

## **Développement d'une méthode de propagation d'incertitudes de type fonctionnel sur la puissance résiduelle.**

### **Development of an uncertainty propagation method of function-typed input data applied to the decay heat calculation.**

#### **Descriptif de la thèse**

La caractérisation de l'énergie dégagée par la désintégration des radionucléides dans le combustible usé et déchargé des réacteurs est essentielle pour le design, la sûreté et l'analyse du stockage, du transport et des systèmes de dépôt. Cette puissance résiduelle est fondée sur la composition isotopique du combustible à la fin de l'irradiation et varie avec le temps de refroidissement.

Peu de mesures sur cette puissance résiduelle sont aujourd'hui disponibles. En outre, les valeurs expérimentales disponibles ne permettent pas de couvrir l'étendue des possibilités de combinaisons entre paramètres (taux de combustion au moment du déchargement – enrichissement en  $^{235}\text{U}$  – temps de refroidissement – paramètre de design du combustible – conditions opérationnelles – applications spécifiques). L'estimation de la puissance résiduelle est donc principalement basée sur des codes de calcul. Le schéma actuellement mis en place au sein du Service de Physique des Réacteurs et du Cycle est basé sur un calcul réalisé en deux étapes : une étape réseau avec un code de transport permettant de générer des sections et des flux multigroupes pour le milieu désiré en fonction du taux de combustion et une étape d'évolution avec un historique d'irradiation détaillé et des chaînes d'évolution à  $\sim 3000$  isotopes.

L'évaluation de l'incertitude associée à l'estimation de la puissance résiduelle revêt un aspect important dans l'objectif d'accéder à une prédiction la plus fiable et contrôlée possible. Elle constitue un facteur clé pour justifier les décisions prises concernant le combustible irradié.

Des études ont d'ores et déjà été menées sur l'estimation de l'incertitude de la puissance résiduelle induite par les incertitudes sur les données nucléaires [TSILANIZARA 1, TSILANIZARA 2] avec une méthode de calcul des sensibilités par perturbation directe ou avec une méthode probabiliste basé sur l'échantillonnage des incertitudes selon une distribution donnée et réalisation de  $n$  calculs pour évaluer la distribution de la grandeur d'intérêt, sa valeur centrée et son écart-type. Des milliers de simulations sont alors nécessaires pour assurer une convergence correcte des résultats.

Ce cadre mathématique est très bien adapté lorsqu'on connaît les matrices de covariance entre les paramètres incertains et que ces paramètres peuvent être représentés par des scalaires, ou une liste de scalaires. Par exemple, une section efficace multigroupe de capture neutronique va être associée à une matrice de covariance multigroupe décrivant les incertitudes par groupe mais également les corrélations entre groupes énergétiques, ainsi que les corrélations avec la section de fission, de diffusion ... (citons par exemple la base COMAC [ARCHIER]).

Des travaux très récents [ILAS] [ROCHMAN] [JANG] ont cherché à propager des incertitudes d'ordre technologique telles que les paramètres de modélisation des assemblages, voire opérationnelle telles que les conditions d'opération (historique d'irradiation entre autre).

Dans ce cadre, les équipes ont cherché à transposer les méthodes d'échantillonnage stochastique à des paramètres technologiques pouvant influencer sur l'estimation de la puissance résiduelle : données de design du combustible (au niveau matériel et/ou géométrique) ou conditions opérationnelles (densité du modérateur, puissance spécifique, température du combustible). Cependant les incertitudes obtenues sont très dépendantes des hypothèses faites sur les variations des données en entrée, la méthode de propagation et éventuellement les codes utilisés. En particulier :

- L'hypothèse de base selon laquelle les incertitudes suivent une loi normale n'est pas toujours adaptée, d'autant plus lorsque les données d'incertitude sont fonction du temps (historique de puissance par exemple),
- Les données de base sur le design du combustible sont des données propriétaires, difficilement accessibles : pour les évaluations de sûreté-criticité, on n'utilise donc que les données habituelles,
- La corrélation entre les différents paramètres d'entrée est très souvent négligée.

