

Proposition de thèse CIFRE CERMICS-EDF

Quantification et hiérarchisation des incertitudes dans un processus de simulation numérique

5 Février 2015

1 Contexte industriel et problématique

En tant qu'équipement important pour la sûreté et la disponibilité des centrales nucléaires, certains matériels de robinetterie doivent être qualifiés aux conditions normales et accidentelles de fonctionnement. La qualification a pour objectif de vérifier la capacité du matériel à assurer sa fonction dans des conditions de fonctionnement et pour une durée de vie spécifiées. Les méthodes de qualification peuvent être la qualification par analogie, par expérience d'utilisation ou par essai. La qualification par essai est assurée par le fabricant de robinet et s'avère coûteuse. Les constructeurs des robinets dans les centrales nucléaires ont donc de plus en plus recours à la simulation numérique pour étudier le comportement de leur matériel en conditions de qualification. Cette simulation est multiphysique car elle fait intervenir à la fois des phénomènes de mécanique des fluides, de thermique et de mécanique des solides. En raison de contraintes de temps et de moyens, les constructeurs s'appuient sur des modélisations simplifiées, permettant des simulations à un temps de calcul réduit. D'autre part, dans le souci de mieux comprendre les phénomènes physiques mis en jeu et d'obtenir des simulations plus réalistes, EDF développe en interne des modèles complexes [1], et par conséquent au coût de calcul nettement plus élevé.

Par ailleurs, dans le cadre d'un partenariat entre EDF et un fabricant de robinets, un essai sur un prototype fortement instrumenté a été mis en place sur la boucle thermo-hydraulique *CYHERE*. L'expérience consiste en une succession de chocs thermiques alternés par passage d'un fluide. Il résulte de cet essai une quantité importante de données expérimentales, telles que des températures mesurées par des thermocouples, des efforts de serrage dans des goujons et des mesures d'ouverture de bride par des capteurs.

Disposer à la fois d'un modèle complexe, de modèles plus ou moins simplifiés et de mesures expérimentales ouvre plusieurs perspectives. La plus évidente pour EDF est la capacité de porter un regard critique sur les modèles simplifiés utilisés par les fournisseurs, en se servant du modèle complexe comme d'une référence. D'autre part, il semble pertinent d'identifier parmi ces différents modèles le plus adapté, en termes de compromis complexité-précision, pour prédire des quantités physiques particulières. Dans cette problématique, le modèle complexe, mis lui-même en compétition avec les autres modélisations, ne peut plus être pris comme référence ; c'est sur la base des données expérimentales que doit s'opérer cette sélection. Par exemple, même si le modèle complexe se révélait globalement le plus adéquat, un modèle simplifié pourrait très bien s'avérer plus avantageux pour prédire une quantité dont les mesures expérimentales seraient très dispersées. En effet, le résultat de simulation, quoique vraisemblablement moins précis, pourrait appartenir à l'intervalle de confiance expérimental ; autrement dit l'écart de modélisation pourrait être négligeable devant la dispersion des mesures.

Ces enjeux incitent EDF à concevoir une méthodologie et des outils pour quantifier et mettre en regard les erreurs et les incertitudes qui entâchent les résultats d'un modèle de simulation numérique. Les erreurs sont entre autres imputables :

- aux hypothèses de modélisation (p. ex. conditions aux limites, types de lois de comportement des matériaux) ;
- à la discrétisation du problème physique, en espace (maillage par éléments finis) comme en temps (résolution itérative d'un problème instationnaire).

À ces deux facteurs s'ajoutent des incertitudes sur les valeurs de certains paramètres du modèle, qui se propagent sur les résultats. Elles sont dues soit à un manque de connaissance (p. ex. nombre limité de mesures), soit à une variabilité intrinsèque. Plutôt qu'un écart à la réalité, les incertitudes sont à appréhender comme des fluctuations aléatoires autour d'une "vraie" valeur inconnue. Elles se prêtent ainsi tout à fait à une formalisation probabiliste, consistant à représenter les paramètres d'entrée incertains par des variables aléatoires. La quantification des incertitudes passe alors classiquement par un nombre potentiellement important d'évaluations du modèle en des valeurs spécifiques des paramètres, représentatives de leur variabilité statistique. Une telle approche sera toutefois délicate à mettre en œuvre dans le cas de l'étude de notre modèle complexe, et l'on devra envisager des stratégies pour contourner cette difficulté.

