



Service de Génie Logiciel pour la Simulation
CEA Saclay

Propositions de stage 2024

2024 Internship proposals



Titre du stage

Application de schémas numériques hybrides ou virtuels pour la diffusion neutronique

Type de sujet

Développement de méthodes et de codes de calcul

Contexte du stage

Dans le cadre de la physique des réacteurs, la distribution de puissance est obtenue par le calcul du flux de neutrons [NEU]. Ce flux de neutrons est obtenu par la résolution de l'équation de transport de Boltzmann. Certains solveurs utilisent une discrétisation spatiale par un schéma Galerkin discontinu (DG) décentré amont tel que proposé, initialement dans le cadre du transport de particules, par Reed et Hill en 1973. Ce schéma de type éléments finis requiert la définition d'un espace d'interpolation et utilise des bases de polynômes le plus souvent limitées à des éléments géométriques à trois ou quatre côtés (segments ou arcs de parabole) en 2D, à des tétraèdres ou hexaèdres en 3D.

Durant les deux dernières décennies, les discrétisations par éléments finis sur des mailles polygonales (en 2D) ou polyédriques(3D) ont fait l'objet de nombreux travaux de par la "flexibilité" géométrique qu'offrent ces maillages, en particulier lorsque l'on considère des algorithmes de (dé-)raffinement. Dans ce contexte, tout un pan de recherche fructueux s'appuie sur des méthodes hybrides de type HHO ou HDG [HYB] ou encore des méthodes d'éléments finis virtuels [VEM].

Description du sujet du stage

Le but de ce travail de stage est de s'intéresser à ces méthodes dans le cadre géométries polygonales pour des applications en physique des réacteurs. Nous nous intéresserons dans un premier temps à prendre en main la littérature autour d'un modèle « jouet » avec l'équation de Poisson pour comprendre les mécanismes autour de ces schémas numériques. Ensuite, nous l'appliquerons sur une équation de la diffusion pour la neutronique, ainsi qu'une équation de séparation de phases si le temps le permet.

Les étapes de ce stage seront les suivantes :

- Prise en main de la bibliographie
- Première application à partir d'articles pour retrouver les résultats sur l'équation de Poisson
- Implémentation des méthodes dans une maquette
- Application à la diffusion et résultats numériques
- Ecriture de rapport de stage

Bibliographie-Références

[NEU] La neutronique. Monographie DEN, ouvrage collectif, Paris, CEA/Les Editions du Moniteur, 2015

[HYB] Di Pietro, D. *et. al. A review of Hybrid High-Order methods: formulations, computational aspects, comparison with other methods*, 2016

[VEM] Beirão da Veiga, L., Brezzi, F., Marini, L. D. and Russo, A., *The hitchhiker's guide to the virtual element method*, Math. Models Methods Appl. Sci. 24, 1541–1573, 2014

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse

Non

Profil du stagiaire

2ème année de Master ou 3ème année d'école d'ingénieurs

Programmation en C++, Python

Compétences en analyse numérique

Connaissance des outils informatiques : Git, CMake, LaTeX.

Localisation du stage**Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay**

DES/ISAS/DM2S/SGLS – Bât. 451

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s)

Nom/Name : CALLOO Ansar, BARON Rémi, LE TELLIER

Romain, MADIOT François

e-mail : ansar.calloo@cea.fr, remi.baron@cea.fr,romain.le-tellier@cea.fr, francois.madiot@cea.fr

Téléphone/phone number : 01 69 08 50 07, 01 69 08 28

36

Affiliation : DES/ISAS/DM2S/SGLS/LCAN,

DES/IRENE/DTN/SMTA/LMAG,

DES/ISAS/DM2S/SERMA/LLPR

Titre du stage

Analyse de la performance de la reconstruction des sections efficaces pour les calculs de cœur

Type de sujet

Développement de méthodes et de codes de calcul

Études et benchmarking

Contexte du stage

Dans le cadre de la physique des réacteurs, la distribution de puissance est obtenue par le calcul du flux de neutrons. Ce flux de neutrons est obtenu par la résolution de l'équation de transport de Boltzmann dont les données d'entrée sont les sections efficaces – des données nucléaires quantifiant l'interaction des neutrons avec la matière. Ces sections efficaces sont tabulées à l'issue d'un calcul réalisé à une échelle plus réduite et stockées dans un format donné sous la forme d'un fichier informatique. Ces différentes valeurs des sections efficaces forment les points de support dans une grille de paramétrage portant sur des quantités physiques que sont les paramètres de fonctionnement du cœur du réacteur (usure du combustible, température du combustible, densité du fluide caloporteur, etc...).

Dans une deuxième étape, les sections efficaces de cette grille sont relues pour effectuer un calcul à l'échelle du cœur du réacteur nucléaire. Lors de cette étape de relecture, les sections efficaces sont relues et reconstruites aux bonnes valeurs en fonction des valeurs des paramètres de fonctionnement du cœur du réacteur. Dans ce stage, nous nous intéresserons à cette étape de reconstruction.

