

Inversion probabiliste pour la validation d'outil de calcul scientifique

Clément GAUCHY (CEA Saclay)

ETICS 2026, Amboise

30 Septembre 2026



1. Introduction

***Outil de calcul scientifique*(*)¹ en thermohydraulique** : La thermohydraulique concerne l'étude des écoulements diphasiques dans les réacteurs nucléaires et se décompose en différentes échelles :

- Échelle CFD ($\approx 1\mu m$)
- Échelle composant ➡ l'assemblage ($\approx 1\text{ cm}$)
- Échelle système ➡ l'enceinte, les GV, le coeur, etc... ($\approx 1\text{ m}$)

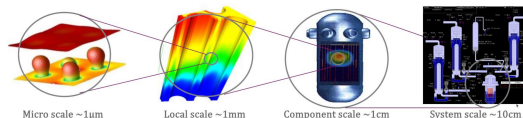


Figure – Les différentes échelles en thermohydraulique

1. Les termes en italique suivi de (*) sont définis dans le glossaire de **ASN (Version du 25/07/2017)**

Outil de calcul scientifique



👉 La remontée d'échelle implique l'usage de *modèles physiques* (semi)-empirique. Ceux-ci visent à représenter un comportement physique (coefficient d'échange thermique, frottement pariétal,...) sur un domaine de validité.

Outil de calcul scientifique

☞ La remontée d'échelle implique l'usage de *modèles physiques* (semi)-empirique. Ceux-ci visent à représenter un comportement physique (coefficient d'échange thermique, frottement pariétal,...) sur un domaine de validité.

Formalisation :

- Y l'outil de calcul scientifique (OCS)

Outil de calcul scientifique

☞ La remontée d'échelle implique l'usage de *modèles physiques* (semi)-empirique. Ceux-ci visent à représenter un comportement physique (coefficient d'échange thermique, frottement pariétal,...) sur un domaine de validité.

Formalisation :

- Y l'outil de calcul scientifique (OCS)
- $\mathbf{x} \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^q$ le vecteur de paramètres d'entrées ☞ conditions d'essais (exemple : Pression, vitesse massique,...)

☞ La remontée d'échelle implique l'usage de *modèles physiques* (semi)-empirique. Ceux-ci visent à représenter un comportement physique (coefficient d'échange thermique, frottement pariétal,...) sur un domaine de validité.

Formalisation :

- Y l'outil de calcul scientifique (OCS)
- $\mathbf{x} \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^q$ le vecteur de paramètres d'entrées ☞ conditions d'essais (exemple : Pression, vitesse massique,...)
- $M(\mathbf{x}; \lambda)$ le modèle physique d'intérêt, ayant pour paramètre $\lambda \in \mathcal{L} \subset \mathbb{R}^p$



☞ La remontée d'échelle implique l'usage de *modèles physiques* (semi)-empirique. Ceux-ci visent à représenter un comportement physique (coefficient d'échange thermique, frottement pariétal,...) sur un domaine de validité.

Formalisation :

- Y l'outil de calcul scientifique (OCS)
- $\mathbf{x} \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^q$ le vecteur de paramètres d'entrées ☞ conditions d'essais (exemple : Pression, vitesse massique,...)
- $M(\mathbf{x}; \lambda)$ le modèle physique d'intérêt, ayant pour paramètre $\lambda \in \mathcal{L} \subset \mathbb{R}^p$
- Les campagnes d'essais $(\mathbf{x}_i, z_i)_{1 \leq i \leq n}$ où z_i est la mesure expérimentale sur le i -ème essai

👉 La remontée d'échelle implique l'usage de *modèles physiques* (semi)-empirique. Ceux-ci visent à représenter un comportement physique (coefficient d'échange thermique, frottement pariétal,...) sur un domaine de validité.

Formalisation :

- Y l'outil de calcul scientifique (OCS)
- $\mathbf{x} \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^q$ le vecteur de paramètres d'entrées 👉 conditions d'essais (exemple : Pression, vitesse massique,...)
- $M(\mathbf{x}; \lambda)$ le modèle physique d'intérêt, ayant pour paramètre $\lambda \in \mathcal{L} \subset \mathbb{R}^p$
- Les campagnes d'essais $(\mathbf{x}_i, z_i)_{1 \leq i \leq n}$ où z_i est la mesure expérimentale sur le i -ème essai

👉 Le lien entre les essais et l'OCS s'écrit alors :

$$\begin{cases} z_i = Y(M(\mathbf{x}_i; \lambda)) + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \end{cases} \quad (1)$$

Considérer l'erreur de modèle

Le modèle physique M et l'OCS Y sont une représentation imparfaite du phénomène physique étudié. Il est donc naturel d'introduire une *erreur de modèle* (Kennedy and O'Hagan, 2001) :

$$\begin{cases} z_i = Y(M(\mathbf{x}_i; \lambda)) + \delta(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i, \\ \delta(\cdot) \sim \mathcal{GP}(\mu_\delta(\cdot), k_\delta(\cdot, \cdot)), \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \end{cases} \quad (2)$$

Considérer l'erreur de modèle

$$\begin{cases} z_i = Y(M(\mathbf{x}_i; \lambda)) + \delta(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i, \\ \delta(\cdot) \sim \mathcal{GP}(\mu_\delta(\cdot), k_\delta(\cdot, \cdot)), \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \end{cases}$$

■ Avantages :

- ✓ Évite l'estimation biaisée de λ (Bayarri et al., 2007)
- ✓ Évite la surestimation de l'erreur entre l'OCS et l'expérience

Considérer l'erreur de modèle

$$\begin{cases} z_i = Y(M(\mathbf{x}_i; \lambda)) + \delta(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i, \\ \delta(\cdot) \sim \mathcal{GP}(\mu_\delta(\cdot), k_\delta(\cdot, \cdot)), \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \end{cases}$$

■ Avantages :

- ✓ Évite l'estimation biaisée de λ (Bayarri et al., 2007)
- ✓ Évite la surestimation de l'erreur entre l'OCS et l'expérience

■ Inconvénients

- ✗ Aucune garantie de respect des contraintes physiques en prédiction (Sargsyan et al., 2019)
- ✗ Perte d'identifiabilité entre $\delta(\mathbf{x}_i)$ et ε_i
- ✗ Impossible de transférer la prédiction à d'autres sorties de Y

Problèmes inverse stochastique

L'erreur de modèle peut également être portée par le paramètre λ , en le considérant entaché d'une incertitude aléatoire :

$$\begin{cases} z_i = Y(M(\mathbf{x}_i; \Lambda_i)) + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \\ \Lambda_i \sim \mathcal{N}(m, \Gamma) \end{cases}$$

La valeur déterministe λ est remplacé par n gaussiennes i.i.d. Λ_i de moyenne $m \in \mathbb{R}^p$ et de matrice de covariance $\Gamma \in \mathcal{S}_{++}^p$.