2 Sujet de thèse

Un objectif important de la thèse est de concevoir une méthodologie et des outils pour quantifier et hiérarchiser les différentes sources d'erreur et d'incertitudes (appelons-les toutes indifféremment "incertitudes" ou "erreurs" par souci de simplicité) intervenant dans la modélisation numérique. Afin que les développements puissent servir à traiter non seulement le problème de robinetterie qui nous intéresse principalement ici, mais aussi des sujets touchant d'autres activités à EDF R&D, nous privilégierons des approches *non intrusives*, autrement dit pouvant s'appliquer à une large classe de modèles sans nécessité de modifier les systèmes d'équations sous-jacents.

Chaque type d'erreur – de modèle, de discrétisation et sur les paramètres d'entrée – pris indépendamment a fait l'objet de nombreux travaux (citons entre autres [2] pour la prise en compte des erreurs de modélisation au sein d'une hiérarchie de modèles connue *a priori* et leur équilibrage avec les erreurs de discrétisation, [3, 4, 5] pour les erreurs de discrétisation et [6, 7] pour les incertitudes paramétriques), mais leur hiérarchisation et leur prise en compte simultanée n'a fait l'objet que de peu de publications à notre connaissance.

2.1 Propagation des incertitudes paramétriques *via* une réduction de modèle

L'étude des incertitudes paramétriques a fait l'objet de nombreux travaux à EDF, avec notamment des méthodes basées sur des *métamodèles*, c'est-à-dire des approximations analytiques d'une certaine quantité d'intérêt (scalaire ou vectorielle) retournée par le modèle. En particulier, les métamodèles de type *chaos polynomial* correspondent à des développements sur une base de polynômes orthogonaux par rapport aux lois de probabilité des paramètres d'entrée [8]. La construction d'un chaos polynomial repose sur un certain nombre (si possible modéré) d'évaluations du modèle effectuées une fois pour toutes (étape *offline*). Le plus souvent, l'échantillonnage des paramètres est effectué de sorte à remplir "au mieux" leur domaine de variation (tirages aléatoires ou quasi-aléatoires). Ensuite, il est possible d'évaluer une approximation du modèle en n'importe quel vecteur de paramètres à un coût de calcul

négligeable (étape *online*). Il est à noter que les éléments de la base d'approximation sont choisis *ab initio* ; ils ne dépendent que des distributions des paramètres, et ne sont donc pas adaptés aux propriétés mathématiques de la solution. On s'intéresse donc à des approches alternatives permettant de chercher la solution dans un espace de petite dimension et adapté au problème, l'objectif étant de réduire l'effort de calcul *offline* pour obtenir une précision donnée.

En premier lieu, la méthode des *bases réduites* [9, 10] permet d'obtenir à moindre coût une approximation de la solution complète. L'idée est d'utiliser une procédure *offline* où des solutions précises sont calculées pour quelques valeurs *sélectionnées* – et non plus (quasi-)aléatoires– des paramètres puis à effectuer le reste des calculs, pour un nombre relativement important de valeurs des paramètres (par exemple dans le cadre d'une analyse d'incertitudes par échantillonnage) en utilisant une projection de Galerkin sur la base des solutions précises calculées à l'étape *offline*. L'efficacité de la méthode des bases réduites repose sur plusieurs ingrédients ; signalons les travaux récents à l'ENPC sur l'évaluation robuste de l'estimation d'erreur *a posteriori* et la formulation non-intrusive de la méthode [11, 12]. Des méthodes de bases réduites intrusives ont déjà été proposées dans d'autres contextes pour la résolution de problèmes instationnaires [13], ou des problèmes non-linéaires comme les problèmes de contact en mécanique [14, 15].

Une alternative à la méthode de bases réduites est la méthode dite *progressive generalized decomposition* (PGD) [16, 17]. Cette approche, originellement introduite par Pierre Ladevèze sous le nom de *méthode LATIN*, consiste à représenter la solution d'un problème paramétré comme une somme de fonctions séparées en chacune des variables et/ou paramètres ; ces fonctions ne sont pas définies *a priori*, mais calculées de manière itérative. Ces méthodes ont été étudiées récemment à l'ENPC, en particulier sur des problèmes de contact [18]. Elles ont également été analysées d'un point de vue numérique pour la résolution de problèmes instationnaires en mécanique des fluides [19].

Une partie importante du travail de thèse sera consacrée à l'étude de versions non intrusives des méthodes de réduction de modèle (bases réduites et PGD) pour traiter des problèmes non-linéaires instationnaires. En outre, en vue de propager les incertitudes paramétriques, on s'attachera à coupler ces méthodes avec des mesures de probabilité spécifiées pour les variables d'entrée. Dans un premier temps, l'étude se limitera à la partie thermique du calcul (multiphysique) du robinet.