Description du sujet du stage

Lors de cette étape de reconstruction, il est nécessaire de maintenir le rapport coût/précision le plus optimal possible. Pour des raisons historiques de performance et afin de limiter la taille de la grille, la reconstruction se fait au travers d'une interpolation multilinéaire ou de fonctions splines. Cette étape de reconstruction peut être un goulot d'étranglement dans le temps de calcul complet.

Dans ce stage, nous proposons d'investiguer l'utilisation de la plateforme Kokkos en C++ pour implémenter une librairie informatique dédiée à la reconstruction des sections efficaces. Kokkos est un modèle de programmation qui implémente des classes, des fonctions et une interface programmable permettant d'assurer la portabilité des performances entre différentes architectures, autant des CPU que des GPU (cartes graphiques).

Le travail de ce stage consistera à :

- Prendre en main la littérature sur le sujet autour de la reconstruction des sections efficaces
- Prendre en main Kokkos au travers de la documentation et des ressources disponibles
- Implémenter une première approche avec l'interpolation multilinéaire
- Evaluer les performances de l'implémentation sur différentes architectures
- Implémenter et évaluer d'autres approches (splines par exemple)

Bibliographie-Références

[NEU] La neutronique. Monographie DEN, ouvrage collectif, Paris, CEA/Les Editions du Moniteur, 2015

Ouverture éventuelle sur un sujet de thèse

Non

Profil du stagiaire

2ème année de Master ou 3ème année d'école d'ingénieurs

Programmation en C++

Compétences en analyse numérique

Connaissance des outils informatiques : Git, CMake, LaTeX.

Eventuelles notions en physique des réacteurs seront appréciées sans être obligatoires



Année académique 2023-2024

Localisation du stage

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Centre de Saclay

DES/ISAS/DM2S/SGLS – Bât. 451

91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

Personne(s) contact(s)

Nom/Name : CALLOO Ansar, BARON Rémi

e-mail : ansar.calloo@cea.fr, remi.baron@cea.fr

Téléphone/phone number : 01 69 08 50 07, 01 69 08 28 36

Affiliation : DES/ISAS/DM2S/SGLS/LCAN

Développement et benchmarking d'un solveur de diffusion HPC GPU sur base Kokkos

Labo d'accueil : ISAS/DES/DM2S/SGLS/LCAN

Encadrants : Adrien BRUNETON (adrien.bruneton@cea.fr), Pierre LEDAC (pierre.ledac@cea.fr)

Démarrage : mars 2024

La plateforme opensource de simulation thermohydraulique TRUST [1] permet la résolution des équations de Navier-Stokes pour des fluides incompressibles ou quasi-compressibles. La simulation peut se faire sur des domaines présentant une résolution spatiale extrêmement fine grâce aux très bonnes performances HPC du code. Ainsi des simulations de plus de 2Mards de mailles sur plus de 50'000 processeurs ont déjà été réalisés.

Ces performances ont été obtenues grâce au modèle de parallélisme de TRUST basé sur une approche SPMD: le domaine de calcul est subdivisé en sous-domaines, qui sont ensuite distribués via la bibliothèque MPI sur un ensemble de processeurs. Les CPUs de chacun des nœuds sont ainsi mis à contribution.

Les dernières avancées dans le domaine du HPC indiquent que la puissance des futures machines de calcul ne viendra plus seulement de ces CPUs, mais qu'une infrastructure hétérogène mélangeant CPU et GPU et/ou APU doit maintenant être envisagée. Par exemple, la nouvelle machine du CINES ("Ad Astra") tire d'ores et déjà la majorité de sa puissance de calcul des GPU, et cette tendance va se poursuivre.

Dans ce contexte, le code TRUST doit évoluer pour bénéficier de ces nouveaux moyens. Des premiers travaux ont déjà été menés, notamment pour s'interfacer avec les bibliothèques AmgX [3] et rocALUTION [4] pour la partie solveur linéaire, et l'utilisation d'un langage par directives OpenMP [5] pour les autres parties du code.

Le but de ce stage est de comparer ces approches avec ce que propose la bibliothèque opensource Kokkos [2], vers laquelle se tournent maintenant de nombreuses applications. L'avantage principal de Kokkos est de proposer une portabilité native vers de nombreuses architectures (différentes hiérarchisation de la mémoire, différents modèles d'exécution), et évite ainsi normalement de trop spécialiser le code.

Le stage débutera par une prise en main de Kokkos, et de réaliser un solveur de diffusion basée sur une approche conservative, représentatif du schéma numérique typique de TRUST. L'accent sera mis entre autres sur la gestion des indirections pour gérer les maillages non structurés.