Problèmes inverse stochastique

L'erreur de modèle peut également être portée par le paramètre λ , en le considérant entaché d'une incertitude aléatoire :

$$\begin{cases} z_i = Y(M(\mathbf{x}_i; \Lambda_i)) + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \\ \Lambda_i \sim \mathcal{N}(m, \Gamma) \end{cases}$$

La valeur déterministe λ est remplacé par n gaussiennes i.i.d. Λ_i de moyenne $m \in \mathbb{R}^p$ et de matrice de covariance $\Gamma \in \mathcal{S}_{++}^p$.

➡ Le paramètre λ peut être entaché d'une incertitude **aléatoire** liée à la physique étudiée ($\neq$ **paradigme Bayésien!**)

Exemples concrets d'inversion probabiliste :

- 👉 **Hydraulique** : Le coefficient de Maning-Strickler représente le frottement d'un écoulement d'eau en surface libre. Celui d'un fleuve peut évoluer entre différentes mesures (tempête, évolution de la végétation,...)

Exemples concrets d'inversion probabiliste :

- 👉 **Hydraulique** : Le coefficient de Maning-Strickler représente le frottement d'un écoulement d'eau en surface libre. Celui d'un fleuve peut évoluer entre différentes mesures (tempête, évolution de la végétation,...)
- 👉 **Mécanique** : Les caractéristiques thermomécanique d'un matériau peuvent varier au sein d'épreuves d'un même lot.

Exemples concrets d'inversion probabiliste :

- 👉 **Hydraulique** : Le coefficient de Maning-Strickler représente le frottement d'un écoulement d'eau en surface libre. Celui d'un fleuve peut évoluer entre différentes mesures (tempête, évolution de la végétation,...)
 - 👉 **Mécanique** : Les caractéristiques thermomécanique d'un matériau peuvent varier au sein d'épreuves d'un même lot.
 - 👉 **Thermohydraulique** : L'aspect aléatoire de la turbulence provoque une incertitude sur les corrélations déduites de la remontée d'échelle
- ➡ La méthodologie CIRCE (*Calibration des Incertitudes Relatives aux Corrélations Élémentaires*) est une méthode d'inversion probabiliste développé au CEA/DES depuis les années 90 pour la calibration d'OCS en thermohydraulique échelle systèmes (exemple : CATHARE). (Cocci et al., 2022)

On considère p modèles physiques dit *de référence* $\mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x}) = (M_j^{\text{ref}}(\mathbf{x}))_{1 \leq j \leq p}$. L'effet aléatoire sera introduit par la variable Λ_i qui est choisi Gaussienne ou log-Gaussienne :

$$\begin{cases} z_i = Y\left(\Lambda_i \odot \mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x})\right) + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \\ \Lambda_i \sim \mathcal{N}(m, \Gamma) \end{cases} \quad (3)$$

■ Avantages :

- ✓ Incertitude de modèle Λ *intégrée* dans Y .
- ✓ Interprétation physique simple (agnostique à la paramétrisation de $\mathbf{M}^{\text{ref}}$)

Méthodologie CIRCÉ

On considère p modèles physiques dit *de référence* $\mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x}) = (M_j^{\text{ref}}(\mathbf{x}))_{1 \leq j \leq p}$. L'effet aléatoire sera introduit par la variable Λ_i qui est choisi Gaussienne ou log-Gaussienne :

$$\begin{cases} z_i = Y(\Lambda_i \odot \mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x})) + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \\ \Lambda_i \sim \mathcal{N}(m, \Gamma) \end{cases} \quad (3)$$

■ Avantages :

- ✓ Incertitude de modèle Λ *intégrée* dans Y .
- ✓ Interprétation physique simple (agnostique à la paramétrisation de $\mathbf{M}^{\text{ref}}$)

■ Inconvénients

- ✗ Impossible de rattraper un biais systématique de l'OCS Y ➡ **CIRCÉ est conçue pour quantifier l'incertitude de $\mathbf{M}^{\text{ref}}$!**
- ✗ Suppose de connaître $\mathbf{M}^{\text{ref}}$



$$\begin{cases} z_i = Y \left(\lambda_0 \odot \mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x}_i) \right) + h(\mathbf{x}_i)^T (\Lambda_i - \lambda_0) + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \\ \Lambda_i \sim \mathcal{N}(m, \Gamma) \\ \theta = (m, \Gamma) \in \mathbb{R}^p \times \mathcal{S}_{++}^p \end{cases} \quad (4)$$

Les algorithmes EM et ECME ont été proposés par [Celeux et al. \(2010\)](#) pour l'estimation de θ .

L'étape de linéarisation au voisinage de λ_0 va permettre d'utiliser des algorithmes d'estimation de θ inspirés de ceux des *modèles linéaires à effets mixtes* ([Lavielle, 2014](#)) :

- 👉 L'estimateur du maximum de vraisemblance profilée
- 👉 L'estimateur du maximum de vraisemblance restreinte (REML)

Modèle à effet mixte linéaire

Un *modèle linéaire à effets mixtes* s'écrit classiquement de la forme suivante (Verbyla, 1990) :

$$\begin{cases} \mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}, \\ \mathbf{u} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{G}), \\ \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma) \end{cases} \quad (5)$$

où $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^k$, $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p$.

➡ On peut remarquer que le modèle CIRCÉ linéarisé (cf équation (4)) peut se réécrire sous cette forme, avec $[\mathbf{y}]_i = z_i - Y(\lambda_0 \odot \mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x}_i))$, $\boldsymbol{\beta} = m - \lambda_0$, $\mathbf{X} = \mathbf{Z} = [h(\mathbf{x}_1), \dots, h(\mathbf{x}_n)]^T$, $\mathbf{u} = [\Lambda_1, \dots, \Lambda_n]^T$, $\mathbf{G} = \Gamma \otimes I_n$, $\Sigma = \text{diag}((\sigma_{\varepsilon_i}^2)_{1 \leq i \leq n})$



2. Principaux algorithmes d'estimation

Estimateur du max de vraisemblance profilée

On peut écrire aisément la log-vraisemblance du vecteur $\mathbf{y}$ de l'Équation (5) étant donné que $\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \mathbf{V}(\mathbf{G}))$ avec $\mathbf{V}(\mathbf{G}) = \mathbf{ZGZ}^T + \Sigma$:

$$\ell(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log(|\mathbf{V}(\mathbf{G})|) - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) . \quad (6)$$

Si $\mathbf{G}$ est connu, l'EMV pour $\boldsymbol{\beta}$ est l'estimateur des moindres carrés généralisés :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{G}) = (\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{y} . \quad (7)$$

Estimateur du max de vraisemblance profilée

On peut écrire aisément la log-vraisemblance du vecteur $\mathbf{y}$ de l'Équation (5) étant donné que $\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{X}\beta, \mathbf{V}(\mathbf{G}))$ avec $\mathbf{V}(\mathbf{G}) = \mathbf{ZGZ}^T + \Sigma$:

$$\ell(\beta, \mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log(|\mathbf{V}(\mathbf{G})|) - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) . \quad (6)$$

