

## Sujet de thèse :

# Fiabilisation des codes de calcul d'accidents graves par assimilation de données et analyse de sensibilité.

## Contexte

Le cadre du travail de thèse proposé concerne la simulation des accidents graves des réacteurs nucléaires à eau légère. En situation accidentelle, le combustible nucléaire peut fondre et interagir avec les structures environnantes pour former un bain de corium dans le cœur du réacteur puis, après relocalisation, dans le fond de la cuve. En cas de percement de la cuve, le corium peut ensuite se relocaliser dans le puits de cuve, atteindre le radier et interagir avec le béton qui le constitue. En cas de présence d'eau, l'interaction entre le corium et le réfrigérant peut engendrer une explosion de vapeur, événement énergétique pouvant compromettre l'intégrité de l'enveloppe du réacteur.

Les logiciels de simulation (ou codes de calcul) des accidents graves permettent d'améliorer la sûreté des réacteurs nucléaires, en donnant des informations aidant à la prédiction de la défaillance de barrières ou de systèmes de sûreté.

La simulation du cheminement du corium dans le réacteur peut se faire par deux approches : soit une approche centrée sur une étape particulière du cheminement, soit une approche globale permettant le couplage et l'interaction entre les phénomènes physiques présents dans plusieurs étapes du cheminement. Les codes dédiés à la 1<sup>ère</sup> approche sont généralement maillés (ou du moins en partie) avec une modélisation de la physique entrant en jeu décrite dans les mailles sous forme de loi de fermeture (modélisation sous-maille). Nous pouvons par exemple citer MC3D qui simule l'interaction corium eau et l'explosion de vapeur. Pour la 2<sup>nde</sup> approche, les codes, comme par exemple PROCOR, sont constitués d'un ensemble de modèles (intégraux ou limités dans la finesse du maillage) décrivant chaque étape du cheminement du corium pendant l'accident. Ces modèles peuvent être ensuite assemblés pour décrire l'enchaînement des étapes en tenant compte de l'aspect transitoire de la physique.

Les modèles de ces codes et la façon dont ils sont couplés utilisent généralement des jeux de paramètres ajustés sur des résultats expérimentaux ou sur des résultats de calculs fins de type DNS.

## Objectif et méthodologie

L'objectif de cette thèse est de construire une méthodologie visant à quantifier et à augmenter la précision de ces codes de calcul. Pour cela, l'assimilation de données et l'analyse de sensibilité sont envisagées.

Les modèles des codes de calculs sont paramétriques avec des paramètres d'entrée (définissant la simulation voulue par l'utilisateur) et avec des paramètres de modèles (propres à chaque modèle). Ainsi, l'amélioration de la précision des valeurs des paramètres de modèles participe à l'amélioration de la précision des codes de calcul.

Les résultats de simulation de ces codes peuvent être de type scalaire ou fonctionnel (dépendant du temps ou de l'espace).

Les grandes étapes envisagées pour le travail de thèse sont présentées ci-dessous.

Dans un premier temps, une hiérarchisation des paramètres de modèles permettra de réduire la dimension de l'espace des paramètres. Pour cela, des méthodes de criblage pourront être mises en œuvre. Parmi celles couramment utilisées, nous pouvons citer celle de Morris[1] qui permet de discriminer les paramètres non influents de ceux ayant un effet linéaire et de ceux ayant un effet non linéaire et / ou en interaction avec d'autres paramètres. Il a l'inconvénient de nécessiter un plan d'expérience spécifique, OAT (One At a Time). Une autre méthode de criblage possible basée sur les mesures de dépendance [2] ne nécessite pas de plan d'expérience particulier. Un plan avec de bonnes propriétés d'occupation de l'espace (LHS à discrédance faible, par exemple) pourra ainsi être utilisé pour le criblage des paramètres puis réutilisé plus tard pour d'autres tâches comme la construction de métamodèles.

Ensuite, une méthodologie de calibration des paramètres de modèles sera à mettre en place. Pour cela, des méthodes d'assimilation de données pourront être utilisées afin de quantifier l'écart entre la simulation de ces logiciels et les résultats de référence, expérimentaux ou issus de calculs fins de type DNS, pour in fine définir un jeu de paramètres ajustés minimisant cet écart. Ces méthodes présentent en outre l'avantage de permettre d'assimiler tout nouveau résultat enrichissant la base de référence (expérimental ou DNS) et de prendre ainsi en compte de nouvelles connaissances dans la physique des phénomènes entrant en jeu. Pour réaliser cette assimilation, la calibration bayésienne qui a connu un essor important ces dernières années [3,4] pourra être envisagée.