Une fois une stratégie définie, l'implémentation se poursuivra par la mise en œuvre de ces mécanismes dans TRUST lui-même et une comparaison des gains obtenus par rapport aux stratégies actuellement implémentées sera faite. TRUST dispose par ailleurs déjà de quelques noyaux écrit en Kokkos, et le travail pourra aussi porter sur l'optimisation de ces éléments.

Lieu :

Le stage se déroulera dans les locaux du DES/ISAS/DM2S/STMF/LGLS au CEA Saclay. Un système de navette permet de s'y rendre depuis plusieurs points de départ autour de Paris, et en banlieue.

Compétences :

- bonne maîtrise du C++, avec des connaissances sur le parallélisme
- scripting Python, shell et une aisance avec l'environnement Linux en général,
- des connaissances sur la gestion de version GIT seront appréciées.

Rémunération : la rémunération est fixée par les grilles du CEA et dépend de la formation initiale du (de la) candidat(e) retenu(e).

Références

[1] TRUST - <https://github.com/cea-trust-platform/trust-code>

[2] Framework Kokkos : <https://github.com/kokkos>

[3] Librairie AmgX : <https://developer.nvidia.com/amgx>

[4] Librairie rocALUTION : <https://github.com/ROCmSoftwarePlatform/rocALUTION>

[5] OpenMP offloading : <https://enccs.github.io/openmp-gpu/introduction>

Internship Opportunity: Integration of Causality in High-Performance Computing for Seismic Wave Propagation Analysis

Subject: Finite Element Method, Causality, HPC, AI, ML

Context: Utilizing causality – a machine learning method that explores cause-and-effect relationships – in conjunction with finite element methods (FEM) – a numerical approach for modeling physics – holds the potential to enhance numerical analysis by improving result interpretations, deriving data driven models for faster computations, and improving computational accuracy and speed. This internship aims to investigate the same in context of seismic modeling (earthquake physics), we intend to integrate causality–FEM coupling to improve the analysis of seismic wave propagation [1]. The selected candidate will work on developing algorithms and implementing them in scientific computing tools that can then harness the capabilities of both approaches. The primary goal is to leverage causality techniques to determine and quantify the cause-effect relationship between different spatial locations within the earthquake FEM simulation measured over time. For this purpose, we aim at developing a causal graph based on the Pearl framework [3] and adapted to heterogeneous time series [4] data procured from FEM simulation. After learning the causal graphs – process of detecting relevant patterns in the data – acceleration for various stages of the FEM analysis, such as model setup, parameter estimation, solver preconditioning, and result interpretation is expected.

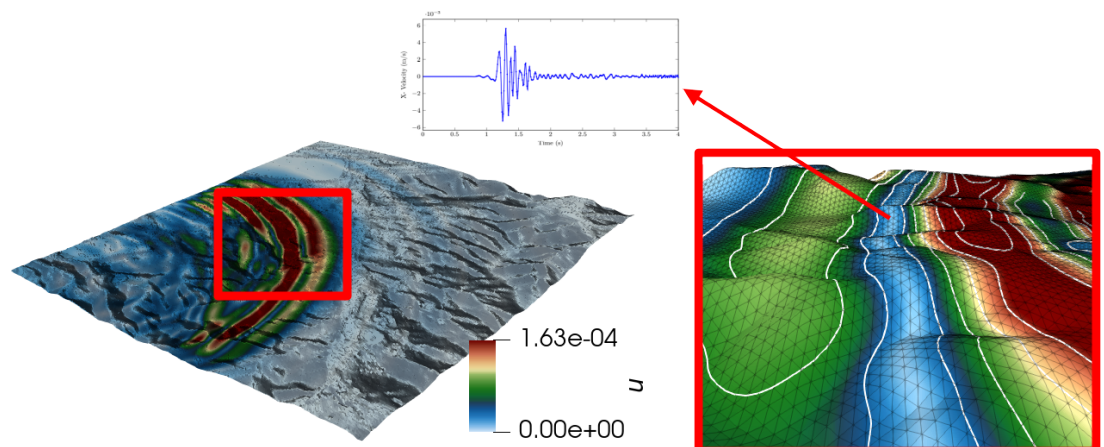


Figure 1: FEM solution for earthquake wave propagation obtained via a parallel code (PSD²) based on CPU parallelism. More than twelve thousand CPUs were used to obtain these results.

At CEA, we have been developing HPC finite element codes for seismic modeling – ArcaneFEM¹ and PSD² – which are designed to solve large-scale problem arising in seismic wave propagation. These simulations are of utmost importance as they play a key role in risk and disaster management. We believe that incorporating causality with in-place FEM solvers will significantly enhance the performance of the solver and perhaps better understand the uncertainties involved in the numerical simulations.

We believe this internship will provide a unique opportunity for individuals passionate about scientific computing, numerical simulations, and machine learning to contribute to cutting-edge research and gain valuable experience within a prestigious organization like CEA.

