

<u>Sujet d'alternance</u>: Calibration de corrélations thermohydrauliques avec prise en compte d'une erreur de modèle

Contexte

Au sein du département de modélisation des systèmes et des structures (DM2S) au CEA Saclay, le Service de Thermohydraulique et de Mécanique des Fluides (STMF) :

- conçoit, développe et qualifie des codes de simulation thermohydraulique et de mécanique des fluides pour les réacteurs nucléaires et les installations nucléaires à différentes échelles,
- conçoit et réalise des programmes expérimentaux en support à la compréhension des phénomènes et à la validation des modèles physiques implémentés dans les codes de calculs

L'objectif de ces codes de calcul est de déterminer la marge à la crise d'ébullition pour différents types de scénarios accidentels en fonction des paramètres de conception du coeur (point de fonctionnement, dimensions géométriques,...). La résolution directe des équations de Navier-Stokes étant trop coûteuse en temps de calcul pour permettre un usage industriel, des modèles physiques simplifiés - appelés corrélations - sont développés sur la base de considérations physiques, puis calibrés et validés sur des campagnes expérimentales. La problématique de la calibration et la validation de ces corrélations est cruciale pour assurer une bonne représentativité du code de calcul dans sa physique d'intérêt. Pour ce faire, il est nécessaire de prendre en compte toutes les sources d'incertitudes :

- La première source d'incertitude provient de l'erreur inhérente à la mesure expérimentale
- La deuxième source d'incertitude provient de l'écart entre le phénomène physique d'intérêt et la corrélation choisie, c'est *l'erreur de modèle*

La méthode CIRCÉ (Calcul des Incertitudes Relatives aux Corrélations Élémentaires) est développée au CEA pour modéliser l'erreur de modèle dans la calibration des corrélations physiques. Elle a été notamment mise en œuvre en thermohydraulique dans la thèse de Riccardo Cocci en 2022 [2, Chapitre 3]. Au sein du DM2S, le Service de Génie Logiciel pour la Simulation (SGLS), développe la plateforme logicielle Uranie (https://uranie.cea.fr/index) qui offre des méthodes avancées de quantification d'incertitudes tout en facilitant le couplage avec les codes de calculs développés au CEA.

Objectif de l'alternance

L'objectif général de l'alternance est de calibrer des corrélations thermohydrauliques présentes dans le code de calcul thermohydraulique échelle coeur developpé au STMF. En toute généralité, des campagnes d'essais thermohydraulique nous fournissent n mesures du

phénomène physique d'intérêt notées : $(y_i^{\text{mes}})_{1 \leq i \leq n} \in \mathbb{R}$. À ces mesures physiques correspondent des observations des conditions expérimentales correspondantes notées $(x_i)_{1 \leq i \leq n} \in \mathbb{R}^d$ qui sont des entrées du modèle physique noté g, ces modèles sont appelés corrélations en thermohydraulique. Ce modèle dépend également de paramètres $\theta \in \mathbb{R}^p$ à calibrer.

Dans [5], un modèle statistique est proposé pour mettre en relation les observations physiques et les sorties du modèle physique :

$$y_i^{\text{mes}} = g(x_i, \theta) + \delta(x_i) + \varepsilon_i$$
, (1)

où les ε_i représentent un bruit d'observation et sont supposés être des variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées de loi gaussienne centrée de variance notée σ_{ε}^2 ($\varepsilon_i \stackrel{iid}{\sim} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$) et δ représente l'erreur de modèle et est modélisée par un processus gaussien de moyenne nulle et de noyau de covariance C.

L'erreur de modèle peut également être modélisée par une structure latente sur le paramètre θ [6]. Ainsi le modèle statistique se réécrit comme

$$y_i^{\text{mes}} = g(x_i, \theta_i) + \varepsilon_i$$

$$\theta_i \stackrel{iid}{\sim} p_{\alpha}$$
(2)

où p_{α} représente une famille paramétrique de lois de probabilités. L'estimation du paramètre α peut s'effectuer par un algorithme Expectation Maximization stochastique [1] ou par une inférence bayésienne [3].