Pour ce travail de thèse, on propose de propager des incertitudes sur des paramètres d'entrée fonctionnels dans le cas particulier de la puissance résiduelle, le terme « fonctionnel » faisant référence à un paramètre qui s'exprime par une fonction. Dans le cadre de cette thèse, on se focalisera tout particulièrement sur l'historique d'irradiation des réacteurs (fonctionnelle du temps) et les paramètres corrélés tels que le mouvement (ou l'évolution de la concentration) des absorbants et les données de design (teneur en  $^{235}\text{U}$  par exemple). Ce travail comporte trois grandes parties :

- **Une première partie dédiée au développement d'un modèle de substitution pour l'estimation de la puissance résiduelle et la quantification des incertitudes des variables aléatoires fonctionnelles.**
  - Un travail préliminaire d'identification des corrélations devra être mené afin de déterminer sur quels paramètres baser le modèle de substitution  
Étant donné le coût de calcul associé, cette phase ne sera pas imputée au travail de thèse. Des calculs APOLLO2 seront menés pour différents historiques de puissance et différentes valeurs de données de design pour constituer une base de données de bibliothèques d'entrée pour le code DARWIN2. La base de données qui en résulte sera utilisée pour réaliser un apprentissage amont des données. Le modèle de substitution considéré pourra mettre en œuvre des réseaux de neurones couplés à des contraintes physiques [RAISSI].
  - La réduction des temps de calculs du problème direct (propagation d'incertitude sur la puissance résiduelle dues aux incertitudes sur les conditions opérationnelles des réacteurs) est essentielle. Pour cela, des approches de réduction de modèle associées à des méthodes multifidélité seront envisagées, en lien avec la modélisation des entrées, pour la construction du modèle de substitution de DARWIN2 estimant la puissance résiduelle. La modélisation globale du problème sera réalisée dans un cadre Bayésien [GELMAN]. Cette étape nécessite un travail important de bibliographie.

- **Une seconde partie dédiée au développement d'une méthode d'analyse de sensibilité pour le modèle de substitution développé.**  
En fonction de l'analyse réalisée lors de la première phase sur l'identification des corrélations, une analyse de sensibilité sera éventuellement menée afin de déterminer quel paramètre d'entrée est le plus impactant sur la détermination de la puissance résiduelle.
- **Une dernière partie dédiée au développement d'une méthode inverse de quantification des incertitudes des paramètres de modélisation opérationnels.**  
La valeur et la distribution des incertitudes sur les conditions d'opérations des réacteurs sont aujourd'hui principalement basées sur des jugements d'experts. Ce manque d'information peut être estimé de façon plus efficace à l'aide de la quantification inverse des incertitudes. Cette dernière vise à quantifier les incertitudes des paramètres d'entrée sur la base de données expérimentales et de prédictions numériques. L'inférence Bayésienne est particulièrement bien adaptée à la résolution de tels problèmes inverse [HIGDON], [PERRIN] : elle repose sur l'établissement de la distribution a posteriori d'un jeu de paramètres conditionné par les données observées. Pour développer une telle méthode, le candidat pourra s'appuyer sur les mesures de puissance résiduelle disponibles au sein du SPRC et sur les compétences en statistique du LNE. La modélisation du problème direct peut nécessiter une adaptation lors d'une utilisation en inversion. Des méthodes encore plus spécifiques à l'inversion Bayésienne de codes coûteux pourront être explorées, du type ABC (Approximate Bayesian Computation) [ZENG].

Le travail envisagé au cours de cette thèse se démarque par la volonté de prendre en compte d'autres sources d'incertitude que celles habituellement considérées (données nucléaires, teneurs isotopiques) et de déterminer leur impact sur des études industrielles. Le traitement de paramètres incertains exprimables par des fonctions est novateur : peu de références bibliographiques étant aujourd'hui disponibles sur cette thématique. Pour répondre à cette problématique des techniques statistiques récentes seront mises en œuvre dans le domaine de la physique des réacteurs. Le travail de thèse contribuera donc à élargir le panel des méthodes à disposition au sein de l'institut et permettra leur utilisation dans des cadres plus spécialisés tels que les calculs de neutronique (avec APOLLO2, CRONOS2, ...).