¹ FEM code based on Arcane [2] a C++ HPC framework dedicated to scientific computing <https://github.com/arcaneframework/arcanefem>

² PSD, acronym for Parallel Solid/Structural/Seismic Dynamics is an inhouse CEA code for seismic studies

- Objectives:** During the internship, the selected candidate will have the opportunity to collaborate with experts from the LESIM laboratory and LIAD laboratory. The main responsibilities will include:
- Conducting research on HPC-compatible FEM methods and causality algorithms for seismic wave propagation analysis.
 - Developing/implementing/benchmarking algorithms to integrate FEM and causality techniques.
 - Collaborating with the research team to analyze and interpret results.
 - Documenting research findings and presenting them.
- Requested knowledge:** We are seeking a candidate who possesses a background in **Scientific Computing, Machine Learning, C++, Python...** The ideal candidate should have a solid understanding of numerical method principles, methodologies, and informatics.
- Profile:** BAC+5 – master
- Locality:** CEA Paris-Saclay
- PhD after internship:** No
- To apply:** Send your CV, grades, and motivation letter to
- Mohd Afeef BADRI : mohd-afeef.badri@cea.fr
 - Aurore LOMET : aurore.lomet@cea.fr
- References:**
- [1] T. Ali, M. N. Eldin, & W. Haider, (2023). The Effect of Soil-Structure Interaction on the Seismic Response of Structures Using Machine Learning, Finite Element Modeling and ASCE 7-16 Methods. Sensors, 23(4), 2047.
 - [2] G. Grospellier, B. Lelandais (2009). The Arcane development framework. POOSC'09.
 - [3] J. Pearl. Causality (2009). Cambridge university press.
 - [4] A.Arsac, A.Lomet, JP. Poli (2023). Causal discovery for time series with constraint-based model and PMIME measure. ArXiv preprint arXiv:2305.19695

Internship Opportunity: Enhancing Parallel Finite Element Method Solver with Distributed Mesh Adaptation

Subject: Mesh Adaption, HPC, FEM

Context: Mesh adaption can be treated as a fundamental component of numerical simulations, it empowers computational models to dynamically adjust their mesh, optimizing solution accuracy and efficiency [1]. Overall, a numerical simulation with a successful mesh adaption strategy ensures optimal representation of solution features which is a crucial aspect any reliable numerical simulation. At CEA Paris-Saclay, our parallel HPC based FEM solver – PSD¹, has harnessed the power of domain-decomposition for massive parallelization on HPC systems, demonstrating remarkable efficiency and scaling in solving complex engineering problems, it however lacks the above mentioned mesh adaption kernel. Acknowledging the potential for further enhancement, we propose this internship with a primary focus on implementing distributed mesh adaption using Parmmg [3].

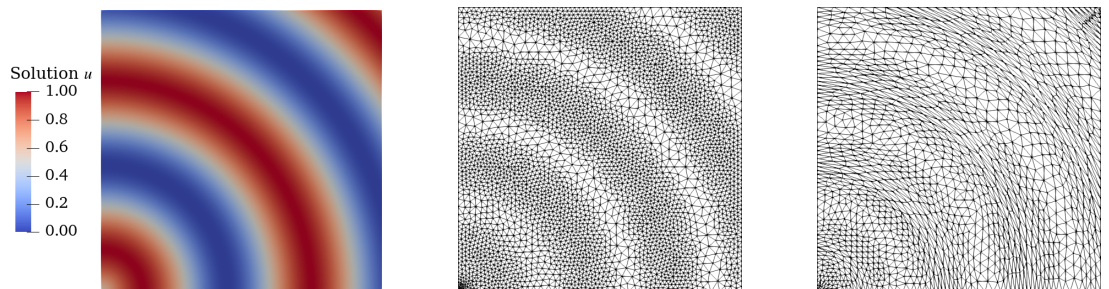


Figure 1: FEM solution (left) and two different options of mesh-adaption techniques for adapting the mesh – isotropic mesh adaption (center) and anisotropic mesh adaption (right).

The main difficulty in parallel mesh adaptation arise from the need to reassemble the mesh before adaptation, a particularly intricate task for domain-decomposition-based solvers where the mesh is distributed. To overcome this hurdle, we aim to strategically employs MPI-based techniques for distributed mesh adaptation and integrate this process directly with the partitioned mesh used in the HPC FEM solver. The challenge lies in efficiently adapting the distributed mesh without the need for centralized reassembly. Parmmg or other parallel mesh-adaption libraries, will serve as the foundation of our approach. By leveraging MPI, we aim to synchronize and adapt the mesh in a distributed manner, preserving the parallel efficiency inherent in the FEM solver. This innovative methodology not only streamlines the mesh adaptation process but also promises to significantly enhance the solver’s robustness and problem-solving capabilities.

Motivated master’s students with a background in parallel computing –HPC– and numerical methods are invited to contribute to this internship experience. Successful candidate will play a pivotal role in advancing the computational engineering frontiers at CEA Paris-Saclay, gaining valuable insights into high-performance computing and numerical simulation.