Si $\mathbf{G}$ est connu, l'EMV pour β est l'estimateur des moindres carrés généralisés :

$$\hat{\beta}(\mathbf{G}) = (\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{y} . \quad (7)$$

On peut ainsi définir la *vraisemblance profilée* $\ell_{\text{prof}}(\mathbf{G})$:

$$\begin{cases} \ell_{\text{prof}}(\mathbf{G}) := \ell(\hat{\beta}(\mathbf{G}), \mathbf{G}) , \\ \hat{\mathbf{G}}_{\text{prof}} = \arg \max_{\mathbf{G} \in \mathcal{S}_{++}^p} \ell_{\text{prof}}(\mathbf{G}) . \end{cases} \quad (8)$$

Estimateur du max de vraisemblance restreinte

Motivation : Sous estimation de $\text{diag}(\mathbf{V})$ d'un facteur $\frac{n-p}{n}$, du à l'estimation conjointe de β et de $\mathbf{V}$. C'est la généralisation du biais de l'EMV de la variance en $\frac{n-1}{n}\sigma^2$ pour un échantillon i.i.d. $y_i \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$.

Principe : Si on a $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{(n-p) \times n}$ tel que :

$$\mathbf{K}\mathbf{y} = \mathbf{0}_{n-p} . \quad (9)$$

On peut obtenir :

$$\mathbf{K}\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_{n-p}, \mathbf{K}\mathbf{V}(\mathbf{G})\mathbf{K}^T) \quad (10)$$

➡ Existence et calcul de $\mathbf{K}$?



Theorem

Soit $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ avec $p < n$ de rang plein et $\mathbf{P} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$, alors il existe $\mathbf{O} = [\mathbf{O}_1, \mathbf{O}_2]$ matrice orthogonale tel que

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \mathbf{O}_1 \mathbf{O}_1^T \\ \mathbf{I} - \mathbf{P} &= \mathbf{O}_2 \mathbf{O}_2^T\end{aligned}\tag{11}$$

On en déduit de ce résultat l'existence de $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{(n-p) \times n}$ tel que $\mathbf{K}\mathbf{y} = \mathbf{0}_{n-p}$.

Démonstration.

La matrice $\mathbf{P}$ est une matrice de projection, on a donc l'existence de $\mathbf{O}$ ce qui permet d'obtenir l'Equation (11). Soit $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{(n-p) \times (n-p)}$ inversible. On peut voir que $[\mathbf{X}, \mathbf{O}_2 \mathbf{B}]$ est inversible, en choisissant $\mathbf{L}^T = [\mathbf{X}, \mathbf{O}_2 \mathbf{B}]^{-1}$ tel que

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= [\mathbf{L}_1, \mathbf{K}], \\ \mathbf{K}\mathbf{X} &= \mathbf{0}_{(n-p) \times p}, \\ \mathbf{L}_1\mathbf{X} &= \mathbf{I}_p\end{aligned}\tag{12}$$



Existence de $\mathbf{K}$

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^T &= [\mathbf{X}, \mathbf{O}_2 \mathbf{B}]^{-1} \\ \mathbf{L} &= [\mathbf{L}_1, \mathbf{K}], \\ \mathbf{KX} &= \mathbf{0}_{(n-p) \times p}, \\ \mathbf{L}_1 \mathbf{X} &= \mathbf{I}_p\end{aligned}\tag{13}$$

👉 Le théorème nous donne le résultat suivant

$$\mathbf{Ly} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_1 \mathbf{y} \\ \mathbf{Ky} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left\{ \begin{bmatrix} \beta \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathbf{L}_1 \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{L}_1^T & \mathbf{L}_1 \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T \\ \mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{L}_1^T & \mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T \end{bmatrix} \right\}\tag{14}$$

👉 On a bien existence de $\mathbf{K}$, mais pas son unicité.

$$\ell_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log(|\mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T|) - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{K}^T (\mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{Ky}.$$

Existence de $\mathbf{K}$

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^T &= [\mathbf{X}, \mathbf{O}_2 \mathbf{B}]^{-1} \\ \mathbf{L} &= [\mathbf{L}_1, \mathbf{K}], \\ \mathbf{KX} &= \mathbf{0}_{(n-p) \times p}, \\ \mathbf{L}_1 \mathbf{X} &= \mathbf{I}_p\end{aligned}\tag{13}$$

👉 Le théorème nous donne le résultat suivant

$$\mathbf{Ly} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_1 \mathbf{y} \\ \mathbf{Ky} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left\{ \begin{bmatrix} \beta \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathbf{L}_1 \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{L}_1^T & \mathbf{L}_1 \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T \\ \mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{L}_1^T & \mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T \end{bmatrix} \right\}\tag{14}$$

👉 On a bien existence de $\mathbf{K}$, mais pas son unicité.

$$\ell_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log(|\mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T|) - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{K}^T (\mathbf{KV}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{Ky}.$$

Comment obtenir une expression de $\ell_{\mathbf{K}}$ indépendante de $\mathbf{K}$?

Vraisemblance restreinte

Le lemme suivant de Verbyla (1990) va nous permettre de calculer la vraisemblance $\ell_{\mathbf{K}}$ de façon indépendante de $\mathbf{K}$:

Lemma

Pour tout $\mathbf{K}$ vérifiant $\mathbf{K}\mathbf{X} = \mathbf{0}_{(n-p) \times p}$ et Ω symétrique définie positive, alors

$$\Omega - \Omega \mathbf{K}^T \left(\mathbf{K} \Omega \mathbf{K}^T \right)^{-1} \mathbf{K} \Omega = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \Omega^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \quad (15)$$

Vraisemblance restreinte

$$\Omega - \Omega \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \Omega \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} \Omega = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \Omega^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T ?$$

Démonstration.

On considère $\Omega^{-1/2}$, en effectuant la transformation $\mathbf{K}_* = \Omega^{-1/2} \mathbf{K}$ et $\mathbf{X}_* = \Omega^{-1/2} \mathbf{X}$. Les lignes de $\mathbf{K}_*$ forment une base de $\text{Im}(\mathbf{X}_*)^\perp$, ainsi :

$$\mathbf{K}_*^T (\mathbf{K}_* \mathbf{K}_*^T) \mathbf{K}_* = \mathbf{I} - \mathbf{X}_* (\mathbf{X}_*^T \mathbf{X}_*)^{-1} \mathbf{X}_*^T \quad (16)$$

En repassant à $\mathbf{K}$ et $\mathbf{X}$, on récupère bien l'Équation (15) □

Vraisemblance restreinte

$$\Omega - \Omega \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \Omega \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} \Omega = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \Omega^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T ?$$

Démonstration.