2.1.1 Quantification des erreurs de discrétisation

Les erreurs de discrétisation ont été plus largement étudiées à EDF pour des problèmes de thermique et de mécanique [20, 21, 22]. Pour l'application visée ici de robinetterie, l'adaptation du maillage doit être guidée par les grandeurs physiques d'intérêt (par exemple, serrage des goujons de la robinetterie et températures observées aux thermocouples positionnés sur le robinet).

Les estimateurs d'erreur en quantité d'intérêt, pour des modélisations non linéaires (incluant du contact et des lois de comportement non linéaires) seront donc étudiés. Ces estimateurs d'erreur de maillage devront par ailleurs être couplés à des estimateurs d'erreur liés à la méthode de réduction de modèles employée, afin d'évaluer l'importance relative entre les deux sources d'erreur possibles (erreur de maillage et erreur liée à la réduction de modèles) dans l'erreur globale. Mentionnons que de tels estimateurs d'erreur ont déjà été étudiés dans le cadre de la PGD [23].

2.1.2 Quantification des erreurs liées au choix du modèle

Enfin, une autre thématique importante de la thèse portera sur l'estimation des erreurs liées au choix du modèle utilisé pour représenter le comportement des pièces de robinetterie, au regard des données

fournies par les mesures expérimentales. Les méthodes les plus couramment utilisées pour résoudre ce problème de sélection de modèles sont des méthodes bayésiennes [24].

L'étude de ces méthodes et leur application au problème de robinetterie considéré ici feront l'objet d'un dernier volet de la thèse.

3 Organisation et moyens

Cette thèse donnera lieu à une convention CIFRE. L'étudiant réalisera la majeure partie de sa thèse au sein de l'équipe EDF R&D MMC. Il se rendra régulièrement à l'ENPC (par exemple, une journée par quinzaine). Les encadrants sont :

- EDF : Sébastien Meunier, Géraud Blatman /{sebastien.meunier,geraud.blatman}@edf.fr
- CERMICS : Alexandre Ern, Virginie Ehrlacher /{ern,ehrlachv}@cermics.enpc.fr

La thèse débutera au second semestre 2015 et sera portée par le projet Incertitudes. Les semestres 1 à 4 de la thèse porteront principalement sur l'étude de modèles réduits pour le problème thermique. Les semestres 5 et 6 de la thèse porteront davantage sur l'étude de la simulation des problèmes mécaniques, et en particulier sur les problèmes de contact et éventuellement de plasticité. Le planning prévisionnel est le suivant :

- Semestre 1 : Etude théorique et mise en œuvre numérique d'une méthode de bases réduites non-intrusive sur des problèmes paramétriques de propagation thermique non-linéaires (ou quasi-linéaires) en régime instationnaire.
- Semestre 2 : Etude théorique et mise en œuvre numérique d'une méthode PGD non-intrusive sur des problèmes paramétriques de propagation thermique non-linéaires (ou quasi-linéaires) en régime instationnaire.
- Au cours des semestres 1 et 2 : Prise en compte de la distribution de probabilité des paramètres, vus comme des variables aléatoires, dans la construction et l'utilisation de ces modèles réduits, pour faire des calculs de propagation d'incertitudes sur des données d'intérêt.
- Semestre 3 : Etude d'estimateurs d'erreur combinés pour estimer les proportions respectives des erreurs liées à la réduction de modèles (par PGD ou bases réduites) et à l'erreur de maillage.
- Semestre 4 : Etude théorique et mise en œuvre numérique des méthodes bayésiennes utilisées pour effectuer de la sélection de modèles à partir de mesures expérimentales. On s'attachera en particulier à développer une méthode permettant d'évaluer le gain d'un modèle simplifié résolu exactement par rapport à un modèle plus complexe mais résolu à l'aide d'une méthode PGD ou de bases réduites.
- Semestre 5 et 6 : Déclinaison des travaux précités sur la partie mécanique du problème de robinetterie, avec études du contact entre les pièces de l'assemblage, et éventuellement d'un comportement en plasticité. Au semestre 6, le doctorant appliquera, en interne EDF, les méthodes développées aux semestres précédents à une étude industrielle de robinetterie intéressant EDF.

4 Profil

Ingénieur ou titulaire d'un Master II, spécialité mathématiques appliquées. Goût pour la mécanique des solides et la thermique, première expérience d'utilisation d'un code éléments finis.