¹ PSD, acronym for Parallel Solid/Structural/Seismic Dynamics is an inhouse CEA code for seismic and fracture studies, see [2].

- Objectives:** During the internship, the selected candidate will have the opportunity to collaborate with experts from the LESIM laboratory. The main responsibilities will include:
- Conducting research on parallel mesh adaptation and its integration in parallel FEM solvers.
 - Developing/implementing/benchmarking algorithms to be integrated within CEA's FEM solvers.
 - Collaborating with the research team to analyze and interpret results.
 - Documenting research findings and presenting them.
- Requested knowledge:** We are seeking a candidate who possesses a background in **Scientific Computing, Finite Element Method, C++, FreeFEM...** The ideal candidate should have a solid understanding of numerical method principles, methodologies, and informatics.
- Profile:** BAC+5 – master
- Locality:** CEA Paris-Saclay
- PhD after internship:** No
- To apply:** Send your CV, grades, and motivation letter to
- Mohd Afeef BADRI : mohd-afeef.badri@cea.fr
 - Christophe BOURCIER : christophe.bourcier@cea.fr
- References:**
- [1] W. Bangerth, and R. Rannacher. "Adaptive finite element methods for differential equations." Springer Science & Business Media, (2003).
- [2] M. A. Badri, G. Rastiello, and E. Foerster. "Preconditioning strategies for vectorial finite element linear systems arising from phase-field models for fracture mechanics." Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 373 (2021): 113472.
- [3] L. Cirrottola, and F. Algiane. "Parallel unstructured mesh adaptation using iterative remeshing and repartitioning.", [Research Report] RR-9307, INRIA Bordeaux, équipe CARDAMOM. (2019).



Service de Génie Logiciel pour la Simulation
CEA Saclay

Propositions de stage 2024 avec possibilité de poursuite en doctorat

2024 Internship proposals with possible continuation into a Ph.D





Approximation of PDEs solutions by means of Machine Learning Models

Master Thesis Internship Training Proposal

Location : CEA DES/ISAS/DM2S/SGLS, CEA Saclay 91191 Gif-sur-Yvette CEDEX

Advisors :

- Geoffrey DANIEL (geoffrey.daniel@cea.fr)
- Samuel KOKH (samuel.kokh@cea.fr)

This internship study may be continued into a Ph.D.

A large number of applications in the CEA requires the modelling of physical phenomena, which leads to the construction of Partial Differential Equations (PDEs) that must be solved. Classical methods exist to numerically approximate solutions of these equations, such as finite elements or finite volumes, with some known limitations (dependence to a mesh, high computation resources). Over the past decade, Machine Learning (ML) methods have brought new tools to solve problems in several fields, with interesting performances in many applications. A specific branch is emerging to propose models to solve PDEs, like [4, 2, 3]. Some of them are based on Neural Networks that embed physical constraints, leading to the concept of Physics Informed Neural Networks (PINNs).

In this Master Thesis training subject we propose to test some of these ML methods for approximating PDEs solutions. The student will be asked to conduct a non-exhaustive state of the art of recent methods for approximating the solution of PDEs thanks to Machine Learning.

For application, we propose to consider several classical types of PDEs like:

- the (non-homogeneous) Poisson equation

$$\partial_x^2 u + \partial_y^2 u = f(u, x, y), \quad (1)$$

- the Burgers equation (with a source term)

$$\partial_t u + \partial_x \left(\frac{u^2}{2} \right) = S(u), \quad (2)$$

- the linear first order wave equation system with a source term

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x \pi = f(u), & (3a) \\ \partial_t \pi + a^2 \partial_x u = 0, & (3b) \end{cases}$$

The first objective is to build approximations of the solution of these equations thanks to different machine learning methods among those provided [4, 2, 3]. One of the goal of the present study is to investigate the performance of these methods in terms of computing cost, their stability and their accuracy. For example, we would like to assess the ability of the method to capture stationary solutions of the equation that balance fluxes terms and (possibly stiff) source terms. We would investigate the relevance of using specific activation functions in terms of approximation of the solution and convergence of the gradient descent, such as the SIREN architecture [5].

According to the progression of the project, other problems in higher dimensions can be considered, such as the plane channel problem in fluids mechanics, associated to the Navier-Stokes equations.

The candidate methods under study will be implemented in Python using TensorFlow [1] and standard tools like Jupyter and git.

References

- [1] Tensorflow. <https://www.tensorflow.org/>.
- [2] S. Dong and J. Yang. On computing the hyperparameter of extreme learning machines: Algorithm and application to computational PDEs, and comparison with classical and high-order finite elements. *Journal of Computational Physics*, 463:111290, August 2022.
- [3] Ravi G. Patel, Indu Manickam, Nathaniel A. Trask, Mitchell A. Wood, Myoungkyu Lee, Ignacio Tomas, and Eric C. Cyr. Thermodynamically consistent physics-informed neural networks for hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 449:110754, January 2022.
- [4] M. Raissi, P. Perdikaris, and G.E. Karniadakis. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378:686–707, February 2019.
- [5] Vincent Sitzmann, Julien N. P. Martel, Alexander W. Bergman, David B. Lindell, and Gordon Wetzstein. Implicit neural representations with periodic activation functions, 2020.