On considère $\Omega^{-1/2}$, en effectuant la transformation $\mathbf{K}_* = \Omega^{-1/2} \mathbf{K}$ et $\mathbf{X}_* = \Omega^{-1/2} \mathbf{X}$. Les lignes de $\mathbf{K}_*$ forment une base de $\text{Im}(\mathbf{X}_*)^\perp$, ainsi :

$$\mathbf{K}_*^T (\mathbf{K}_* \mathbf{K}_*^T) \mathbf{K}_* = \mathbf{I} - \mathbf{X}_* (\mathbf{X}_*^T \mathbf{X}_*)^{-1} \mathbf{X}_*^T \quad (16)$$

En repassant à $\mathbf{K}$ et $\mathbf{X}$, on récupère bien l'Équation (15) □

👉 Nous pouvons désormais réécrire ℓ_K indépendamment du choix de $\mathbf{K}$

Vraisemblance restreinte

(Rappel Équation (15): $\Omega - \Omega \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \Omega \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} \Omega = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \Omega^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$)
L'Équation (15) avec $\Omega = \mathbf{V}(\mathbf{G})$ permet d'obtenir :

$$\begin{cases} \mathbf{y}^T \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y} \\ \mathbf{Q} = \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} - \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} . \end{cases} \quad (17)$$

Vraisemblance restreinte

(Rappel Équation (15): $\Omega - \Omega \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \Omega \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} \Omega = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \Omega^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$)
L'Équation (15) avec $\Omega = \mathbf{V}(\mathbf{G})$ permet d'obtenir :

$$\begin{cases} \mathbf{y}^T \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y} \\ \mathbf{Q} = \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} - \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} . \end{cases} \quad (17)$$

En utilisant l'Équation (14) et le complément de Schur (i.e. le conditionnement Gaussien), j'obtiens :

$$\begin{aligned} \underbrace{|\mathbf{L} \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{L}^T|}_{\text{Ly}} &= \underbrace{|\mathbf{K} \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T|}_{\text{Ky}} \times \underbrace{|\mathbf{L}_1 \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{L}_1^T - \mathbf{L}_1 \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{L}_1^T|}_{(\text{L}_1 \mathbf{y} | \text{Ky})} \\ &= |\mathbf{K} \mathbf{V}(\mathbf{G}) \mathbf{K}^T| \times \underbrace{|(\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X})^{-1}|} \end{aligned} \quad (18)$$

$$\log |\mathbf{K}\mathbf{V}(\mathbf{G})\mathbf{K}^T| = \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| + \log |\mathbf{X}^T\mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1}\mathbf{X}| + \underbrace{\log |\mathbf{L}\mathbf{L}^T|}_{\text{indépendant de } \mathbf{G}} \quad (19)$$

L'expression finale de la vraisemblance restreinte $\ell_{\text{RL}}(\mathbf{G})$ est donc :

$$\begin{cases} \ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| - \frac{1}{2} \log |\mathbf{X}^T\mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1}\mathbf{X}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y} \\ \hat{\mathbf{G}}_{\text{REML}} = \arg \max_{\mathbf{G} \in \mathcal{S}_{++}^p} \ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) \end{cases} \quad (20)$$

Vraisemblance restreinte

$$\log |\mathbf{K}\mathbf{V}(\mathbf{G})\mathbf{K}^T| = \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| + \log |\mathbf{X}^T\mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1}\mathbf{X}| + \underbrace{\log |\mathbf{L}\mathbf{L}^T|}_{\text{indépendant de } \mathbf{G}} \quad (21)$$

L'expression finale de la vraisemblance restreinte $\ell_{\text{RL}}(\mathbf{G})$ est donc :

$$\begin{cases} \ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| - \frac{1}{2} \log | \underbrace{\mathbf{X}^T\mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1}\mathbf{X}}_{\text{Précision de } \hat{\beta}} | - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y} \\ \hat{\mathbf{G}}_{\text{REML}} = \arg \max_{\mathbf{G} \in \mathcal{S}_{++}^p} \ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) \end{cases} \quad (22)$$

Vraisemblance restreinte

$$\log |\mathbf{K}\mathbf{V}(\mathbf{G})\mathbf{K}^T| = \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| + \log |\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X}| + \underbrace{\log |\mathbf{L}\mathbf{L}^T|}_{\text{indépendant de } \mathbf{G}} \quad (23)$$

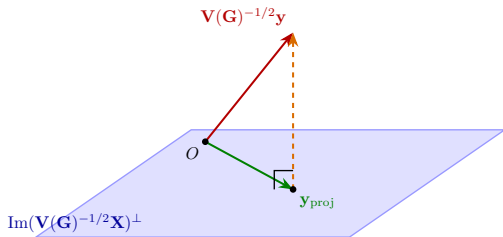
L'expression finale de la vraisemblance restreinte $\ell_{\text{RL}}(\mathbf{G})$ est donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} \ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| - \frac{1}{2} \log | \underbrace{\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X}}_{\text{Précision de } \hat{\beta} !} | - \underbrace{\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y}}_{\text{Moindres carrés sur } \text{Im}(\mathbf{X}_*)^\perp} \\ \hat{\mathbf{G}}_{\text{REML}} = \arg \max_{\mathbf{G} \in \mathcal{S}_{++}^p} \ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) \end{array} \right. \quad (24)$$

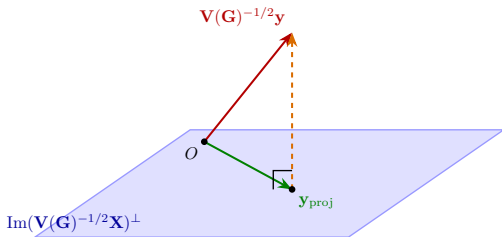
On calcule $\hat{\beta}_{\text{REML}}$ de façon *plug-in* après calcul de $\hat{\mathbf{G}}_{\text{REML}}$ par l'estimateur des moindres carrés généralisés.

Vraisemblance restreinte : interprétation

$$\ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| - \frac{1}{2} \log |\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y}$$



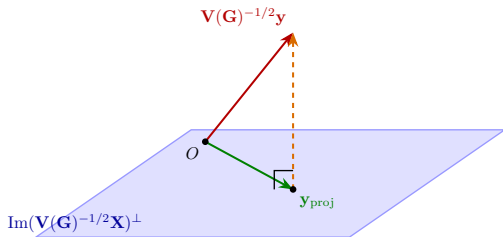
Vraisemblance restreinte : interprétation



$$\ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| - \frac{1}{2} \log |\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y}$$

$$\mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y} = \|\mathbf{y}_{\text{proj}}\|_{n-p}^2$$

Vraisemblance restreinte : interprétation



$$\ell_{\text{RL}}(\mathbf{G}) = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}(\mathbf{G})| - \frac{1}{2} \log |\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y}$$

👉 $\mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{y} = \|\mathbf{y}_{\text{proj}}\|_{n-p}^2$

👉 Interprétation algébrique :
 $(\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X}) \hat{\beta}(\mathbf{G}) = \mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{y}$

