

SUJET DE STAGE 2019 – 6 mois

« Analyse et validation de calculs de dérivées par la Théorie des Perturbations Standards pour les réacteurs à eau. »

Le Laboratoire de Projets Nucléaires (LPN) développe et valide des Outils de Calculs Scientifiques (OCS) de neutronique destinés à être utilisés pour les études industrielles de conception et de sûreté des réacteurs à eau de petites tailles. Dans ces études, une part importante des calculs réalisés par les ingénieurs est consacrée à l'estimation de dérivées partielles sur différents paramètres d'intérêts, en particulier la réactivité, les effets en réactivités et les facteurs de puissance. Ces vecteurs de dérivées partielles sont par la suite nécessaires pour la propagation des incertitudes dues aux données technologiques (tolérances ou incertitudes de fabrication et des conditions d'exploitation) et aux données nucléaires (sections efficaces).

En neutronique, la Théorie des Perturbations Standards (TPS) [2] permet de calculer rapidement les dérivées (pour la réactivité et les effets en réactivités uniquement) avec seulement deux calculs de flux de neutrons (direct et adjoint) et cela quel que soit le nombre de paramètre d'entrée. De récents travaux de thèse [3][6] ont consisté à implémenter et évaluer la TPS dans nos modèles de calculs de cœurs à 3D industriels (code CRONOS2 [10]). Cependant, plusieurs étapes de simplifications du problème introduisent des approximations lors du calcul des dérivées dans CRONOS2. On suppose ainsi que le vecteur des dérivées partielles peut se décomposer sous la forme suivante [1] :

$$S_{exact}^{C2}(x) = S_{TPS}^{C2}(x) + S_{impl}^{C2}(x)$$

avec :

- x les paramètres du calcul
- S_{exact}^{C2} le vecteur des dérivées exactes pour des calculs de cœurs à 3D avec CRONOS2,
- S_{TPS}^{C2} le vecteur des dérivées approchées et calculées par la TPS implémentée dans CRONOS2
- S_{impl}^{C2} les termes « implicites » dus aux approximations du calcul dans CRONOS2.

Dans ce contexte, l'objectif du sujet de stage consiste à caractériser S_{impl}^{C2} afin de pouvoir corriger le calcul des dérivées réalisé par TPS dans CRONOS2. Or, nous savons qu'en amont des calculs de cœurs CRONOS2, l'étape d' « autoprotection des sections efficaces » introduit les principales contributions à S_{impl}^{C2} [3]. Cette étape est réalisée avec le code APOLLO2 [9] sur des calculs d'assemblages à 2D. En complément, nous avons la possibilité d'utiliser le code APOLLO2 en tant que simulateur pour calculer à la fois S_{exact}^{A2} par perturbation directe, S_{TPS}^{A2} (par TPS dans APOLLO2) et donc par différence S_{impl}^{A2} , pour un x donné à partir de la relation suivante :

$$S_{exact}^{A2}(x) = S_{TPS}^{A2}(x) + S_{impl}^{A2}(x).$$

Ainsi, en faisant l'hypothèse que $S_{impl}^{A2} \approx S_{impl}^{C2}$, la caractérisation de S_{impl}^{C2} peut être substituée par la caractérisation de S_{impl}^{A2} . **Cette caractérisation passe dans un premier temps par l'identification des paramètres x intervenant dans le calcul des dérivées et qui sont les plus influents sur l'erreur S_{impl}^{A2} .** Pour cela, on réalise **une analyse de sensibilité globale** [4] du vecteur S_{impl}^{A2} et un calcul des effets élémentaires de chaque paramètre. **On souhaite ensuite disposer d'un modèle permettant de prédire S_{impl}^{A2} en fonction de n'importe quelle valeur des paramètres x .** Ce modèle pourra ainsi être introduit dans les procédures de calculs de CRONOS2. Pour réaliser ces deux objectifs, il nous faut disposer d'un échantillon de valeurs de S_{impl}^{A2} pour différentes valeurs de x .