Internship & PhD proposal: Uncertainty quantification for the closure modeling of the turbulent Reynolds stress tensor

Clément Gauchy* Pierre-Emmanuel Angeli* Sébastien Da Veiga[†]

Scientific context

This position is a part of the ANR project Exa-MA (Methods and Algorithms for Exascale) dealing with high-performance computing methods and its adaptation to the forthcoming so-called exascale hardware. This combined internship and PhD proposal concerns UQ (Uncertainty Quantification) developments on turbulence closure modeling for CFD (Computational Fluid Dynamics). The *Commissariat à l'énergie atomique* (CEA) will bring expertise on applied statistics and turbulence closure modeling whereas *l'École Nationale de la Statistique et de l'Analyse de l'Information* (ENSAI) will bring sound mathematical tools for uncertainty quantification.

The intern-then-PhD student will be mainly based in CEA Saclay research center, in the outskirts of Paris, with several meetings in the ENSAI Campus near Rennes. It will be supervised by Clément Gauchy and Pierre-Emmanuel Angeli in CEA, and Sébastien Da Veiga in ENSAI who will be the PhD director.

Description and objectives

Turbulence closure modeling and the peculiar role of the Reynolds stress tensor

Turbulence effects arise in many engineering applications with high level of performance and safety standards. Accurate predictions of turbulent flows are of vital importance especially for the nuclear industry. The dynamic of fluid flows is governed by the famous Navier-Stokes (NS) equations. In the context of incompressible incompressible Newtonian flows of constant property, the NS equations writes:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \quad (2)$$

*CEA Saclay, {clement.gauchy, pierre-emmanuel.angeli}@cea.fr

[†]ENSAI, sebastien.da-veiga@ensai.fr

where u_i , p , x_i , t are respectively the flow velocity, the pressure field, the spatial coordinate and the time. The Reynolds number Re measures the relative importance of inertia to viscous forces. The higher the Reynolds number, the more chaotic are the solutions of the NS equations. The flow velocity field then exhibits strong fluctuations that are characteristic of the turbulent regime and driven by the nonlinear convection terms $\partial u_i u_j / \partial x_j$.

Direct Numerical Simulations (DNS) requires a very fine meshing to provide an admissible numerical of the solution of the NS equations, implying a intractable computational time with respect to industrial constraints. The Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) equations provides faster numerical computations while conserving a good representation of the turbulent flows. It is based on the decomposition of the flow velocity field as by a mean component and a fluctuating component:

$$u_i = \langle u_i \rangle + u'_i$$

with the following assumption that $\partial \langle u_i \rangle / \partial t = 0$. Applying the mean operator and by incorporating this decomposition into the NS equations allows us to write the following equations:

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

$$\langle u_i \rangle \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_j} = -\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \langle u_i \rangle}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_j} \quad (4)$$

This formulation is called the RANS formulation of the NS equations. The equations become stationary but with a new source term, the **Reynolds stress tensor** (RST) $\tau_{ij} = -\langle u'_i u'_j \rangle$. Turbulence closure modeling is dedicated to finding a model for the RST that can be based on both physical arguments and experimental measurements. The determination of the RST *via* turbulence closure modeling is critical for solving the RANS equations. Moreover, due to the importance of the simulation of turbulence effects for industrial applications, research on uncertainty quantification methodologies on the RST have been heavily developed in the recent years [8, 7].

Objectives

The main objective of the PhD is to develop an uncertainty quantification framework for the RST modeling. Here are some potential and non-exhaustive research axes:

- Gaussian process regression is oftenly used in uncertainty quantification due to its ability to provide both a prediction and an uncertainty on its prediction. Also known as kriging, it is also used in spatial statistics. Gaussian process regression extensions for tensor prediction has already been studied for the determination of stress tensors of hyperelastic materials [1, 4]. However, Reynold stress tensors form a spatial tensor field and the spatial correlation has to be taken into account while being computationally tractable. Specific algorithms for training and sampling the Gaussian process posterior distribution will be derived using advanced tools coming from the spatial statistics literature (e.g. Vecchia approximation [6], Fast Fourier transform,...).
- Uncertainty quantification will be performed on the Reynold stress tensor spatial field. The main challenge will consists in developing a sound mathematical framework to statistically describe the RST field. While central and dispersion statistics such as mean and variance are straightforward for a tensor spatial field, risk statistics such as quantile or superquantile are not easily defined for random variable of dimension more

than one. A new notion of multivariate quantile based on Optimal Transport (OT) has been recently introduced [5] along with recent developments of efficient estimation algorithms [3, 2].