👉 Interprétation statistique :
 $\text{Cov}(\hat{\beta}(\mathbf{G})) = (\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X})^{-1}$ (si
 $|\mathbf{X}^T \mathbf{V}(\mathbf{G})^{-1} \mathbf{X}| \rightarrow 0$ alors $\text{Cov}(\hat{\beta}(\mathbf{G})) \rightarrow +\infty$)

Algorithmes EM & ECME

L'Équation (4) nous permet de déterminer la vraisemblance de $(z'_i = z_i - Y(\lambda_0 \odot \mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x}_i)))_{1 \leq i \leq n}$, sachant que $z'_i \sim \mathcal{N}(h_i^T m, h_i^T \Gamma h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2)$:

$$L(\theta; (z'_i)_{1 \leq i \leq n}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi(h_i^T \Gamma h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2)}} \times \exp\left(-\frac{(z_i - h_i^T m)^2}{2(h_i^T \Gamma h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2)}\right) \quad (25)$$

Algorithmes EM & ECME

L'Équation (4) nous permet de déterminer la vraisemblance de $(z'_i = z_i - Y(\lambda_0 \odot \mathbf{M}^{\text{ref}}(\mathbf{x}_i)))_{1 \leq i \leq n}$, sachant que $z'_i \sim \mathcal{N}(h_i^T m, h_i^T \Gamma h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2)$:

$$L(\theta; (z'_i)_{1 \leq i \leq n}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi(h_i^T \Gamma h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2)}} \times \exp\left(-\frac{(z_i - h_i^T m)^2}{2(h_i^T \Gamma h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2)}\right) \quad (25)$$

Une maximisation directe de L selon $\theta = (m, \Gamma)$ peut s'avérer laborieuse. On peut simplifier ce calcul en considérant les Λ_i comme des *variables latentes* ☞ C'est le principe des algorithmes type *Expectation-Maximization* (Dempster et al., 1977).

On définit l'observation *complète* par $u_i = [\Lambda_i, z'_i]^T$.

Principe de l'EM

l'EM est un algorithme itératif permettant de calculer $\theta^{(k+1)}$ en fonction de $\theta^{(k)}$. La $k + 1$ -ième itération est définie par :

- **Étape E (Espérance)** : Calcul de :

$$Q(\theta; \theta^{(k)}) = \mathbb{E} [\log L(\theta; (u_i)_{1 \leq i \leq n}) | (z'_i)_{1 \leq i \leq n}; \theta^{(k)}]$$

☞ L'espérance est prise selon la distribution $\prod_{i=1}^n p(\Lambda_i | z'_i)$ avec $\Lambda_i \sim \mathcal{N}(m^{(k)}, \Gamma^{(k)})$.

- **Étape M (Maximisation)** : La mise à jour de l'estimateur est définie par :

$$\theta^{(k+1)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} Q(\theta; \theta^{(k)}).$$

☞ La vraisemblance reste croissante pour tout k : $L(\theta^{(k+1)}; (z'_i)_{1 \leq i \leq n}) \geq L(\theta^{(k)}; (z'_i)_{1 \leq i \leq n})$

Algorithme EM pour CIRCE

☞ La log-vraisemblance des données complétées $u_i = [\Lambda_i, z'_i]^T$ s'écrit :

$$\log L((m, \Gamma); (y_i)_{1 \leq i \leq n}) = -n \log(|\Gamma|) - n \log(\sqrt{2\pi}) - \sum_{i=1}^n (\Lambda_i - m)^T \Gamma^{-1} (\Lambda_i - m) + C .$$

(26)

Algorithme EM pour CIRCE

☞ La log-vraisemblance des données complétées $u_i = [\Lambda_i, z'_i]^T$ s'écrit :

$$\log L((m, \Gamma); (y_i)_{1 \leq i \leq n}) = -n \log(|\Gamma|) - n \log(\sqrt{2\pi}) - \sum_{i=1}^n (\Lambda_i - m)^T \Gamma^{-1} (\Lambda_i - m) + C .$$

(26)

☞ Sachant que u_i est un vecteur Gaussien, on peut calculer la loi de $(\Lambda_i | z'_i)$ par conditionnement Gaussien.

Algorithme EM pour CIRCE linéaire

La mise à jour des paramètres de CIRCE linéaire par EM est (Celeux et al., 2010) :

$$\begin{cases} m^{(k+1)} = m^{(k)} + \bar{b}^{(k)} , \\ \Gamma^{(k+1)} = \Gamma^{(k)} + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(b_i^{(k)} b_i^{(k),T} - S_i^{(k)} \right) - \bar{b}^{(k)} \bar{b}^{(k),T} . \end{cases} \quad (27)$$

$$b_i^{(k)} = \frac{\Gamma^{(k)} h_i (z'_i - h_i^T m^{(k)})}{h_i^T \Gamma^{(k)} h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2} ,$$

$$\bar{b}^{(k)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n b_i^{(k)} ,$$

$$S_i^{(k)} = \frac{\Gamma^{(k)} h_i h_i^T \Gamma^{(k)}}{h_i^T \Gamma^{(k)} h_i + \sigma_{\varepsilon_i}^2} \in \mathbb{R}^{p \times p} .$$

Algorithme ECME

L'algorithme ECME (*Expectation/Conditional Maximization Either*) est proposé par Celeux et al. (2010) pour la méthode CIRCÉ. Seule l'étape M est remplacé par deux sous étapes :

- **Étape M1** : $\Gamma^{(k+1)}$ est obtenue par maximisation de Q gardant m fixé à $m^{(k)}$:

$$\Gamma^{(k+1)} = \arg \max_{\Gamma \in \mathcal{S}_{++}^p} Q((m^{(k)}, \Gamma); \theta^{(k)}) .$$

- **Étape M2** : $m^{(k+1)}$ est obtenu par maximisation de la vraisemblance en fixant Γ à $\Gamma^{(k+1)}$

$$m^{(k+1)} = \arg \max_{m \in \mathbb{R}^p} L((m, \Gamma^{(k+1)}); \mathcal{D}_n) .$$

Algorithme ECME pour CIRCE

La mise à jour des paramètres de CIRCE par l'algorithme ECME est :

$$\begin{cases} \Gamma^{(k+1)} = \Gamma^{(k)} + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(b_i^{(k)} b_i^{(k),T} - S_i^{(k)} \right) , \\ m^{(k+1)} = \sum_{i=1}^n \frac{\left(H_n^{(k+1)} \right)^{-1} h_i z_i}{h_i^T \Gamma^{(k+1)} h_i + \sigma_{\epsilon_i}^2} , \end{cases} \quad (28)$$

$$H_n^{(k+1)} = \sum_{i=1}^n \frac{h_i h_i^T}{h_i^T \Gamma^{(k+1)} h_i + \sigma_{\epsilon_i}^2} \in \mathbb{R}^{p \times p} ,$$
$$S_i^{(k)} = \frac{\Gamma^{(k)} h_i h_i^T \Gamma^{(k)}}{h_i^T \Gamma^{(k)} h_i + \sigma_{\epsilon_i}^2} .$$



3. Expériences numériques

Modèle de Blasius pour le coefficient de perte de charge

Le coefficient de perte de charge f est une variable importante pour la simulation numérique des écoulements dans un réacteur nucléaire.

$$\log(f) = g(P, G, T_e, D) = \log(0.316) - 0.25 \log \left(\frac{GD}{\mu_f(T_e, P)} \right) . \quad (29)$$

avec $\mu(T_e, P)$ la viscosité de l'eau liquide.

