

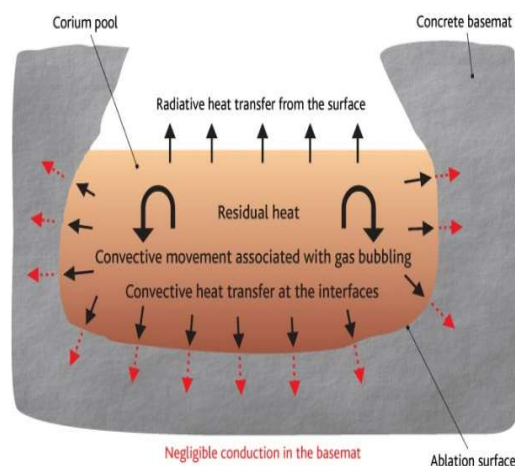
Deep learning pour simulateurs numériques avec sorties discontinues

Application dans les études d'accident grave en sûreté nucléaire

Ce stage s'inscrit dans le cadre des activités de l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) qui est l'expert public national des risques nucléaires et radiologiques.

Dans sa mission de soutien à l'expertise de dossiers de sûreté, l'IRSN développe des logiciels informatiques simulant le déroulement d'un accident hypothétique au sein d'un réacteur nucléaire. Un exemple est le système de logiciels ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) qui simule l'ensemble des phénomènes qui interviennent au cours d'un accident de fusion du cœur d'un réacteur refroidi à l'eau, depuis l'événement initiateur jusqu'au rejet de produits radioactifs à l'extérieur de l'enceinte de confinement [1].

Au cours d'une étude d'accident grave, de nombreuses évaluations des propriétés matériau d'un mélange d'espèces sont requises, telles que l'évaluation de la fraction liquide d'un corium (mélange entre cœur fondu et béton fondu).



Ces propriétés peuvent être estimées par l'outil Nuclea Toolbox, qui permet de calculer l'état thermodynamique d'équilibre d'un mélange d'atomes. L'appel direct systématique à cet outil engendrerait un surcoût de calcul non compatible avec les contraintes de temps de simulation du système de logiciel ASTEC.

La stratégie actuelle se base donc sur l'interpolation linéaire de quelques tables pré-obtenues avec Nuclea Toolbox afin d'approcher l'état d'équilibre du mélange. Toutefois, cette stratégie requiert de stocker un nombre important de simulations afin d'avoir une interpolation suffisamment précise, ce qui est difficilement réalisable quand le mélange étudié comporte un grand nombre d'éléments chimiques. A titre illustratif, pour une seule température et 13 atomes, un maillage des proportions de pas de 1% nécessite 10^{15} calculs.

Pour contourner cette limitation, on s'oriente alors vers l'utilisation de modèles rapides à évaluer permettant une réduction significative du temps de calcul par rapport aux calculs Nuclea Toolbox tout en garantissant peu de perte en précision. Le travail de stage porte sur la construction de ce type de modèle en exploitant les techniques issues du machine learning et du deep learning. La spécificité des données simulées par Nuclea Toolbox est qu'elles présentent un comportement hétérogène selon la composition du mélange. En effet, la disparition ou l'apparition de certaines phases en fonction de la température du mélange peut avoir un gros impact sur la valeur de la grandeur simulée (fraction liquide par exemple) conduisant à des données présentant des forts gradients voire des discontinuités.

Afin de construire des modèles prédictifs pour ce type de problème, le stage explorera deux axes méthodologiques en interaction :

Le premier axe porte sur la construction d'une base de données pour l'apprentissage et le test des modèles adaptée à la présence de forts gradients et de discontinuités : après avoir identifié et éliminé de potentielles valeurs simulées aberrantes dues à des mauvais équilibres, on s'intéressera à des techniques d'enrichissement automatique de base de données dans des régions d'intérêt telles que des zones à forts gradients ou à discontinuité où l'erreur de prédiction est la plus élevée. Pour cela, on pourra s'appuyer sur des techniques de planification adaptative [2] ou d'active learning [3], par exemple en s'inspirant de méthodes adversariales [4].

Le second axe concerne la construction de modèles de machine learning adaptés à la présence de forts gradients et de discontinuités. Cette partie visera à étudier et évaluer les architectures physiques-inspirées basées sur Neural ODE [5] pour intégrer des contraintes et connaissances physiques dans les modèles, ainsi que ses récents développements avec les modèles de diffusions et normalizing flow [6]. Les données disponibles simulées par Nuclea Toolbox permettront l'entraînement et l'évaluation de cette approche. Nous envisagerons l'ajout de diverses régularisations pour réduire l'effet de discontinuités (gradient clipping, weight decay, ...).

Références :

[1] Chatelard P., Reinke N., Arndt S., Belon S., Cantrel L., Carénini L., Chevalier-Jabet K., Cousin F., Eckel J., Jacq F., Marchetto C., Mun C., Piar L., "ASTEC V2 severe accident integral code main features, current V2.0 modelling status, perspectives", Nuclear Engineering and Design, 272 (June 2014), p.119-135.

[2] Marmin S., Planification adaptative d'expériences et krigeage non-stationnaire : application à la prise en compte des incertitudes dans les études mécaniques en sûreté nucléaire, thèse IRSN, 2017.

[3] Settles, B., Active learning literature survey. University of Wisconsin-Madison, 2009.

[4] Samarth Sinha, Sayna Ebrahimi, Trevor Darrell, Variational Adversarial Active Learning. ICCV 2019.

[5] Ricky T. Q. Chen, Yulia Rubanova, Jesse Bettencourt, David Duvenaud. Neural Ordinary Differential Equations. NeurIPS, 2018.

[6] Kobyzev, I., Prince, S. J., & Brubaker, M. A. (2020). Normalizing flows: An introduction and review of current methods. IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence, 43(11), 3964-3979.

Profil recherché:

Etudiant de master 2 Recherche ou élève-ingénieur en Intelligence Artificielle.

Informations pratiques

Les lieux du stage sont l'IRSN Cadarache situé dans les Bouches-du-Rhône (13) et le Laboratoire d'Informatique des Systèmes (LIS) à Marseille.

La rémunération du stage est de 1000 euros/mois.

Les encadrants du stage sont Stéphane Ayache et François-Xavier Dupé au LIS et Jean Baccou et Raphael Monod à l'IRSN.