Wished profile, salary, duration

The ideal candidate should have confirmed skills in probability theory and statistics, as well as some background knowledge in fluid dynamics and/or applied physics.

The internship before the start of PhD will be about **6 months duration**, starting any time after **March 2024**, with a **monthly salary between 700€ and 1300€ depending on the candidate's profile**, as well as a **housing assistance of about 200€**.

The PhD will start by any time between **September and December 2024**. It is a **three years contract with a gross annual salary around 28.5k€ (independent of the candidate's profile)**.

For both the internship and the PhD, **there is an financial assistance of 75% of the public transport subscription fees**.

CEA offers to their employees a free bus shuttle service from a variety of places in Île-de-France region to reach the CEA Saclay research center more easily. Ask us to have more details on the different shuttle lines and timeschedules!

If you feel interested by the proposal, please get in touch by e-mail with C. Gauchy, P-E. Angeli and S. Da Veiga.

References

- [1] B. S. Aggarwal, A. and Jensen, S. Pant, and C.-H. Lee. Strain energy density as a Gaussian process and its utilization in stochastic finite element analysis: application to planar soft tissues. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 404, 2023. ISSN 00457825. doi: 10.1016/j.cma.2022.115812.
- [2] B. Bercu, J. Bigot, and G. Thurin. Monge-Kantorovich superquantiles and expected shortfalls with applications to multivariate risk measurements. 2023. arXiv:2307.01584 [math, stat].
- [3] B. Bercu, J. Bigot, and G. Thurin. Stochastic optimal transport in Banach Spaces for regularized estimation of multivariate quantiles. 2023. arXiv:2302.00982 [math, stat].
- [4] A. Frankel, Reese E., and P. Laura. Tensor basis gaussian process models of hyperelastic materials. *Journal of Machine Learning for Modeling and Computing*, 1(1):1–17, 2020. ISSN 2689-3967.
- [5] M. Hallin, E. del Barrio, J. Cuesta-Albertos, and C. Matrán. Distribution and quantile functions, ranks and signs in dimension d : A measure transportation approach. *The Annals of Statistics*, 49(2):1139–1165, 2021. ISSN 0090-5364, 2168-8966. doi: 10.1214/20-AOS1996.

- [6] K. Matthias and G. Joseph. A General Framework for Vecchia Approximations of Gaussian Processes. *Statistical Science*, 36(1):124 – 141, 2021. doi: 10.1214/19-STS755.
- [7] J.-X. Wang, J.-L. Wu, and H. Xiao. Incorporating Prior Knowledge for Quantifying and Reducing Model-Form Uncertainty in RANS Simulations. *International Journal for Uncertainty Quantification*, 6(2):109–126, 2016. ISSN 2152-5080.
- [8] H. Xiao and P. Cinnella. Quantification of model uncertainty in RANS simulations: A review. *Progress in Aerospace Sciences*, 108:1–31, 2019. ISSN 0376-0421. doi: 10.1016/j.paerosci.2018.10.001.

Sujet de stage : Amélioration par Machine Learning de la quantification d'incertitudes pour la simulation thermohydraulique de transitoires accidentels à seuil

Durée : 5/6 mois

Démarrage : Mars/Avril 2024

Lieu : CEA-Saclay, site de Saclay

Laboratoire d'accueil : LIAD (Laboratoire d'Intelligence Artificielle et de science des Données)

Futurs encadrants ou contacts :

Guillaume Damblin (DM2S/SGLS), Raksmy Nop (DM2S/STMF), Amandine Marrel (DER/SESI)

Diplôme préparé : Bac+5 – Master 2 / Diplôme École d'ingénieurs

Possibilité de poursuite en thèse : oui

Mots-clés : simulation numérique, accident de réactivité, quantification d'incertitudes, Machine Learning, transitoires à seuil.

Contexte et enjeux

Les réacteurs expérimentaux de type piscine sont utilisés pour des tests de matériaux sous irradiation ou encore pour la production de radio-isotopes pour l'industrie et la médecine. En cas d'insertion accidentelle de réactivité (RIA) dans le cœur d'un tel réacteur, la puissance générée peut augmenter de manière exponentielle, avec un temps caractéristique de l'ordre de la dizaine de millisecondes. Le réacteur va alors passer séquentiellement par différents régimes de transferts thermiques : transfert thermique monophasique, déclenchement de l'ébullition puis ébullition nucléée. Si l'excursion de puissance n'est pas suffisamment atténuée par les contre-réactions neutroniques, la crise d'ébullition peut survenir, menant à la transition vers le régime d'ébullition en film. Caractérisé par une forte dégradation des transferts thermiques et d'une partie des contre-réactions neutroniques, ce régime est à même d'engendrer une fonte du combustible et par la suite une réaction chimique explosive.