### **Déroulement de la thèse**

Le doctorant sera intégré dans l'équipe du Laboratoire des Projets Nucléaires (LPN), en collaboration avec le Laboratoire d'Etude de Physique (LEPh), au sein de la Direction des Énergies du CEA Cadarache (Bouches-du-Rhône). Le LPN est en charge du développement et de la validation des schémas de calcul neutroniques dédiés aux réacteurs expérimentaux et embarqués et le LEPh possède les compétences en ce qui concerne l'interprétation d'expérience et les schémas de calcul pour l'évolution isotopique des combustibles et le calcul de la puissance résiduelle.

L'étudiant recruté sera en liaison directe avec le DM2S (Département de Modélisation des Systèmes et Structures) au CEA Saclay, qui développe DARWIN2 et APOLLO2.

Les trois parties citées précédemment devront être menées chronologiquement dans l'ordre proposé, le modèle de substitution étant la clé de voûte des autres développements. Pour chacune des étapes, les phases suivantes devront être déroulées :

### **1. Étude bibliographique**

Au cours de cette étape, le doctorant établira l'état de l'art de la partie en question en construisant sa culture scientifique sur les schémas de calcul, les méthodes de propagation et sur la puissance résiduelle.

Les travaux de thèse de Simon Nanty, plutôt méthodologiques, ont permis d'établir un solide état de l'art des méthodes existantes pour les deux parties dédiées à la propagation des incertitudes de variables fonctionnelles de façon générale. Cependant, les applications visées dans son travail de thèse étaient tournées vers les études de sûreté et les problématiques thermo-hydrauliques. Il est donc nécessaire de compléter cette bibliographie, en particulier par des travaux dont les applications sont davantage tournées vers l'estimation de données intégrales telles que la puissance résiduelle.

L'inférence bayésienne est, quant à elle, utilisée pour la quantification d'incertitude et l'inversion dans de nombreux domaines. Les développements les plus récents concernent la réduction des temps de calculs et l'amélioration de la performance des algorithmes. L'association d'un cadre d'inversion Bayésienne couplée à une modélisation des entrées par des réseaux de neurones à information physique est une piste innovante de recherche envisagée dans cette thèse.

### **2. Développement des méthodes**

Pour chacune des étapes, une attention particulière devra être portée sur l'évaluation des développements entrepris.

### **3. Application aux paramètres incertains impactant la puissance résiduelle**

L'application principale sera la propagation des incertitudes dues à l'historique de fonctionnement du réacteur et à ses paramètres corrélés.