References

- [1] J.-P. Mathieu, J. Ferrari, J.-F. Rit and D. Hersant. *Modeling of thermal shock effects on a globe valve body-bonnet bolted flange joint*. Proceedings of PVP2009, July 26-30, 2009, Prague, Czech Republic
- [2] M. Braack and A. Ern. *A posteriori control of modeling errors and discretization errors*. Multiscale Model. Simul., 1(2) P.221-238, 2003.
- [3] R. Verfurth. *A posteriori Error Estimation Techniques for Finite Element Methods*. Oxford University Press, 2013.
- [4] M. Ainsworth and J. T. Oden. *A posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. Wiley, 2000.
- [5] R. Becker, R. Rannacher. *An optimal control approach to a posteriori error estimation in finite element methods*. Acta Numerica, vol. 10, p. 1-102, 2001.
- [6] O. Le Maitre, O. Knio. *Spectral Methods for Uncertainty Quantification*. Springer, 2010.
- [7] G. Blatman. *Adaptive sparse polynomial chaos expansions for uncertainty propagation and sensitivity analysis*. Thèse de doctorat de l'université Blaise Pascal, 2009.
- [8] S. Dubreuil. *Analyse de sensibilité du serrage d'une tige-GV de centrale nucléaire*. Rapport de stage de master IFMA, 2011.
- [9] L. Machiels, A. T. Patera, C. Prud'homme, D. V. Rovas, G. Turinici, K. Veroy, *Reliable real-time solution of parametrized partial differential equations: reduced-basis output bound methods*, CJ Fluids Eng, vol. 124, p. 70-80, 2002.
- [10] Y. Maday, N. C. Nguyen, A. T. Patera, S. Pau, *A general multi-purpose interpolation procedure: the magic points*, Commun. Pure Appl. Anal., vol. 8, p. 383-404, 2008.
- [11] F. Casenave, A. Ern, T. Lelièvre. *Accurate and online-efficient evaluation of the a posteriori error bound in the reduced basis method*. ESAIM: Math. Model. Numer. Anal. 48, 207-229 (2014)
- [12] F. Casenave, A. Ern, and T. Lelièvre. *A nonintrusive Reduced Basis Method applied to aeroacoustic simulations*, to appear in Advances Comput. Math.
- [13] B. Haasdonk. *Convergence Rates of the POD-Greedy Method*. ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 47(3), pp 859-873, 2013.
- [14] J. Salomon, B. Wohlmuth, B. Haasdonk. *A Reduced Basis Method for Parametrized Variational Inequalities*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 50(5), 2011.
- [15] Z. Zhang, E. Bader, K. Veroy. *A Duality Approach to Error Estimation for Variational Inequalities*. <http://arxiv.org/abs/1410.2095>, 2014.
- [16] P. Ladevèze. *Nonlinear computational structural mechanics: new approaches and non-incremental methods of calculation*. Springer, Berlin, 1999.
- [17] A. Nouy. *Recent developments in spectral stochastic methods for the numerical solution of stochastic partial differential equations*. Archives of Computational Methods in Engineering, 16:251–285, 2009.
- [18] E. Cancès, V. Ehrlacher, T. Lelièvre. *Convergence of a greedy algorithm for high-dimensional convex problems*. M3AS, 21(12), pp 2433-2467, 2011.
- [19] A. Nouy and O. Le Maitre. *Generalized Spectral Decomposition Method for Stochastic Non Linear Problems*. Journal of Computational Physics, 228:202–235, 2009.

- [20] O. Boiteau. *Indicateur d'erreur spatiale en résidu pour la thermique transitoire*. Documentation officielle de Code_Aster, R4.10.03.
- [21] S. Meunier. *Analyse d'erreur a posteriori pour les couplages Hydro-Mécaniques et mise en oeuvre dans Code_Aster*. Thèse de doctorat de l'ENPC, 2007.
- [22] J. Delmas. *Stratégies de contrôle d'erreur en calcul de structures industrielles. Mise en oeuvre d'estimation d'erreur en quantité d'intérêt et d'adaptation de maillage*. Thèse de doctorat de l'université de Picardie Jules Verne, 2008.
- [23] P. Ladevèze, L. Chamoin. *On the verification of model reduction methods based on the proper generalized decomposition*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200, pp. 2032-2047, 2011.
- [24] C. Pereira, J. M. Stern. *Model selection: Full Bayesian approach*, *Environmetrics* 12, pp 559-568, 2001.