La simulation numérique de ce scénario accidentel est réalisée au CEA avec le code de calcul de référence, nommé CATHARE (Code Avancé de ThermoHydraulique pour les Accidents de Réacteurs à Eau). Les modèles physiques disponibles au sein du code CATHARE ont été développés pour convenir à la nature transitoire rapide de l'accident RIA dans des conditions thermodynamiques spécifiques des réacteurs piscine. Ensuite, dans le cadre d'un usage de la simulation pour les études de sûreté nucléaire, les incertitudes et la sensibilité de la simulation à chacune des variables physiques du scénario accidentel doivent être quantifiées. Le travail de stage portera sur cette seconde étape.

Objectifs

Dans le domaine de l'énergie nucléaire et plus particulièrement celui de la sûreté, le paradigme consistant à associer une simulation la plus fidèle possible de l'accident avec la maîtrise des incertitudes associées aux grandeurs d'intérêt calculées est appelé BEPU (Best Estimate Plus Uncertainty). Ce stage permettra de s'en approprier les principes, puis de proposer des adaptations rendues nécessaires par les spécificités de l'accident RIA. Pour ce faire, le/la stagiaire s'appuiera sur

des méthodes issues du champ des probabilités et de l'apprentissage statistique qu'il/elle devra appliquer aux résultats de simulation CATHARE.

Un objectif préliminaire confié au stagiaire consistera en la prise en main de la littérature scientifique liée, à la fois au scénario accidentel RIA sur des réacteurs de type piscine, et aux méthodes probabilistes de traitement des incertitudes appliquées dans la littérature sur ce type de scénario. En particulier, le/la stagiaire s'appuiera sur des travaux préliminaires effectués au CEA avec le code CATHARE dont l'objectif était l'identification des variables d'entrée prédominantes pour garantir l'intégrité du cœur du réacteur. Ces travaux ont permis de mieux comprendre la grande complexité de la simulation transitoire, caractérisée par des phénomènes physiques de « bifurcation ». Une bifurcation désigne le passage soudain de la simulation d'un régime de transfert thermique à un autre (ex : ébullition nucléée vers ébullition en film) en fonction des conditions expérimentales neutroniques et thermohydraulique du scénario (ex : réactivité, débit) et des incertitudes de modélisation physique (ex : échanges thermique, critères de changement de régime, etc.), sans que l'on puisse déterminer *a priori* les combinaisons de variables qui en sont à l'origine. Le stage se concentrera alors sur la réalisation des deux tâches suivantes :

1. L'identification, d'une part, des variables entraînant ces bifurcations via des méthodes d'analyse de sensibilité dédiées à des variables d'entrée probabilistes et, d'autre part, des configurations pénalisantes de ces variables pour la sûreté du réacteur (le terme « pénalisant » se rapportant ici aux configurations critiques pour la tenue du cœur du réacteur).
2. L'estimation de la probabilité que l'intégrité du cœur du réacteur soit garantie, en fonction des conditions expérimentales. Pour cela, des méthodes d'apprentissage automatique de classification et de régression (basées par exemple sur les processus aléatoires gaussiens) seront utilisées.

Références en lien avec le sujet :

- Marrel, A. & Chabridon, V.: Statistical developments for target and conditional sensitivity analysis: application on safety studies for nuclear reactor. *Reliability Engineering and System Safety*, 214, 2021.
- Nickisch, H. & Rasmussen, C.E.: Approximations for binary Gaussian process classification. *J. Mach. Learn. Res.* 9, 2035–2078, 2008.
- Bachoc, F., Helbert, C. & Picheny, V.: Gaussian process optimization with failures: classification and convergence proof. *J Glob Optim* 78, 483–506, 2020.
- Marrel, A., Iooss, B & Chabridon, V.: Statistical identification of penalizing configurations in high-dimensional thermal-hydraulic numerical experiments: the ICSCREAM methodology. *Nuclear Sciences and Engineering*, 196:301-321, 2022.

Environnement de travail

Le stage s'effectuera au sein du Laboratoire d'Intelligence Artificielle et de science des Données (LIAD) de la Direction des Energies (DES) du CEA à Saclay, en collaboration avec la DES du CEA de Cadarache (Laboratoire d'Etudes et de Modélisation des Systèmes).

Compétences requises ou souhaitées

Probabilités/statistiques, Machine Learning, Mécanique des fluides, Transferts thermiques, programmation sous Python, attrait pour les applications physiques. Une expérience avec l'environnement UNIX et une connaissance de l'ingénierie nucléaire seraient appréciées.

Profil recherché

Etudiant(e) de niveau bac+5 en école d'ingénieur généraliste ou Master 2 avec un goût prononcé pour les probabilités et statistiques, le Machine Learning et la modélisation des systèmes thermohydrauliques complexes en mécanique des fluides.

Contacts

Guillaume Damblin guillaume.damblin@cea.fr
Raksmey Nop raksmey.nop@cea.fr
Amandine Marrel amandine.marrel@cea.fr