets européens en cours en 2017
- 30 pôles de compétitivité auxquels participe le CEA

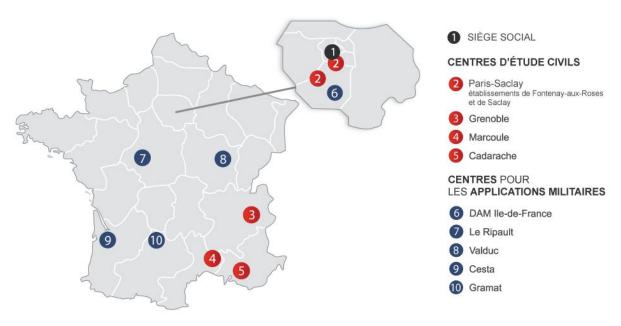


Figure 2: Les centres du CEA

J'ai fait mon stage au centre CEA Paris-Saclay, c'est le plus grand des dix centres de recherche du CEA.

Ce centre de recherche exerce ses activités dans les domaines de l'énergie nucléaire, des sciences du vivant, de la recherche fondamentale et appliquée en physique et en chimie, du climat et de l'environnement, des recherches appliquées dans de nombreux domaines technologiques. Il accueille le siège administratif du CEA.

Ce centre de recherche d'une superficie de 220 hectare est implanté sur le plateau de Saclay, dans le pôle scientifique et technologique Paris-Saclay. Il accueille chaque jour 8 000 personnes dont 5 400 salariés du CEA.

Je suis dans le Laboratoire de Transports Stochastique et Déterministe (ou LSTD) du SERMA (Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées) au sein de la DEN (Direction de l'Energie Nucléaire). Le domaine de la neutronique recouvre la physique du coeur des réacteurs nucléaires, la sûreté-criticité, la radioprotection et l'instrumentation nucléaire. Ces compétences sont capitalisées en produisant des logiciels de calcul qui sont ensuite utilisés pour réaliser des études innovantes. Ces logiciels traitent l'ensemble des problématiques relatives au transport déterministe et stochastique des neutrons et photons et à l'évolution temporelle isotopique des milieux dans lesquels des neutrons se propagent (plus de détails dans la figure ci-dessous).

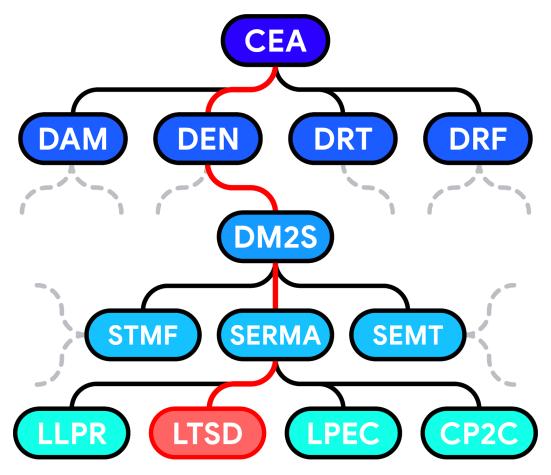


Figure 3 : Mon laboratoire au sein du CEA

II/ Ma mission

A. Compréhension d'un code existant et création d'une documentation

Ma mission initiale était de comprendre un code maquette écrit par un thésard, puis de réaliser une documentation détaillée du fonctionnement du programme. Le but était de pouvoir s'assurer qu'il n'y avait aucune erreur, de faciliter l'ajout de nouvelles fonctionnalités et de permettre à d'autres personnes de travailler dessus à l'avenir.

Mono Energetic Neutrons and Homogeneous Isotropic Reactions (ou MENHIR) est un code Monte Carlo de transport de neutrons en C++. Il simule le comportement de neutrons dans un milieu aux propriétés simplifiées.

Ce code est dit "Monte Carlo" par opposition à une autre approche pour le transport de neutrons : l'approche "déterministe". En Monte Carlo, toutes les particules sont simulées une par une et leurs réactions sont choisies en utilisant des probabilités. Je n'ai pas étudié la seconde approche.