La démarche proposée consiste alors à réaliser un certain nombre de simulations du code APOLLO2 pour différentes valeurs de x , en explorant au mieux le domaine de variation des paramètres x (utilisation de plan d'expériences de type *space-filling design*). A partir de ces simulations, une analyse de sensibilité [4] pourra être réalisée afin d'identifier et hiérarchiser les paramètres les plus influents sur $S_{impl}^{A2}(x)$. Un modèle de substitution pour $S_{impl}^{A2}(x)$ basé sur une fonction mathématique pourra aussi être estimée à partir des simulations. Ce modèle de substitution [11], appelé métamodèle et noté $\hat{S}_{impl}^{A2}(x)$, pourrait ensuite être introduit dans les procédures de calculs des dérivées à 3D dans CRONOS2. Enfin, ces nouvelles dérivées (*i.e.* $S_{TPS}^{C2}(x) + \hat{S}_{impl}^{A2}(x)$) devront être confrontées à des dérivées à 3D de référence estimées sur des cœurs complets par des calculs IFP [5] dans TRIPOLI4 [8]. Ceci constituera une première base de validation de l'hypothèse $S_{impl}^{C2}(x) \sim \hat{S}_{impl}^{A2}(x)$. Nous prévoyons que cela mettra en avant les effets implicites à l'étape de calcul neutronique des facteurs « SPH », seconde source de contributions à S_{impl}^{C2} [3] de nos OCS.

La réalisation de ces différentes étapes, choix du plan d'expériences, analyse de sensibilité globale, construction d'un métamodèle et validation, nécessite la mise en œuvre de méthodes et outils statistiques adaptés. En particulier, il s'agira de s'adapter à la nature vectorielle de la sortie d'intérêt $S_{impl}(x)$ en utilisant par exemple des indices de sensibilité agrégés [7] pour identifier les paramètres x les plus influents sur l'ensemble du vecteur S_{impl}^{A2} . La construction de métamodèle pourra aussi être adaptée pour modéliser conjointement les composantes du vecteur.

Discipline : Mathématiques appliquées, Statistiques et probabilités

Formation souhaitée : BAC +5 (Stage pour dernière année d'Ecole d'ingénieur ou Master 2)

Localisation : Le Laboratoire de Projets Nucléaires (DER/SPRC/LPN), CEA de Cadarache

Encadrant CEA et contact : Thomas BONACCORSI – [thomas.bonaccorsi\[at\]cea.fr](mailto:thomas.bonaccorsi[at]cea.fr)

Références

- [1] M. L. Williams and B. Rearden, SCALE-6 sensitivity/uncertainty methods and covariance data, *Nuclear Data Sheets*, 2008.
- [2] M.L. Williams, Perturbation theory for nuclear reactor analysis, *CRC Handbook of nuclear reactor calculations*, Vol. 3, 1986.
- [3] J. Gaillet, Développement et validation des calculs de sensibilités et d'incertitudes dans le code de transport 3D CRONOS2 pour la transposition des biais/incertitudes, Thèse de Doctorat, ED 352, 2018.
- [4] B looss and P Lemaître, A review on global sensitivity analysis methods », *Uncertainty management in simulation-optimization of complex systems*, 101-122, 2015.
- [5] G. Truchet, Développements et validation de calculs à énergie continue pondérés par l'importance, Thèse de doctorat, 2015.
- [6] J. Gaillet, T. Bonaccorsi and G. Truchet, Development and validation of sensitivity and uncertainty calculations using the 3D neutron transport code CRONOS2 at an industrial scale, *PHYSOR 2018*.
- [7] M. De Lozzo and A. Marrel, Sensitivity analysis with dependence and variance-based measures for spatiotemporal numerical simulators, *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 2016.
- [8] C. Diop, O. Petit, E. Dumonteil et al., TRIPOLI-4: a 3D continuous-energy Monte Carlo transport code, *Transactions of the American Nuclear Society*, 2006.
- [9] R. Sanchez, J. Mondot, Z. Stankovski, A. Cossic and I. Zmijarevic, APOLLO2: a user oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations, *Nuclear Science and Engineering*, 1988.
- [10] J.J. Lautard, S. Loubière and C. Fedon-Magnaud, CRONOS a Modular Computational System for Neutronic Core Calculations , *Specialist IAEA meeting, Advanced Computational Methods for Power Reactors*, 1990.
- [11] M. De Lozzo, Substitution de modèle et approche multifidélité en expérimentation numérique, *Journal de la Société Française de Statistique*, 156(3), p. 21–55, 2015.