

PROPOSITION D'UN SUJET DE THÈSE

Calage bayésien sous incertitudes des outils de calcul scientifique couplés : application en simulation numérique du combustible



Contexte et problématiques de la thèse

La quantification et la réduction des incertitudes embarquées dans la simulation numérique des systèmes physiques complexes est un enjeu crucial pour améliorer la précision et la robustesse des *Outils de Calcul Scientifique* (OCS), aussi appelés codes de calcul ou simulateurs. Les sources d'incertitude peuvent être d'une part de nature numérique, induites par la résolution du(des) système(s) d'équations sur lequel(s) repose l'OCS, et d'autre part relatives à la modélisation des phénomènes physiques dont dérivent ces équations. C'est la raison pour laquelle, préalablement à son utilisation à des fins industrielles (pour des études de conception, de sûreté), l'OCS doit être soumis à une procédure dite de *Vérification et Validation* (V&V) [1]. La vérification a pour but d'identifier les incertitudes de nature numérique, afin de les éliminer (ou à minima justifier qu'elles peuvent être négligées). Ensuite, en confrontant les prédictions numériques avec des expériences réelles de référence, la validation doit déterminer si l'OCS est capable de prédire le système physique avec un niveau de précision suffisant. Autrement dit, la validation permet de déterminer si les modélisations physiques/équations choisies sont suffisamment précises.

Les incertitudes affectant les modélisations physiques des OCS peuvent être séparées en deux catégories. Lorsque l'incertitude provient de la variabilité d'un phénomène, non contrôlable par nature, alors elle peut être quantifiée par une loi de probabilité. On parle alors d'*incertitude intrinsèque* (aléatoire par nature). A l'inverse, lorsque l'incertitude est induite par un manque de connaissance sur le modèle, on parle d'*incertitude épistémique*. Au contraire de l'incertitude intrinsèque, ce second type d'incertitude est perçu comme réductible si des investigations plus poussées étaient menées ou en présence d'informations supplémentaires concernant la physique du phénomène étudié. Pour représenter les incertitudes épistémiques, deux approches sont proposées dans la littérature. La première utilise des représentations extra probabilistes ou non probabilistes, tandis que la seconde propose de recourir au *cadre bayésien* [2] qui les représente par des lois de probabilité sans faire de distinction avec les incertitudes intrinsèques. Une application concrète du cadre bayésien est la quantification des incertitudes affectant les paramètres incertains des modèles, appelée *calage statistique de paramètres* [3,4]. Son objectif est de déterminer la configuration optimale des paramètres des modèles physiques de l'OCS ainsi que l'incertitude associée pour prédire au mieux le système physique.

La possibilité d'appliquer une méthode de calage statistique de paramètres dépend, non seulement de la capacité à disposer de données expérimentales de référence, mais aussi de la complexité des modèles physiques et de leurs interactions potentielles. En effet, le nombre de paramètres dans les modèles peut atteindre plusieurs dizaines, ce qui nécessite la mise en œuvre de méthodes d'analyses de sensibilité pour identifier les paramètres les plus influents. De plus, l'OCS peut reposer sur un chaînage, voire un couplage de plusieurs blocs de calcul chacun entaché d'incertitudes intrinsèques et/ou épistémiques. On parle alors d'incertitudes emboîtées. L'objectif de la thèse est de proposer une méthodologie destinée au calage statistique des paramètres incertains pour ce type d'OCS en utilisant les méthodes bayésiennes et des techniques issues du domaine de la quantification des incertitudes en simulation numérique (plans d'expériences, métamodèles, méthodes d'analyse de sensibilité).