☞ Paramètres physique :

- Diamètre hydraulique D (m)
- Débit massique G ($kg.m^{-2}.s^{-1}$)
- Température de l'eau T_e (K)
- Pression P (Pa)



$$\begin{cases} \log(f_i) = \Lambda_{1,i} + \Lambda_{2,i} \log\left(\frac{GD}{\mu(T_e, P)}\right) + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \\ \Lambda_i \sim \mathcal{N}(m, \Gamma) \end{cases} \quad (30)$$

➡ Génération d'un seul design d'expérience $\mathcal{D}_n = (D_i, G_i, T_{e,i}, P_i)_{1 \leq i \leq n}$. 1000 répliques sont faites uniquement sur ε_i, Λ_i avec les paramètres suivants :

$$m = [\log(0.316) \times 1.3, -0.25 \times 1.3]^T, \quad \Gamma = \text{diag}(\gamma), \quad \gamma = [0.5, 0.7]^T, \quad \sigma_{\varepsilon_i}^2 = 1.$$

Algorithmes testés

Initialisation global à $m_0 = [\log(0.316), -0.25]^T$ et $\Gamma_0 = \text{SNR} \times \mathbf{I}_2$, 10 *multi-start* avec $(\Gamma_{\text{init}})_{ii} \sim \mathcal{U}([0.1/\text{SNR}, 10/\text{SNR}])$. `n_iter_max=15000`, `tol=1e-5`.

- 👉 **EM** : Pour chaque *multi-start*, $m_{\text{init}} \sim \mathcal{N}(m_0, \Gamma_{\text{init}})$
- 👉 **ECME** : Pour chaque *multi-start*, $m_{\text{init}} \sim \mathcal{N}(m_0, \Gamma_{\text{init}})$
- 👉 **EMV profilée** : Optimisation L-BFGS-B avec pour bornes $[1e-10, +\infty[^2$
- 👉 **EMV restreinte** : Optimisation L-BFGS-B avec pour bornes $[1e-10, +\infty[^2$

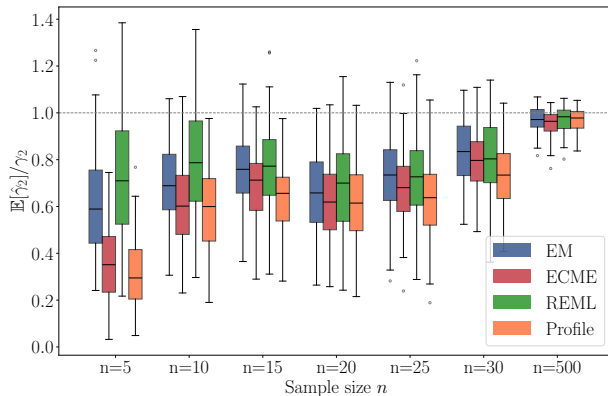


Figure – Boxplots du biais relatif de $\hat{\gamma}_2$, 100 réplifications de moyenne empirique de taille 10

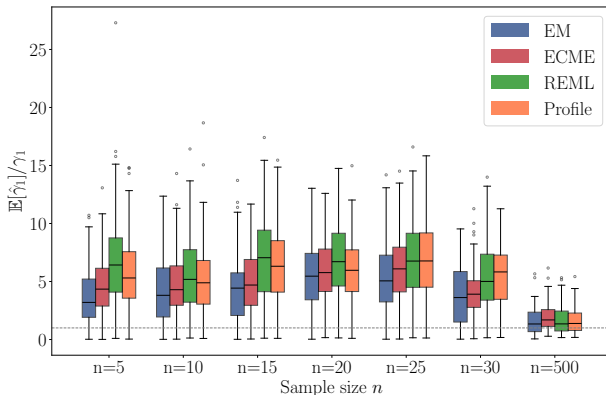


Figure – Boxplots du biais relatif de $\hat{\gamma}_1$, 100 réplifications de moyenne empirique de taille 10. γ_1 très difficile à estimer car $\text{rang}(\mathbf{X}) \approx 1$!

CIRCE sur un modèle jouet

Ce modèle jouet a pour but d'avoir une matrice de design $\mathbf{X}$ bien conditionnée, afin de conclure sur la performance des quatres algorithmes d'estimation.

$$\begin{cases} z_i = \Lambda_{1,i} + \Lambda_{2,i}X_i + \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon_i}^2) \\ \Lambda_i \sim \mathcal{N}(m, \Gamma) \\ X_i \sim \mathcal{N}(0, 1) \end{cases} \quad (31)$$

👉 Génération d'un seul design d'expérience $\mathcal{D}_n = (X_i)_{1 \leq i \leq n}$. 1000 réplifications sont faites uniquement sur ε_i, Λ_i avec les paramètres suivants :

$$m = [\log(0.316) \times 1.3, -0.25 \times 1.3]^T, \quad \Gamma = \text{diag}(\gamma), \quad \gamma = [0.5, 0.7]^T, \quad \sigma_{\varepsilon_i}^2 = 1.$$

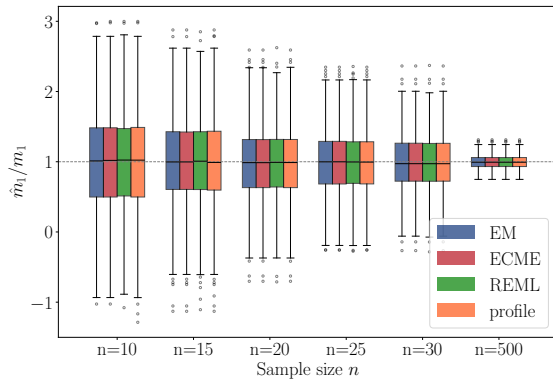


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{m}_1}{m_1}$ pour les 1000 réplifications pour différentes tailles d'échantillon n

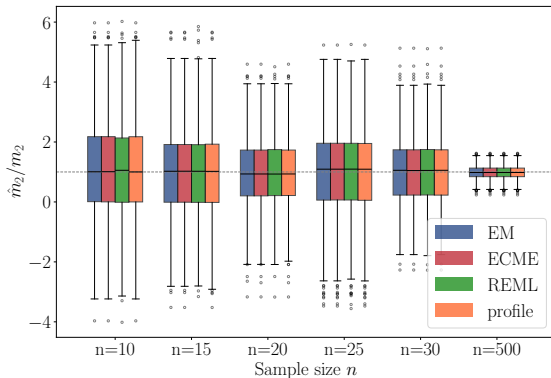


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{m}_2}{m_2}$ pour les 1000 répliques pour différentes tailles d'échantillon n