Suivant la complexité et le temps de calcul des codes, l'utilisation de métamodèles peut s'avérer nécessaire. Leur construction se fera sur un nombre réduit de paramètres, sélectionnés à l'issue de l'étape de criblage. Les méthodes de construction de métamodèles basées sur l'apprentissage, de type machine learning, ont considérablement évolué ces derniers temps. Parmi celles-ci, nous pouvons citer les réseaux de neurones, les forêts aléatoires [5], les polynômes de chaos ou encore le Krigeage par processus gaussien.

Lors de la mise en place de la méthodologie de calibration, un intérêt tout particulier sera porté sur la propagation d'incertitudes. En plus de l'obtention des incertitudes des paramètres calibrés, une estimation d'erreur de modèle pourrait être envisagée [4].

Enfin, une analyse de sensibilité des résultats des codes de simulation aux paramètres d'entrée, globalement et pour chaque modèle, contribuera également à l'augmentation de la précision des résultats. En effet, cette analyse de sensibilité permet d'identifier les paramètres et modèles les plus influents, sur lesquels une meilleure connaissance (par de nouvelles études, de nouvelles expérimentations...) a le plus d'effet sur la précision des résultats de simulation.

Les analyses de sensibilité, basées par exemple sur le calcul des indices de sensibilité globale de Sobol [6], nécessitent généralement un grand nombre d'échantillons pour converger, impliquant ici aussi la construction et l'utilisation de métamodèles.

## Code de calcul d'application

L'application de la méthodologie sera mise au point pour la modélisation de l'ICE (Interaction Corium Eau) qui utilise le code de calcul MC3D, avec la volonté d'être le plus générique possible afin d'être utilisable et transposable aisément aux autres codes de calcul d'accident grave.

Ce choix réside dans le fait que l'interaction corium eau est un phénomène complexe, fortement non linéaire, avec une non monotonie des résultats, dans lequel de nombreux mécanismes interagissent et que, en terme de sûreté, il peut potentiellement compromettre l'intégrité de l'enceinte du réacteur.

MC3D [7], est un code eulérien, multiphasique, multiconstituant, décrivant les interactions entre le corium fondu et l'eau liquide dans un domaine discrétisé avec un maillage 3D structuré. Deux modules permettent de modéliser chacune des deux phases de l'interaction corium eau. La première est dédiée

à la phase de prémélange durant laquelle le jet de corium est grossièrement fragmenté en gouttes millimétriques en pénétrant dans l'eau. Les températures sont telles que l'eau entre dans un régime d'ébullition en film autour du corium. La seconde est dédiée à la modélisation de l'explosion proprement dite où, suite à une déstabilisation locale du film de vapeur entourant les gouttes de corium, celles-ci sont fragmentées finement (taille des fragments de l'ordre de 50 $\mu$ m) accroissant ainsi fortement la surface d'échange et la génération de vapeur provoquant une onde de pression. Cela s'apparente à une explosion qui, générée, se propage dans le mélange grossier de gouttes de corium et d'eau, fragmentant les gouttes à son passage et entretenant ainsi l'explosion. Dans le code, la physique est décrite par des modèles sous-maille.

## Données expérimentales

La base expérimentale de ce phénomène contient une quinzaine d'essais réalisés à différentes échelles sur plusieurs installations. Parmi les essais pouvant être utilisés comme base de référence pour la calibration des modèles de MC3D nous pouvons citer ceux réalisés sur les installations FARO [8] et KROTOS [9,10].

Un stage de fin d'étude ingénieur / master 2 est en cours pour exploiter et analyser les résultats expérimentaux disponibles et les organiser en vue de la phase de calibration.

Parmi les paramètres d'entrée sur lesquels sera pratiquée l'analyse de sensibilité, les propriétés physiques du corium présentent un intérêt particulier de par leur influence montrée lors d'une étude préliminaire et par les moyens expérimentaux du CEA. La finalité étant une meilleure utilisation de ces propriétés et une identification précise des besoins pour la simulation (qui permettra un soutien aux propositions de campagnes de mesure par exemple sur les plateformes expérimentales du CEA VITI [11] ou ATTHILA [12]).

## Utilisation, capitalisation des résultats de la thèse

Les résultats de cette thèse concourront à l'effort d'amélioration de la simulation des accidents graves.

Les métamodèles développés pendant cette thèse pourront aussi être utilisés en tant que modèle dans la plateforme PROCOR [13]. Celle-ci, développée au DTN/SMTA/LMAG, capitalise la modélisation de la propagation du corium sous forme d'un ensemble de modèles physiques pouvant être assemblés dans des applications spécifiques à la simulation souhaitée (e.g. pour un type de réacteur particulier et une étape de propagation définie). Pour un phénomène à modéliser il peut exister plusieurs modèles ; le choix du modèle à utiliser dépend de l'application ou de l'utilisateur. Actuellement, la plateforme comprend un module statistique basique qui utilise URANIE [14]. Les méthodes développées dans le cadre de cette thèse seront capitalisées dans ce module statistique.

