

PROPOSITION de SUJET de THESE pour 2016

Amandine Marrel
DER, SESI, LEMS, F 13108 Saint Paul Lez Durance

Titre de la thèse

« Validation des modèles simplifiés par approches stochastiques : application aux études d'accidents graves pour les réacteurs génération IV »

PROBLEMATIQUE INDUSTRIELLE

Dans le cadre des études de préconception d'un prototype de réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium liquide (RNR-Na) de génération IV ASTRID (Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration), le CEA/DEN/DER/SESI étudie différentes familles de scénarios d'accidents graves. Pour cela, des outils de simulation numérique sont utilisés pour modéliser et prédire les phénomènes physiques mis en jeu. Ces outils logiciels prennent en entrée un grand nombre de paramètres caractéristiques du phénomène étudié. Ces paramètres peuvent être entachés d'une incertitude plus ou moins importante selon le degré de connaissance et de caractérisation du phénomène modélisé. Il est alors important de prendre en compte ces incertitudes et d'étudier, au travers d'analyses de sensibilité et d'études de propagation des incertitudes, comment elles se répercutent sur les sorties du simulateur (De Rocquigny et al. [2008], Iooss [2011]).

Des codes mécanistes complexes tels que les codes SIMMER ou SAS permettent de traiter et de coupler les phénomènes thermo-hydrauliques, neutroniques et mécaniques intervenant lors des différentes phases de l'accident, y compris dans des géométries tridimensionnelles. Cependant, chaque simulation de ces codes peut nécessiter un temps de calcul important, ce qui limite considérablement le nombre de simulations possibles. Pour pallier ce problème, le CEA a entrepris de développer des outils simplifiés simulant les phénomènes physiques de manière analytique (modèles 0D/1D), en parallèle des études menées avec les simulateurs complexes. Ces modèles simplifiés, plus rapides, permettent la réalisation d'un plus grand nombre de simulations. Des études statistiques de propagation des incertitudes et d'analyse de sensibilité peuvent ensuite être réalisées avec ces outils simplifiés. L'efficacité de ces nouveaux outils simplifiés et l'intérêt de la démarche statistique associée ont récemment été démontrés sur un transitoire accidentel particulier : le Bouchage Total Instantané d'un assemblage de cœur de réacteur RNR-Na (Marie et al. [2015], Marrel et al. [2015]). L'outil dédié à cet accident est désormais une aide à la conception du cœur d'ASTRID.

Cependant, ces modèles simplifiés sont une approximation des codes plus complexes, eux-mêmes étant le résultat d'une modélisation physique puis numérique des phénomènes physiques (avec les approximations et hypothèses inhérentes à ces modélisations successives). Dans le cadre de la validation des modèles simplifiés, il est alors important de contrôler et de quantifier l'erreur d'approximation de ces modèles. Il est tout aussi nécessaire de vérifier que ces modèles simplifiés respectent bien certaines hypothèses physiques et ce, dans l'ensemble du domaine de variation des paramètres incertains.

L'objectif de cette thèse est de proposer des méthodes statistiques innovantes en support à la validation des modèles simplifiés tels que ceux utilisés dans les études d'accidents graves pour les réacteurs génération IV. Les outils développés seront mis en œuvre sur des cas d'étude de transitoires accidentels. Ces applications constitueront un apport scientifique important pour démontrer l'intérêt des méthodes d'analyses d'incertitudes sur des cas industriels concrets.

ORGANISATION DES TRAVAUX DE RECHERCHE

Pour résoudre le problème de la validation des codes de calcul et répondre aux problématiques identifiées précédemment, on propose de s'intéresser successivement au cours de cette thèse aux thèmes de recherche suivants :

- **Développement d'outils de comparaison entre les sorties des codes simplifiés et les codes complexes.** La première étape consiste à identifier les variables de sorties d'intérêt des différents simulateurs : celles-ci peuvent être scalaires ou fonctionnelles (sorties temporelles par exemple). **L'objectif est de comparer les sorties des différents simulateurs pour s'assurer de la cohérence de leur prédiction et identifier d'éventuelles différences.** Pour cela, un premier diagnostic peut être réalisé en comparant la répartition, *i.e.* les distributions de probabilité, des variables de sorties lorsque l'on propage les incertitudes en entrée des simulateurs. Des tests statistiques d'adéquation adaptés au cadre multivarié pourront être mis en œuvre. Des outils de caractérisation et de visualisation des incertitudes pour des sorties fonctionnelles ont récemment été développés au cours d'une thèse au SESI (Nanty et al. [2015a]) et pourront être appliqués.