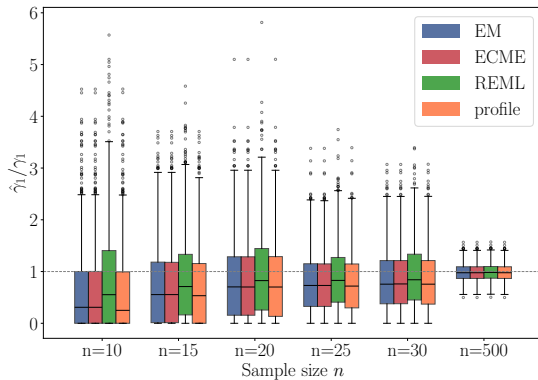


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{\gamma}_1}{\gamma_1}$ pour les 1000 réplifications pour différentes tailles d'échantillon n

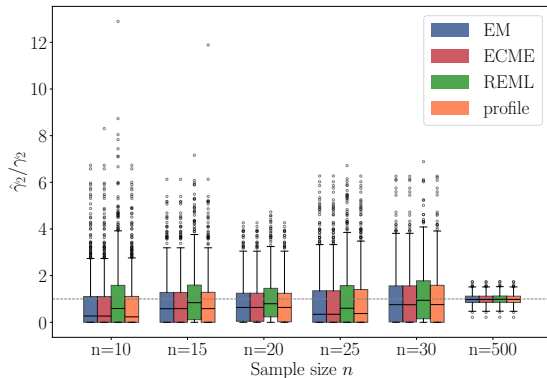


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{\gamma}_2}{\gamma_2}$ pour les 1000 réplifications pour différentes tailles d'échantillon n

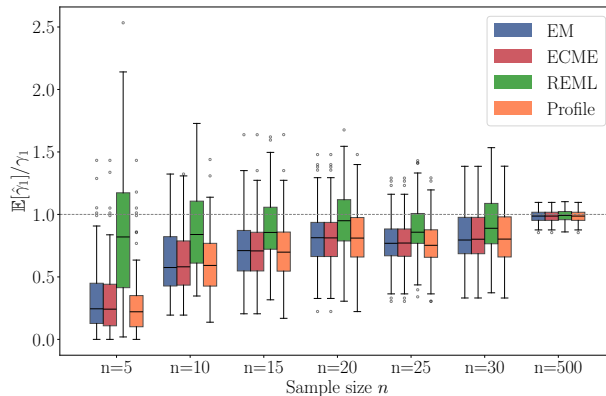


Figure – Boxplots du biais relatif de $\hat{\gamma}_1$, 100 réplifications de moyenne empirique de taille 10

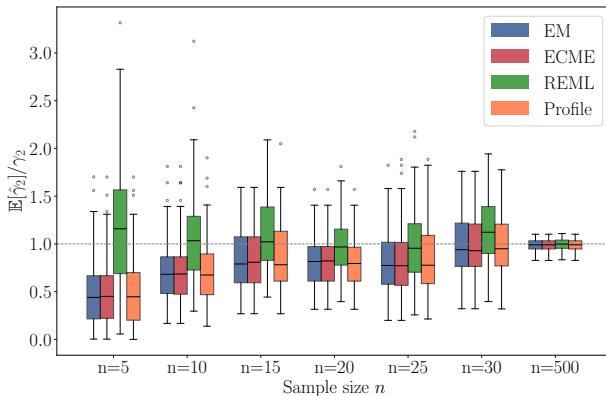


Figure – Boxplots du biais relatif de $\hat{\gamma}_2$, 100 réplifications de moyenne empirique de taille 10

Interpétation

☞ Aucune différence sur l'estimation des effets fixes (m_1, m_2)

Interpétation

- ☞ Aucune différence sur l'estimation des effets fixes (m_1, m_2)
- ☞ L'estimateur par max de vraisemblance restreinte diminue le biais pour les estimations de (γ_1, γ_2) , l'effet est notable en régime de faible données ($n \leq 15$).

Interpétation

- ☞ Aucune différence sur l'estimation des effets fixes (m_1, m_2)
- ☞ L'estimateur par max de vraisemblance restreinte diminue le biais pour les estimations de (γ_1, γ_2) , l'effet est notable en régime de faible données ($n \leq 15$).
- ☞ Les performances d'estimation dépendent fortement du bon conditionnement de $\mathbf{X}$.



4. Conclusion & perspectives

Conclusion

➡ La calibration des paramètres des modèles physiques est primordiale pour la *validation*(*) des OCS, ouvrant la voie à leur *qualification*(*)²

2. Les termes en italique suivi de (*) sont définis dans le glossaire de **ASN (Version du 25/07/2017)**

Conclusion

- ➡ La calibration des paramètres des modèles physiques est primordiale pour la *validation*(*) des OCS, ouvrant la voie à leur *qualification*(*)²
- ➡ La méthodologie CIRCÉ vise plutôt à établir une *quantification inverse des incertitudes* autour de paramètres nominaux ($\neq$ de l'approche **Kennedy and O'Hagan (2001)**)

2. Les termes en italique suivi de (*) sont définis dans le glossaire de **ASN (Version du 25/07/2017)**

Conclusion

- ➡ La calibration des paramètres des modèles physiques est primordiale pour la *validation*(*) des OCS, ouvrant la voie à leur *qualification*(*)²
- ➡ La méthodologie CIRCÉ vise plutôt à établir une *quantification inverse des incertitudes* autour de paramètres nominaux ($\neq$ de l'approche **Kennedy and O'Hagan (2001)**)
- ➡ Le code Python ayant servi aux expériences numériques est disponible sur GitHub.

2. Les termes en italique suivi de (*) sont définis dans le glossaire de **ASN (Version du 25/07/2017)**

Perspectives

➡ Comment fusionner différentes sources de données, certaine étant informative sur un seul paramètre et d'autres sur tout les paramètres ? **Approche modulaire, lien avec la calibration de codes couplées**

Perspectives

➡ Comment fusionner différentes sources de données, certaine étant informative sur un seul paramètre et d'autres sur tout les paramètres ? **Approche modulaire, lien avec la calibration de codes couplées**

$$\begin{cases} z_i^{(1)} = Y(M_1(\mathbf{x}_i^{(1)}; \lambda^{(1)})) + \varepsilon_i^{(1)} \\ z_i^{(2)} = Y\left(M_1(\mathbf{x}_i^{(1)}; \lambda^{(1)}), M_1(\mathbf{x}_i^{(2)}; \lambda^{(2)})\right) + \varepsilon_i^{(2)} \end{cases} \quad (32)$$

Perspectives

➡ Comment fusionner différentes sources de données, certaine étant informative sur un seul paramètre et d'autres sur tout les paramètres ? **Approche modulaire, lien avec la calibration de codes couplées**

$$\begin{cases} z_i^{(1)} = Y(M_1(\mathbf{x}_i^{(1)}; \lambda^{(1)})) + \varepsilon_i^{(1)} \\ z_i^{(2)} = Y\left(M_1(\mathbf{x}_i^{(1)}; \lambda^{(1)}), M_1(\mathbf{x}_i^{(2)}; \lambda^{(2)})\right) + \varepsilon_i^{(2)} \end{cases} \quad (32)$$

