

Sujet de stage :

Initialisation d'un code de calcul par des outils d'apprentissage statistique

Durée : 4 à 6 mois

Démarrage : début avril 2023

Lieu : CEA-Saclay, site de Saclay

Futurs encadrants ou contacts :

Gauthier FAUCHET gauthier.fauchet@cea.fr, Geoffrey DANIEL geoffrey.daniel@cea.fr

Diplôme préparé : Master 2 - Diplôme École d'ingénieurs

Possibilité de poursuite en thèse : Non

Contexte

Le CEA développe des outils de calcul pour la simulation thermohydraulique et la mécanique des fluides, utilisés en particulier pour les réacteurs et les installations nucléaires. Parmi ces outils, le code de thermohydraulique Flica5 permet de simuler l'écoulement et l'échange de chaleur au sein du cœur de réacteur. Son objectif principal est de déterminer la marge à la crise d'ébullition pour différents types de scénarios accidentels en fonction des paramètres de conception du cœur (point de fonctionnement, dimensions géométriques... etc).

Dans le cadre des démonstrations des critères de sûreté, nos partenaires utilisant ce logiciel sont amenés à mener des études de sensibilité pour comprendre l'influence des paramètres de conception. Cela conduit à lancer un très grand nombre de simulations sur des géométries figées en modifiant seulement quelques paramètres (par exemple le débit, la puissance dégagée). Il est dans ce cadre nécessaire de réduire au maximum le temps de simulation, sans pour autant perdre en précision dans le calcul.

Un des leviers d'action consiste à se concentrer sur les simulations visant la recherche d'un état stationnaire. Dans ce cas précis, une solution pour accélérer l'obtention de cet état est de fournir une condition initiale au calcul la plus proche possible de l'état stationnaire. En effet, il est attendu que le nombre d'itérations du code est alors réduit si le système initial est déjà dans un état proche de l'état stationnaire. Actuellement, la condition initiale est choisie par un algorithme multi-1D et n'est généralement pas complètement adaptée aux paramètres mis en entrée du code (qui est 3D), ce qui nécessite une convergence longue pour atteindre l'état stationnaire.

Objectifs

À cette fin, l'objectif de ce stage consiste à développer une approche fondée sur l'apprentissage statistique pour fournir des conditions initiales pertinentes. Une base d'apprentissage supervisée peut être construite à partir d'un plan d'expérience en utilisant le code de calcul sur certains jeux de paramètres d'entrée afin de fournir les états stationnaires correspondants. Un modèle d'apprentissage

machine, de type réseau de neurones, aurait alors pour tâche d'effectuer la prédiction des états stationnaires à partir des paramètres d'entrée. La solution fournie par le modèle sur de nouveaux paramètres sera alors utilisée comme condition initiale pour le code de calcul.

Le travail du ou de la stagiaire consistera à mettre en place le problème dans le paradigme de l'apprentissage machine, construire la base de données adéquate à partir du code de calcul et effectuer la procédure d'apprentissage. Il ou elle évaluera ensuite les performances, à la fois sur la précision des solutions obtenues par rapport à l'état stationnaire attendu et sur l'apport au niveau du temps de calcul lorsque la prédiction est utilisée en nouvelle condition initiale.

Le développement de modèles d'incertitudes associés aux prédictions du modèle d'apprentissage et l'analyse de sa robustesse seront aussi des axes d'études qui pourront être abordés au cours de ce stage.

Une autre stratégie possible pour accélérer les calculs serait de planifier judicieusement l'exécution des calculs, en utilisant par exemple comme condition initiale le résultat d'un précédent calcul sur d'autres paramètres. Pour que cette stratégie puisse être efficace, il faut lancer les calculs dans le bon ordre, afin que les paramètres entre deux évaluations successives soient les plus « proches » possibles. Les deux stratégies envisagées pourront être testées et comparées.

Notons que ces stratégies ne nécessitent pas de revalider le code de calcul, la solution stationnaire ne devant pas dépendre de la condition initiale. Cela n'entraîne donc pas a priori de dégradation la solution fournie in fine, le dernier mot revenant au code de calcul.

Environnement de travail

Le stage s'effectuera au sein du Service de Génie Logiciel pour la Simulation.

Les développements logiciels se feront avec le code Flica5 pour les simulations thermohydraulique et la bibliothèque Python TensorFlow/Keras pour la partie apprentissage machine.

Compétences requises ou souhaitées

Apprentissage statistique par réseaux de neurones

Langage Python

Mécanique des fluides et thermohydraulique

Résolution de système d'équations aux dérivées partielles

Profil recherché

Formation Master 2, Ecole d'Ingénieurs

Mots-clés

Intelligence artificielle. Réseaux de neurones. Deep Learning. Codes de calcul.

Références

FLICA-4: a three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications, I. Toumi et al., Nuclear Engineering and Design (2000)

A Survey of Uncertainty in Deep Neural Networks, J. Gawlikowski et al. (2021)