- **Evaluation de l'erreur entre les codes simplifiés et les codes complexes.** Une fois les variables de sortie identifiées et un premier diagnostic comparatif effectué, l'objectif sera ensuite de développer des stratégies pour choisir les points de comparaison entre les codes, dans le domaine de variation des paramètres incertains (choix des plans d'expériences initiaux, approche séquentielle pour choisir de nouveaux points...). **Cette étape pourra conduire à l'identification d'un domaine de validité du modèle simplifié** (Chevalier et al. [2014]). Elle pourra aussi permettre d'envisager si besoin des améliorations du modèle simplifié et un éventuel calage de certains de ses paramètres d'entrée pour réduire l'erreur avec le code complexe (calibration sous incertitudes, Bachoc et al. [2014]). A noter que les variables d'entrée incertaines peuvent être différentes entre les codes simplifiés et les codes complexes ; les méthodes proposées devront tenir compte de cette contrainte.

- **Modélisation de l'erreur résiduelle entre les codes simplifiés et les codes complexes.** A l'issue d'une étape d'apprentissage de l'erreur entre les codes, un modèle statistique pourra être ajusté sur cette erreur pour venir en support à l'utilisation et l'interprétation du modèle simplifié. Des techniques de krigeage multi-fidélité (Le Gratiet [2013]) pourront par exemple être envisagées. Si un domaine de validité des entrées a été identifié dans l'étape précédente, un échantillonnage adapté devra être proposé pour construire le métamodèle (échantillonnage *space-filling* dans un espace non hypercubique par exemple, Auffray et al. [2012] et Nanty et al. [2015b]).

- **Estimation de probabilités de respecter certaines hypothèses physiques.** L'objectif est de prendre en compte la connaissance *a priori* des phénomènes physiques pour assoir la confiance dans le modèle simplifié ou en détecter d'éventuelles lacunes ou limites. Dans un premier temps, il s'agit d'identifier, en collaboration étroite avec les physiciens, un certain nombre d'hypothèses que le modèle simplifié est sensé vérifier afin d'être fidèle à la réalité des phénomènes physiques modélisés. Ces hypothèses peuvent se traduire par des contraintes d'inégalité sur les variables de sortie (variables comprises dans un intervalle par exemple), des contraintes de monotonie par rapport à certaines variables d'entrée (une variable de sortie doit être croissante en fonction d'une variable d'entrée) ou encore par des influences et non-influences *a priori* de certaines variables d'entrée. Une fois ces hypothèses listées, l'objectif sera de développer des outils statistiques pour évaluer la probabilité que le code simplifié respecte ces différentes contraintes (ou hypothèses *a priori*). En plus des algorithmes stochastiques dédiés à l'estimation des faibles

probabilités (Canamela [2007], Zuniga et al. [2012]), on pourra s'appuyer sur de récents travaux liés à la prise en compte des contraintes d'inégalité des codes numériques (Da Veiga et Marrel [2012], [2015]). Concernant l'influence des variables d'entrée, les travaux relatifs à l'utilisation de mesures d'importance pour l'analyse de sensibilité (Da Veiga [2014], De Lozzo et Marrel [2015]) pourront être utilisés. Ces analyses de sensibilité devront d'ailleurs prendre en compte d'éventuelles contraintes sur les paramètres d'entrée (domaine de validité du modèle simplifié) et pourront être réalisées dans des zones d'intérêt de la sortie du modèle (zones où un critère de sûreté n'est plus respecté par exemple). Pour cela, des méthodes innovantes devront être proposées. A noter que la vérification de certaines des hypothèses données par avis d'expert est nécessaire à la validation des modèles simplifiés et d'autres, comme celles liées à l'influence *a priori* des variables, pourront induire des réflexions sur la pertinence du modèle simplifié et/ou la connaissance du phénomène modélisé.