Cette maquette est très simplifiée du point de vue de la physique : les neutrons ont tous la même énergie, les sections efficaces ne dépendent pas de l'énergie des neutrons, lors d'une diffusion, la nouvelle direction du neutron est tirée de façon équiprobable, seules deux réactions (diffusion et absorption) sont prises en compte, etc... Les résultats obtenus ne sont donc pas utilisables dans la réalité, nous pouvons par contre comparer plusieurs résultats du programme entre eux.

Le programme comprend trois "géométries", c'est-à-dire, trois types de milieux différents. J'en ai personnellement étudié deux : la première est une sphère ne contenant qu'un seul matériau et la deuxième est une sphère contenant plusieurs couches alternant entre deux matériaux.

Dans le programme, un matériau est défini par des "sections efficaces", il y a la section efficace totale et les sections efficaces de diffusion et d'absorption. Ce sont des nombres qui permettent de simuler le comportement des neutrons dans le milieu en calculant la probabilité qu'ils rencontrent un atome pendant leur trajectoire ainsi que les différentes réactions possibles lors d'une collision. Dans ce programme, seuls deux cas sont pris en compte et de manière simplifiée : la collision élastique (le neutron repart dans une direction aléatoire) et l'absorption (le neutron "disparaît").

Les "batchs" sont des paquets de particules simulées, la taille d'un batch est le nombre de particules créées et transportées par simulation, quand on fait plusieurs simulations (pour augmenter la précision en faisant la moyenne des résultats), on dit qu'on fait plusieurs batchs.

Au lancement du programme, nous pouvons donc paramétrer les sections efficaces, les propriétés de la géométrie mais aussi le nombre et la taille des batchs.

Pour chaque batch, le programme crée les particules au centre de la géométrie puis échantillonne leur trajectoire en fonction des sections efficaces. Autour de la géométrie se trouve une cible qui détecte le passage d'un neutron afin de calculer le "flux neutronique", c'est-à-dire, la quantité de neutrons qui passent pas la cible par rapport au nombre de neutrons créés initialement. Au final, le résultat Monte Carlo est une valeur moyenne du "score" avec son écart-type. Plus l'écart-type est petit, plus le résultat est précis.

Le programme contient deux modes :

Le premier, l'Analog, simule la trajectoire de toutes les particules du batch jusqu'à ce qu'elles soient absorbées. C'est une simulation analogue (naturelle).

Le second, l'AMS (Adaptive Multilevel Splitting), est plus complexe, c'est une méthode de réduction de variance, c'est-à-dire, permettant d'avoir un résultat plus précis (avec une variance plus faible) pour un même temps de calcul. Ce mode ajoute plusieurs options au lancement du programme, une valeur K et le mode de calcul de l'importance. L'importance est une valeur pour chaque particule, plus elle est élevée, plus cela veut dire que ses chances d'atteindre la cible sont élevées (j'ai personnellement étudié le mode qui calcule l'importance à partir de la distance qui sépare les particules de la cible). L'AMS commence par faire une simulation analogue, puis les particules sont triées selon leur importance croissante et les K particules ayant l'importance la plus faible sont supprimées. Ensuite, les particules supprimées sont dupliquées à l'aide de certaines trajectoires des particules conservées. Puis la fin de ces nouvelles trajectoires est échantillonnée jusqu'à absorption. Cela est répété jusqu'à ce que la k ème plus mauvaise particule atteigne le volume cible.

Le mode AMS est plus long que l'Analog car il y a plus d'étapes de calcul, mais il a l'avantage d'être plus précis et de trouver des résultats dans les cas où les particules n'atteignent jamais la cible en Analog.

Après avoir compris et vérifié le programme avec l'aide de ma tutrice de stage. J'ai réalisé une documentation d'une vingtaine de pages expliquant le fonctionnement des classes et des fonctions du programme, ainsi que la signification des différentes variables.