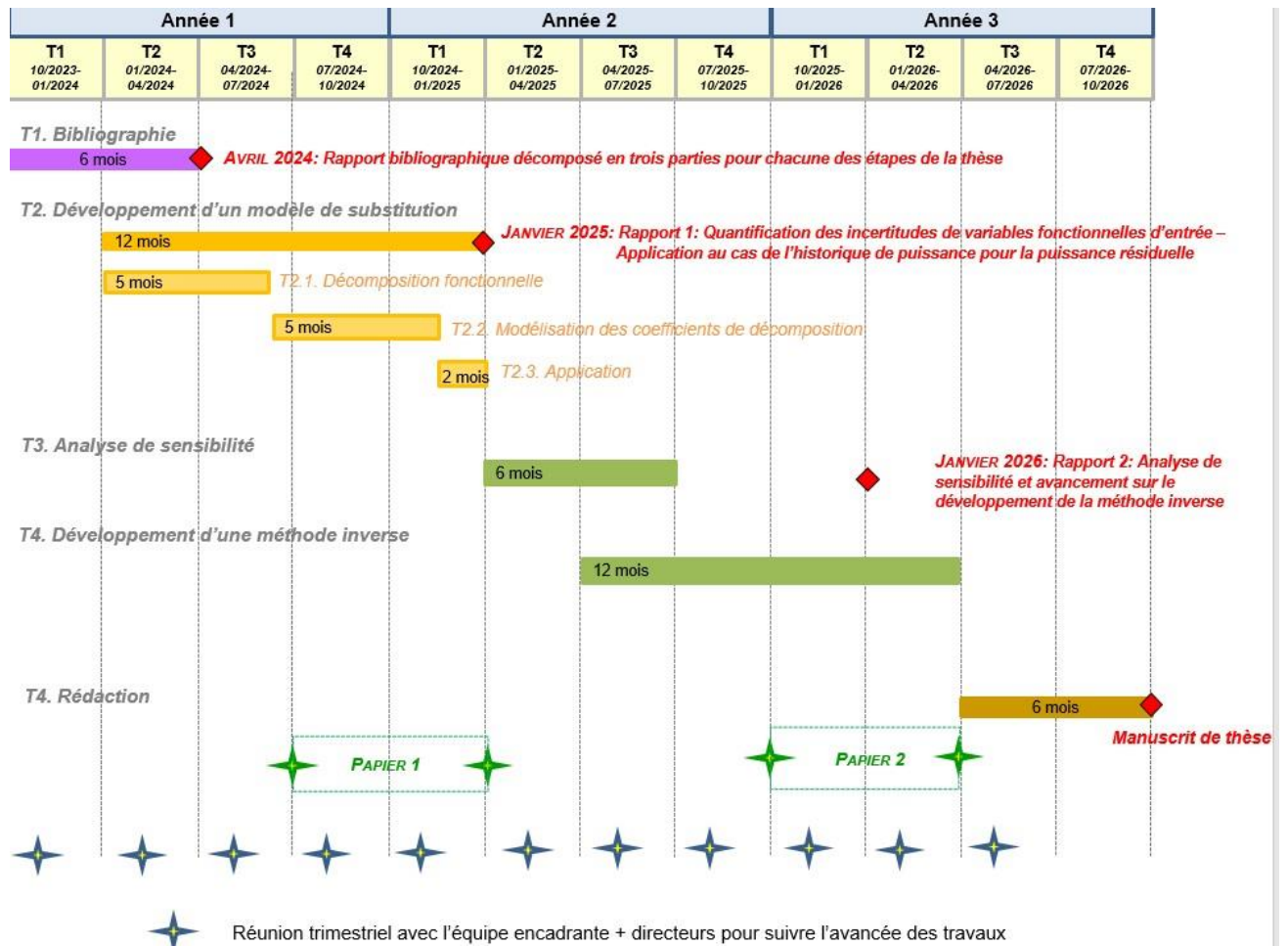
#### Profil du candidat recherché

- Titulaire d'un BAC+5 (M2 ou école d'ingénieur)
- Compétences en probabilités/stat, machine learning – intérêt pour les applications en physique OU neutronicien ayant une très forte appétence pour les mathématiques
- Une connaissance, même théorique, de l'inférence bayésienne sera appréciée
- Connaissance de Linux et maîtrise des logiciels de programmation de type Python, R, C++
- Bonne qualité rédactionnelle et d'écoute
- Capacité de travailler en équipe sur des champs multi-disciplinaires

#### Personnes à contacter

- Cindy LE LOIREC : [Cindy.LELOIREC@cea.fr](mailto:Cindy.LELOIREC@cea.fr) – 04.42.25.40.62
- Séverine DEMEYER : [Severine.Demeyer@lne.fr](mailto:Severine.Demeyer@lne.fr)
- Vanessa VALLET : [Vanessa.VALLET@cea.fr](mailto:Vanessa.VALLET@cea.fr)

## Planning indicatif



### Valeur ajoutée de la thèse :

La valeur ajoutée du travail de thèse proposé est multiple :

- Développement méthodologique dans le domaine de la statistique, appliqué au secteur du nucléaire,
- Prédiction plus fiable et plus contrôlée de la puissance résiduelle : application à diverses filières de réacteurs,
- Application de méthodes de réductions de modèles à des outils de calcul scientifique (OCS) spécialisé dans le traitement de la physique des réacteurs,
- Combinaison du cadre Bayésien de l'inversion à une modélisation par réseau de neurone des entrées,
- Montée en compétence des laboratoires impliqués dans le domaine de la science des données et des applications nucléaires,
- Sujet de fort intérêt pour les partenaires industriels du CEA.