APPLICATIONS INDUSTRIELLES

Une première application envisagée dans le cadre de la thèse est celle du Bouchage Total Instantané d'un assemblage combustible pour un réacteur RNR-Na. Un modèle simplifié, récemment développé au SESI (Marie et al. [2015], Marrel et al. [2015]), est disponible pour prédire ce transitoire accidentel et pourra être comparé à un modèle plus complexe basé sur le logiciel SIMMER qui permet de coupler les aspects thermo-hydrauliques et neutroniques.

Les outils et méthodes développés pourront ensuite être appliqués sur d'autres scénarii d'accidents graves pour les réacteurs génération IV et pour lesquels des simulateurs simplifiés existent. A terme, ces développements pourront être intégrés dans la plateforme URANIE, dédiée au traitement des incertitudes dans les modèles numériques et développée par le CEA/DEN.

CONTEXTE ET ENCADREMENT

Encadrement CEA : A. Marrel (DEN/DER/SESI/LEMS).

Encadrement universitaire : la directrice de thèse envisagée est Béatrice Laurent, Professeur à l'Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse et directrice du Département de Mathématiques et Modélisation.

Caractère formateur du sujet et débouchés professionnels

Ce projet de recherche demande des connaissances solides, à la fois en statistiques, probabilités et calcul numérique. L'étudiant sera amené à réaliser un important travail de synthèse afin d'intégrer les multiples techniques statistiques, mathématiques et physiques nécessaires à l'élaboration de solutions innovantes. Le doctorant développera également son esprit d'ouverture et sa culture scientifique grâce aux échanges avec les différents acteurs impliqués dans la thèse : laboratoires universitaires, laboratoires CEA à thématique statistique, numérique et physique,... Enfin, l'application de ce travail à des cas concrets obligera le doctorant à rendre accessible son travail aux utilisateurs des codes numériques étudiés et à s'investir dans un ou plusieurs domaines physiques (thermohydraulique, fiabilité des structures, ou autres).

La gestion des incertitudes dans les processus industriels (industries automobile, pétrolière, aéronautique, spatiale, chimie, météorologie, ...) est devenue indispensable, et le doctorant aura d'importants atouts pour poursuivre dans ce domaine. L'élargissement des compétences du doctorant devrait lui permettre de s'intégrer rapidement dans une équipe de mathématiques appliquées

industrielle ou universitaire. Par ailleurs, les statisticiens sont actuellement très recherchés dans les équipes de recherche académiques (notamment à l'université).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Auffray, Y., Barbillon, P. et Marin, J.-M. (2012). Maximin design on non hypercube domains and kernel interpolation. *Statistics and Computing*, 22(3):703–712.

Bachoc F., Bois G., Martinez J.M., and Garnier J. (2014). Calibration and improved prediction of computer models by universal Kriging, *Nuclear Science Engineering*, 176, 81-97.

Cannamela, C. (2007). Apport des méthodes probabilistes dans la simulation du comportement sous irradiation du combustible à particules. Ph.D. thesis, University of Paris VII.

Chevalier C., Bect J., Ginsbourger D., Vazquez E., Picheny V., and Richet Y. (2014). Fast parallel kriging-based stepwise uncertainty reduction with application to the identification of an excursion set. *Technometrics*.

Da Veiga S. (2014). Global sensitivity analysis with dependence measures, *Journal of Statistical Computation and Simulation*.

Da Veiga S., and Marrel A. (2012). Gaussian process modeling with inequality constraints. *Annales de la faculté des sciences de Toulouse Mathématiques* 21.3: 529-555.

De Lozzo and Marrel A. (2015). New improvements in global sensitivity analysis for high-dimensional problems. *Submitted*.

De Rocquigny E., Devictor N., and Tarantola S., editors (2008). *Uncertainty in industrial practice*. Wiley.

Iooss B. (2011). Revue sur l'analyse de sensibilité globale de modèles numériques. *Journal de la Société Française de Statistique*, 152:1–23.

Le Gratiet L. (2013). Multi-fidelity Gaussian process regression for computer experiments. Université Paris-Diderot - Paris VII. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00866770v2>

Marie N, Marrel A, Seiler JM, Bertrand F (2) TJETBT1 0 0 1 2671.37 7aoh 671.37 7aoh