Application proposée en simulation combustible

Le comportement du crayon combustible en réacteur à eau pressurisée est simulé à l'aide du code de calcul ALCYONE V2 de la plateforme PLEIADES. Cette application modélise le comportement thermique et mécanique du crayon combustible, ainsi que l'évolution des matériaux sous l'effet de l'irradiation (produits de fission, modifications microstructurales, ...). L'application est constituée d'un ensemble de modèles qui calculent chacun des quantités nécessaires en entrée des autres modèles. Une boucle de convergence globale assure la convergence d'ensemble des tous les modèles à chaque pas de temps de calcul.

L'application envisagée pour le calage des paramètres concerne le modèle thermique et le modèle de comportement des produits de fission. Le modèle thermique résout l'équation de la chaleur produite dans la pastille combustible, et donne en résultat le champ de température en chaque point du combustible et de la gaine. La puissance d'irradiation (connue avec une certaine incertitude) permet d'estimer le terme source de chaleur. Le champ de température calculé dépend de la conductivité thermique du combustible qui est une propriété intrinsèque du matériau. Celle-ci évolue au cours du temps d'irradiation en réacteur. On dispose de données expérimentales dispersées, et de ce fait, la conductivité thermique est une grandeur incertaine de type « épistémique » (incertitude de l'ordre de 5%). La propagation de cette incertitude dans le schéma de résolution du problème thermique dans l'application combustible conduit nécessairement à une incertitude sur le champ de température [5].

Dans l'application ALCYONE V2, le modèle qui calcule le comportement des produits de fission gazeux est basé sur des équations de diffusion. C'est un modèle complexe dans lequel tous les paramètres incertains ne sont pas mesurables. Ces paramètres doivent donc être estimés par calage à partir de données expérimentales, elles-mêmes affectées par des incertitudes de nature « aléatoire ». Par ailleurs, comme ce modèle est thermiquement activé, le calage dépend aussi du champ de température, et donc de la loi de conductivité thermique du

combustible [6]. Par conséquent, l'objectif est de déterminer la loi de probabilité des paramètres à caler conditionnellement à la loi de conductivité thermique sur l'ensemble de son domaine d'incertitude.

[1] ASME, *Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer*, American Society of Mechanical Engineers, 2009.

[2] Ghosh J.K. ; Delampady, M. and Samanta, T. , *An introduction to Bayesian Analysis*, Theory and Methods, 2006.

[3] Campbell, K., *Statistical calibrations of computer simulations*, Reliability Engineering and System Safety, 2006.

[4] Kennedy, M. and O'Hagan A. , *Bayesian calibration of computer simulations*, Journal of the Royal Statistical Society, Series B, methodological, 2001.

[5] Bouloré A., Struzik C. Gaudier F., *Uncertainty and sensitivity analysis of the nuclear fuel thermal behavior*, Nuclear Engineering and Design 253 (2012).

[6] Struzik C., Bouloré A., *Contribution of the uncertainty analysis methods to the interpretation of nuclear fuel experimental irradiations*, Transactions of American Nuclear Society, 2010.

Profil de l'étudiant(e)

- Titulaire d'un Bac+5 (Diplôme d'école d'ingénieurs ou Master 2),
- Des compétences en probabilités/statistiques et un intérêt pour les applications industrielles,
- La connaissance de Linux et la maîtrise d'un ou plusieurs logiciel(s) de programmation (ex : Python, C++, R)
- Une bonne qualité rédactionnelle est indispensable.

Informations pratiques

La thèse se déroulera au centre CEA de Saclay dans le Laboratoire de Génie Logiciel pour la Simulation (LGLS) au sein du Service de Thermohydraulique et de Mécanique des Fluides (STMF) de la Direction de l'Énergie Nucléaire (DEN).

La partie applicative pourra être réalisée au centre CEA de Cadarache dans le Service d'Etudes et de Simulation du comportement du Combustible (SESC) qui développe et valide l'application ALCYONE V2 de la plateforme PLEAIDES.

Contact : **Guillaume DAMBLIN** (DM2S/STMF/LGLS) : guillaume.damblin@cea.fr

CEA Saclay, Université Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex.