### Valorisation des acquis de la thèse et perspectives

Le doctorant développera au cours de la thèse des compétences dans le domaine de la simulation neutronique, de la science des données et des réacteurs nucléaires.

Le doctorant sera amené à rédiger une synthèse de ses travaux de façon périodique pour le projet finançant le doctorat. Il aura également l'opportunité de présenter le résultat de ses travaux lors de communications orales en conférence. Le doctorant fera également la synthèse de ses résultats dans une ou plusieurs publications en revue à comité de lecture.

Ce travail sera intégré aux études en cours au SPRC sur le développement et la validation d'un OCS dédié à la puissance résiduelle des réacteurs de petite taille. Il permettra de compléter plus précisément l'étape de validation de cet OCS en donnant la possibilité de calculer l'incertitude de façon plus satisfaisante.

## Références

[VALLET] Nuclear data uncertainty quantification for the decay heat of PWR MOX fuels using data assimilation of elementary fission bursts, EPJ Web of Conferences 247 (2021).

[NANTY] *Quantification des incertitudes et analyse de sensibilité pour codes de calcul à entrées fonctionnelles et dépendantes*, Manuscrit de thèse, Université Grenoble Alpes, 2015.

[EBIWONJUMI 1] *Bayesian method and polynomial chaos expansion based inverse uncertainty quantification of spent fuel using decay heat measurements*, Nuclear Engineering and Design, Volume 378 (2021).

[EBIWONJUMI 2] *Verification and validation of radiation source term capabilities in STREAM*, Annals of Nuclear Energy, Volume 124 (2019).

[EBIWONJUMI 3] *Uncertainty quantification of PWR spent fuel due to nuclear data and modeling parameters*, Nuclear Engineering and Technology, Volume 50, issue 3 (2021).

[ILAS] *Decay heat uncertainty for BWR used fuel due to modeling and nuclear data uncertainties*, Nuclear Engineering and Design, Volume 319 (2017).

[ROCHMAN] *Analysis for the ARIANE GU1 sample: Nuclide inventory and decay heat*, Annals of Nuclear Energy, Volume 160 (2021).

[JANG] *Validation of Spent Nuclear Fuel Decay Heat Calculation by a Two-step Method*, Nuclear Engineering and Design, Volume 53 (2021).

[TSILANIZARA 1] A. Tsilanizara et al., Annals of Nuclear Energy 164 (2021) 108579

[TSILANIZARA 2] A. Tsilanizara et al., Annals of Nuclear Energy 90 (2016) 62-70

[ARCHIER] P. Archier et al., "COMAC: Nuclear Data Covariance Matrices Library for reactor applications", PHYSOR2014, JAEA-CONF-2014-003

[RAISSI] *Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations*, Journal of Computational Physics, Volume 378 (2019)

[GELMAN] *Bayesian Data Analysis*, Third Edition, Chapman&Hall/CRC Texts in Statistical Science (2013)

[HIGDON] *Combining Field Data and Computer Simulations for Calibration and Prediction*, SIAM Journal on Scientific Computing, Volume 26 (2004)

[PERRIN] *Taking into account input uncertainties in the Bayesian calibration of time-consuming simulators*, Journal de la société française de statistique, Tome 160 (2019)

[ZENG] *A novel adaptive approximate Bayesian computation method for inverse heat conduction problem*, International Journal of Heat and Mass Transfer, Volume 134(2019)