On peut également utiliser la méthodologie CIRCE (Calcul des Incertitudes Relatives aux Corrélations Élémentaires) développée au CEA, qui consiste en une approximation linéaire du problème d'inversion stochastique présenté dans l'équation 2.

$$y_i^{\text{mes}} = g(x_i, \theta_0) + \nabla_{\theta} g(x_i, \theta_0)^T \lambda_i + \varepsilon_i$$
(3)

où $\lambda_i = \theta_i - \theta_0$ avec $\lambda_i \stackrel{iid}{\sim} \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$. Les paramètres à estimer dans ce modèle sont (μ, Σ) via un algorithme ECME (Expectation/Conditional Maximisation Either) [4].

Enfin, si une campagne d'essais nous fournit un nombre de données n grand par rapport à la dimension du vecteur des conditions expérimentales d, la corrélation g peut être determine de manière non paramétrique via de l'apprentissage supervisé par exemple.

Environnement de travail

L'alternance se déroulera sur le site de Saclay du CEA.

Compétences requises

Curiosité, volontarisme, autonomie

Profils recherchés

Étudiant ou Étudiante en M1 de mathématiques appliquées avec une spécialisation en probabilité & statistique, une maîtrise de l'environnement UNIX ainsi que du langage Python est fortement recommandé.

Conformément aux engagements pris par le CEA en faveur de l'intégration des personnes en situation de handicap, cet emploi est ouvert à tous et toutes. Participant à la protection nationale, une enquête administrative est réalisée pour tous les salariés du CEA afin d'assurer l'intégrité et la sécurité de la nation.

Le poste pouvant nécessiter d'accéder à des informations relevant du secret de la défense nationale, vous ferez l'objet d'une procédure d'habilitation, conformément aux dispositions des articles R.2311-1 et suivants du Code de la défense et de l'IGI n°1300 du 09 août 2021.

Contacts

CV & lettre de motivation à déposer sur l'offre d'alternance du portail emplois CEA: https://www.emploi.cea.fr/offre-de-emploi/emploi-calibration-de-correlations-thermohydrau37559.aspx

Informations complémentaires

Rémunération de 1225€/mois, prise en charge des déplacements CEA/université, aide au logement dans la limite de 230€ mensuel. Prise en charge des frais de scolarité. Accès au CEA Saclay par bus de ville (4606 (ex-91.06), 9119 (ex-91.10) et 9111 (ex-91.11) au départ de Massy, ligne 4609 (ex-09) entre les Ulis et le CEA via Orsay) ou via navette bus privée affrétée par le CEA desservant de nombreuses communes d'île de France.

Références

- [1] P. Barbillon, G. Celeux, G. Grimaud, Y. Lefebvre, and E. De Rocquigny. Nonlinear methods for inverse statistical problems. *Computational Statistics & Data Analysis*, 55(1):132–142, 2011. ISSN 0167-9473. doi:doi.org/10.1016/j.csda.2010.05.030.
- [2] Riccardo Cocci. Statistical learning and inverse uncertainty quantification in nuclear thermal-hydraulic simulation: application to the condensation modelling at the safety injection. PhD thesis, 2022. URL http://www.theses.fr/2022UPAST122. 2022UPAST122.
- [3] Shuai Fu, Gilles Celeux, Nicolas Bousquet, and Mathieu Couplet. Bayesian inference for inverse problems occurring in uncertainty analysis. *International Journal for Uncertainty Quantification*, 5(1), 2015.
- [4] Y. Lefebvre G. Celeux, A. Grimaud and E. de Rocquigny. Identifying intrinsic variability in multivariate systems through linearized inverse methods. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 18(3):401–415, 2010. doi:10.1080/17415971003624330.
- [5] Marc C. Kennedy and Anthony O'Hagan. Bayesian calibration of computer models. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology), 63(3): 425–464, 2001. doi:10.1111/1467-9868.00294.
- [6] Khachik Sargsyan, Xun Huan, and Habib N. Najm. Embedded model error representation for bayesian model calibration. *International Journal for Uncertainty Quantification*, 9(4):365–394, 2019. ISSN 2152-5080.