B. Ajout de la fission

Jusqu'à présent, MENHIR ne prenait en compte que deux réactions lors de la collision d'un neutron avec un atome : la diffusion (le neutron repart dans une direction aléatoire) et l'absorption (le neutron disparaît).

Après avoir entièrement compris le fonctionnement du programme, je devais faire un développement pour ajouter la fission. C'est-à-dire, faire en sorte que le programme prenne en compte la diffusion, l'absorption (non fissile) mais aussi la fission.

La fission nucléaire est le phénomène par lequel un noyau atomique lourd (c'est-à-dire, formé d'un grand nombre de nucléons comme l'uranium, le plutonium, etc...) est scindé en deux ou quelques nucléides plus légers. Cette réaction nucléaire s'accompagne de l'émission de neutrons et d'un dégagement d'énergie très important (≈ 200 MeV par atome fissionné).

Nous avons défini une variable *nu* correspondant au nombre de neutrons produits lors d'une fission que nous avons fixé à 2.

Lors d'une fission, le programme détruit le neutron incident et crée deux autres neutrons partant du point d'impact avec des directions équiprobables.

Donc après modification, nous pouvions donc choisir la section efficace de fission mais également dans quelle partie de la géométrie la fission est active.

Après cette modification, le programme est moins stable qu'avant car en choisissant une section efficace trop grande ou mise dans une trop grande partie de la géométrie, le nombre de neutrons peut augmenter de façon exponentielle, empêchant le programme de fonctionner. Il faut donc utiliser le programme avec une section efficace de fission suffisamment faible.

J'ai également modifié l'affichage pour que le nombre de particules et la valeur du flux des particules issues de fissions soient consultables par l'utilisateur.

C. Ajout d'une source modulable

Initialement, la source des neutrons dans MENHIR (c'est-à-dire, l'emplacement des neutrons avant de simuler leur déplacement) était toujours placée au point central de la géométrie.

J'ai donc modifié le programme pour que la source des neutrons puisse être dans n'importe quelle partie de la géométrie comme les différentes couches de la seconde géométrie par exemple.

D. Ajout du mode multiple

Je devais ensuite créer l'équivalent du mode AMS pour la fission, pour cela, j'ai créé un autre mode appelé "mode Multiple" qui effectue dans le même batch une simulation analogue avec la fission puis une simulation AMS sans fission.

Plus précisément, après la simulation analogue, j'ai fait en sorte que le programme conserve la position de chaque fission, puis il crée une source comprenant la source initiale plus les nouvelles sources créées à partir de la position des fissions. Puis une simulation AMS est faite avec ces sources.

Au final, le mode multiple semble bien estimer la source de fission et conserver les avantages de l'AMS, ce qui était le résultat escompté.

E. Résultats et impacts de ma mission

Excepté de rares erreurs dans des cas précis, ma modification du programme semble être une réussite, pour la fission, les résultats sont cohérents par rapport à ce qu'on pourrait s'attendre et le mode multiple que j'ai ajouté donne des résultats équivalents au mode Analog (la moyenne ne présente pas de biais). De plus, le mode Multiple semble très avantageux en terme de temps de calcul et de précision par rapport à l'Analog.

Ces résultats encourageants annoncent peut-être la création future d'un mode Multiple contenant de l'AMS dans TRIPOLI-4, le logiciel de transport de neutrons développé dans mon laboratoire.

III/ Les apports du stage

A. Les apports techniques

À l'issue de ce stage au CEA, j'ai appris l'existence et le fonctionnement de divers concepts dans différents domaines :

En informatique dans un premier temps, où j'ai appris à utiliser les classes en C++, avec les méthodes, les constructeurs, etc... J'ai également appris à séparer un programme en plusieurs fichiers différents, à utiliser Linux avec les différentes commandes du Shell et à créer des scripts en Bash pour programmer plusieurs lancements de MENHIR à la suite pendant mon absence. Enfin j'ai appris à utiliser Cmake pour compiler sans IDE. Ayant comme but d'aller en spécialité informatique en troisième année, ce stage m'aura permis de prendre de l'avance dans ce domaine par rapport à ce qu'on a vu en cours en première année.