👉 Stage en 2027 en collaboration avec CEA/DAM/DIF (A. Quintin, P. Lartaud)

Perspectives

➡ Comment fusionner différentes sources de données, certaine étant informative sur un seul paramètre et d'autres sur tout les paramètres ? **Approche modulaire, lien avec la calibration de codes couplées**

$$\begin{cases} z_i^{(1)} = Y(M_1(\mathbf{x}_i^{(1)}; \lambda^{(1)})) + \varepsilon_i^{(1)} \\ z_i^{(2)} = Y\left(M_1(\mathbf{x}_i^{(1)}; \lambda^{(1)}), M_1(\mathbf{x}_i^{(2)}; \lambda^{(2)})\right) + \varepsilon_i^{(2)} \end{cases} \quad (32)$$

👉 Stage en 2027 en collaboration avec CEA/DAM/DIF (A. Quintin, P. Lartaud)

➡ Unification entre l'approche de Kennedy and O'Hagan (2001) et la méthodologie CIRCÉ ? 👉 *Embedded model error representation* de Sargsyan et al. (2019) :

$$z_i = Y(M(\mathbf{x}_i, \lambda + \delta(\mathbf{x}_i))) + \varepsilon_i \quad (33)$$

Application à la transposition (Sire et al., 2025)

References I

- ASN. Qualification des outils de calcul scientifique utilisés dans la démonstration de sûreté nucléaire – 1re barrière. Guide n° 28, Autorité de Sûreté Nucléaire, Version du 25/07/2017.
- M.J. Bayarri et al. A framework for validation of computer models. *Technometrics*, 49(2) : 138–154, 2007.
- G. Celeux et al. Identifying intrinsic variability in multivariate systems through linearized inverse methods. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 18(3) :401–415, 2010.
- R. Cocci et al. Extension of the CIRCE methodology to improve the inverse uncertainty quantification of several combined thermal-hydraulic models. *Nuclear Engineering and Design*, 398 :111974, 2022.
- A. Dempster, N. Laird, and D. Rubin. Maximum likelihood from incomplete data via the em algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Methodological)*, 39(1) : 1–22, 1977.

References II

- M. C. Kennedy and A. O'Hagan. Bayesian calibration of computer models. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology)*, 63(3) :425–464, 2001.
- M. Lavielle. *Mixed Effects Models for the Population Approach*. Chapman and Hall/CRC, 2014.
- Khachik Sargsyan, Xun Huan, and Habib N. Najm. Embedded model error representation for bayesian model calibration. *International Journal for Uncertainty Quantification*, 9(4) : 365–394, 2019.
- C. Sire, J. Garnier, B. Kerleguer, C. Durantin, G. Defaux, and G. Perrin. Bayesian calibration for prediction in a multi-output transposition context. *International Journal of Uncertainty Quantification*, 15 :37–59, 2025.
- A.P. Verbyla. A conditional derivation of residual maximum likelihood. *Australian Journal of Statistics*, 32(2) :227–230, 1990.

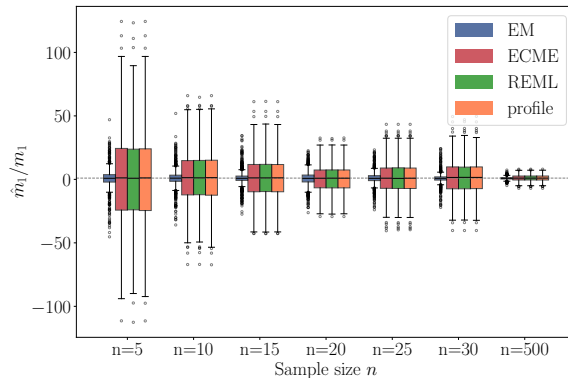


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{m}_1}{m_1}$ pour les 1000 répliques pour différentes tailles d'échantillon n

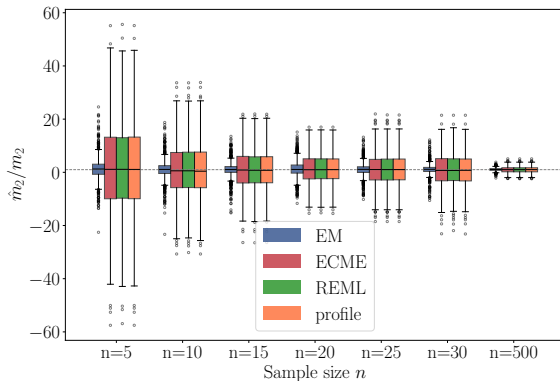


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{m}_2}{m_2}$ pour les 1000 réplifications pour différentes tailles d'échantillon n

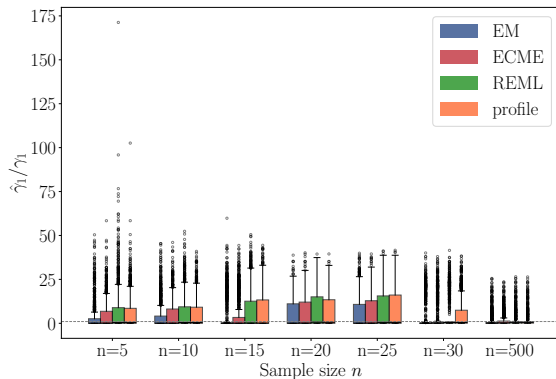


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{\gamma}_1}{\gamma_1}$ pour les 1000 réplifications pour différentes tailles d'échantillon n

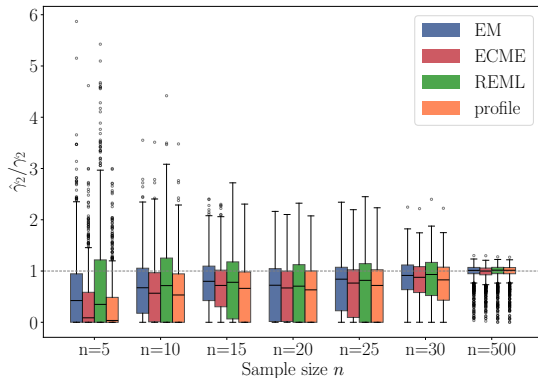
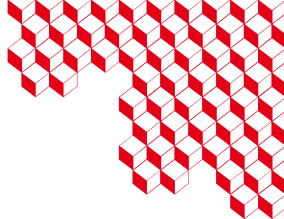


Figure – Boxplots de $\frac{\hat{\gamma}_2}{\gamma_2}$ pour les 1000 réplifications pour différentes tailles d'échantillon n



Merci de votre attention !

CEA SACLAY
91191 Gif-sur-Yvette Cedex
France
clement.gauchy@cea.fr