A l'issue de cette thèse, le candidat aura développé des compétences (en probabilités, statistique, physique des accidents graves...) qui lui permettront de postuler à un poste de recherche ou de R&D.

## Références

1. M.D. MORRIS and T.J. MITCHELL. "Exploratory designs for computational experiments". *Journal of Statistical Planning and Inference* **43**(3), pp. 381–402 (1995).
2. M. DE LOZZO and A. MARREL. "New improvements in the use of dependence measures for sensitivity analysis and screening". *Journal of Statistical Computation and Simulation* **86**(15), pp. 3038–3058 (2016).
3. W.N. EDELING, P. CINNELLA, R.P. DWIGHT, and H. BIJL. "Bayesian estimates of parameter variability in the k- $\epsilon$  turbulence model". *Journal of Computational Physics* **258**, pp. 73–94 (2014).
4. M. CARMASSI, P. BARBILLON, M. CHIODETTI, M. KELLER, and E. PARENT. "Bayesian calibration of a numerical code for prediction". *Journal de la Société Française de Statistique* **160**(1), pp. 1–30 (2019).
5. L. BREIMAN. "Random Forests". *Machine Learning* **45**(1), pp. 5–32 (2001).
6. I.M. SOBOL. "Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates". *Mathematics and Computers in Simulation* **55**(1–3), pp. 271–280 (2001).
7. R. MEIGNEN. Status of the qualification program of the Multiphase Flow code MC3D. *Proceedings of ICAPP '05*, vol. 5, American Nuclear Society (ANS), Séoul, Korea (2005).
8. D. MAGALLON, I. HUHTINIEMI, and H. HOHMANN. "Lessons learnt from FARO/TERMOS corium melt quenching experiments". *Nuclear Engineering and Design* **189**(1), pp. 223–238 (1999).
9. I. HUHTINIEMI, D. MAGALLON, and H. HOHMANN. "Results of recent KROTOS FCI tests: alumina versus corium melts". *Nuclear Engineering and Design* **189**(1–3), pp. 379–389 (1999).
10. *OECD/SERENA Project Report, summary and conclusions*. NEA/CSNI/R(2014)15. OECD NEA (2015).
11. P. PILUSO, J. MONERRIS, C. JOURNEAU, and G. COGNET. "Viscosity Measurements of Ceramic Oxides by Aerodynamic Levitation". *International Journal of Thermophysics* **23**(5), pp. 1229–1240 (2002).
12. A. QUAINI, C. GUÉNEAU, S. GOSSÉ, T. ALPETTAZ, E. BRACKX, R. DOMENGER, et al. "Experimental contribution to the corium thermodynamic modelling – The U–Zr–Al–Ca–Si–O system". *Annals of Nuclear Energy* **93**, pp. 43–49 (2016).
13. R. LE TELLIER, L. SAAS, and F. PAYOT. Phenomenological analyses of corium propagation in LWRs: the PROCOR software platform. *proc. The 7th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR-2015*, , Marseille, France (2015).
14. F. GAUDIER. "URANIE: The CEA/DEN Uncertainty and Sensitivity platform". *Procedia - Social and Behavioral Sciences* **2**(6), pp. 7660–7661 (2010).

## Contacts

Claude BRAYER

Email : [claude.brayer@cea.fr](mailto:claude.brayer@cea.fr)

CEA Cadarache

DTN/SMTA/LMAG

F-13108 Saint Paul Lez Durance cedex

Téléphone : +33 4 42 25 43 01

Benoît HABERT

Email : [benoit.habert@cea.fr](mailto:benoit.habert@cea.fr)

CEA Cadarache

DTN/SMTA/LMAG

F-13108 Saint Paul Lez Durance cedex

Téléphone : +33 4 42 25 78 98

## Université / Ecole doctorale :

Toulouse III - Mathématiques - Informatique - Télécommunications de Toulouse (MITT)

## Co-direction de thèse :

Fabrice GAMBOA

Université Toulouse III

Institut de Mathématiques de Toulouse

IMT Université Paul Sabatier

F-31062 Toulouse cedex 9

Amandine MARREL

CEA Cadarache

DER/SESI/LEMS

F-13108 Saint Paul Lez Durance cedex

## Localisation de la thèse :

CEA Cadarache, F-13108 Saint Paul Lez Durance cedex