J'ai aussi appris certains concepts physiques comme le flux neutronique, qui représente une quantité de neutrons passant à un endroit (par unité de temps). Mais également le principe de "section efficace" permettant de définir un matériau dans le domaine du transport de neutrons, en terme de probabilité d'interaction des neutrons avec les atomes de ce matériau.

En mathématiques j'ai appris le principe de poids statistique, en neutronique (Monte Carlo) c'est un coefficient pour chaque particule qui intervient lors de sa participation au score de la cible. On peut le modifier si on a aidé artificiellement le neutron à atteindre la cible comme en AMS par exemple. Mais également les différents échantillonnages aléatoires, qui consistent à utiliser une fonction de densité de probabilité et sa fonction de répartition associée. L'échantillonnage utilise d'abord une loi uniforme entre 0 et 1 puis on utilise la fonction réciproque de la fonction de répartition pour "tirer" l'événement à échantillonner, cette technique est utilisée deux fois dans MENHIR, pour calculer le trajet que va faire un neutron avant de rencontrer un atome mais aussi pour choisir le type d'interaction.

De façon générale, j'ai découvert le domaine du Monte Carlo en neutronique avec les principes de batchs, d'analogue, d'AMS, de score, etc... dont j'ignorais l'existence avant de faire ce stage.

B. Les apports méthodologiques

Ce stage en entreprise m'a également appris certaines méthodes de travail comme le fait de devoir présenter mon avancée chaque jour à ma tutrice de stage.

J'ai aussi appris le principe de test de non-régression qui consiste à faire des tests pour savoir si la partie initiale d'un programme fonctionne toujours comme avant, après avoir ajouté une fonctionnalité.

Enfin j'ai fait une petite présentation de mon travail et des mes tests devant des collègues de ma tutrice de stage afin de partager mes résultats. J'ai présenté le fonctionnement du programme et les ajouts que j'avais fait, ainsi que mes conclusions par rapport aux résultats trouvés.

C. Les apports humains

Le milieu professionnel de mon secteur au CEA était très agréable, les gens que j'ai rencontrés m'ont tous paru bienveillants et prêts à m'aider en cas de problème. J'étais dans une salle avec cinq autres stagiaires, ils étaient tous en dernière année d'école d'ingénieur ou de master, il y avait également des thésards dans les bureaux proches de nous. J'étais donc le moins qualifié des gens que je côtoyais et en les écoutant j'ai pu apprendre encore d'autres concepts dans le domaine de la neutronique en plus des connaissances nécessaires à ma mission.

Je pense avoir eu une bonne relation avec mes supérieurs, je n'ai côtoyé que ma tutrice de stage, que je voyais environ une fois par jour pour faire le point sur ce que j'avais fait et sur ce qu'il fallait faire par la suite. Elle m'a de nombreuses fois aidé lors d'éventuels problèmes avec le programme, Linux, ou certains concepts de mathématique ou de neutronique. Sans parler ses nombreuses explications sur le domaine de la neutronique au début du stage.

Ma seule autre expérience professionnelle était un job d'été à la mairie de ma ville dans le domaine du bâtiment, je devais aider des ouvriers à faire des travaux de rénovation dans des bâtiments publics. L'ambiance était totalement différente, que ce soit le sujet des discussions, la façon de parler, d'interagir avec les autres et avec moi. Le comportement des employés semble grandement changer en fonction de leur niveau et de leur domaine d'études.

J'ai trouvé le sujet de mon stage très intéressant et j'ai beaucoup apprécié travailler dans ce domaine avec les autres employés de ce secteur (ingénieurs chercheurs, secrétaires, stagiaires, thésards, etc...), cela m'encourage à continuer dans cette voie pour travailler dans un domaine similaire à l'avenir.

IV/ CV et démarches

A. Curriculum Vitæ

B. Lettre de motivation