



CR	CEA/DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS DO07 - 12/05/2022	0	5H62	A-PIC12-04-02-02	SIMU/PIC12	1/20
NATURE	CHRONO UNITÉ	INDICE	UNITÉ	ÉLÉMENT D'OTP	CT. UNITÉ	PAGE

# Compte Rendu de Manifestation<sup>(\*)</sup> Internationale

(\*) congrès, conférence, workshop, séminaire

TITRE DE LA MANIFESTATION :	<b>SIAM Conference on Uncertainty Quantification (UQ22)</b>
ORGANISATEUR :	Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) American Statistical Association (ASA) GAMM Activity Group on Uncertainty Quantification (GAMM AG UQ)
DATE DE LA MANIFESTATION :	12 au 15 avril 2022
LIEU :	Westin Peachtree Plaza, Atlanta, Georgia, USA
PARTICIPANTS CEA (corédacteurs du CR) :	Amandine MARREL (DES/IRESNE/DER/SESI)
MOTS CLEFS :	Quantification des incertitudes, métamodèles, problème inverse et assimilation, analyse de sensibilité, logiciel et plateformes.

REDACTEUR PRINCIPAL		APPROBATEUR : Chef du DER/SESI/LEMS		EMETTEUR : Chef du DER/SESI	
Nom	Visa	Nom	Visa	Nom	Visa
Amandine MARREL		Nicolas MAURAND		Gérard MIGNOT	

En l'absence d'accord ou de contrat, la diffusion des informations contenues dans ce document auprès d'un organisme tiers extérieur au CEA est soumise à l'accord du Chef de Département.

Cadre de réalisation du document.

CLASSIFICATION				
DR	CC	CD	SD	sans
				X

## LISTE DE DIFFUSION :

DES/EC/DPE/SIMU	X. RAEPSAET, T. LAPORTE
DES/ISAS/DM2S	F. DAMIAN
DES/ISAS/DM2S/STMF	P. GAVOILLE, E. NOUY
DES/ISAS/DM2S/STMF/LGLS	E. ADAM, G. DAMBLIN, F. GAUDIER, J-M. MARTINEZ, R. CHOCAT, O. BALDE, G. DANIEL, J-B. BLANCHARD, G. ARNAUD
DES/ IRESNE/DER	N. DEVICTOR, G. THOMINE, R. JACQMIN, F JEURY
DES/IRESNE/DER/SPRC	J-C. BOSQ
DES/IRESNE/DER/SESI	G. MIGNOT, E. RICHEBOIS, F. BERTRAND, C. VAGLIO-GAUDARD
DES/IRESNE/DER/SESI/LCOS	M. GUYOT
DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS	G. BILLO, P. OLITA, N. PEROT, H. VELARDO, G. SARAZIN, A. MARREL, N. MAURAND
DES/EC/DSE	H. GOUTTE, G. BORDIER
DG/CEA/CAD	J. VAYRON
DG/CEA/CAD/C2A	B. BESNAINOU, O. PROVITINA, F. AUBERT
DG/CEA/CAD/DSTG/STIC/GISI	E. BROUSSES
<b>DIFFUSION EXTERNE</b>	
EDF R&D	M. KELLER, V. CHABRIDON, B. IOOSS, T. DELAGE
FRAMATOME	M. SEGOND

Clt : GED SESI 1.6

## FAITS MARQUANTS

- Conférence internationale ayant lieu tous les deux ans sur **méthodes probabilistes et statistiques pour la quantification des incertitudes** dans les modèles numériques.
- En mode hybride pour l'édition 2022 avec **près de 900 participants** (dont environ 40% en présentiel).
- Participation des chercheurs issus du monde académique, d'instituts technologiques ou industriels, développeurs ou utilisateurs des méthodes statistiques.
- **Co-organisation par le DER/SESI d'un mini-symposium en 3 parties, porté principalement par EDF R&D, dans le cadre du projet ANR SAMOURAI.** Mini-symposium regroupant 12 présentations sur *les approches par métamodèles pour l'inversion et l'optimisation robuste*.
- **Plusieurs contributions du DER (SESI et SPRC) :** présentations de la méthodologie ICSCREAM (A. Marrel, DER/SESI) pour l'identification des configurations pénalisantes de paramètres dans l'étude de scénarii accidentels sur les REP, et des travaux de thèse de L. Berry (DER/SPRC) sur la calibration des outils de simulation neutronique.
- **Forte émulation autour du développement des plateformes *opensource* dédiées au traitement des incertitudes.**

	<b>CR</b>	<b>CEA/DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS DO07 – 12/05/2022</b>	<b>0</b>	<b>3/20</b>
NATURE		CHRONO UNITÉ	INDICE	PAGE

# Compte-rendu de la conférence SIAM-UQ 2022

## 1. Présentation générale

Editeur de livres et de plusieurs journaux scientifiques, le Groupe américain SIAM (*Society for Industrial and Applied Mathematics*) organise des conférences internationales sur les thèmes des mathématiques appliquées. Parmi ces conférences, **la conférence bisannuelle SIAM-Uncertainty Quantification (UQ) constitue l'une des grandes conférences internationales de référence dans le domaine des méthodes probabilistes et statistiques pour la quantification des incertitudes dans les modèles numériques**. La quantification des incertitudes est essentielle pour évaluer les capacités prédictives des modèles et simulateurs numériques (outils de calcul) et fait aujourd'hui consensus dans tous les domaines de la science et de l'ingénierie. La récente pandémie a d'ailleurs mis en évidence l'importance de la quantification de l'incertitude lorsqu'on travaille avec des modèles potentiellement imprécis et des données insuffisantes.

Cette conférence est un cadre d'échange privilégié entre divers groupes issus du monde universitaire, de l'industrie et des laboratoires gouvernementaux, améliorant ainsi la communication et contribuant aux avancées futures dans le domaine. Les sujets présentés traitent aussi bien d'aspects mathématiques et statistiques théoriques, méthodologiques, mais aussi des développements algorithmiques et informatiques associés, ainsi que de la mise en pratique dans divers domaines d'applications.

L'édition 2022 s'est déroulée au Westin Peachtree Plaza d'Atlanta (USA), du 12 au 15 avril, en **mode hybride**, avec près de **900 participants** (40% en présentiel et le reste en distanciel). Plusieurs formats d'exposés étaient proposés avec 2 sessions plénières de 45min chaque jour et des sessions en parallèle. Ces dernières étaient regroupées en mini-symposiums d'une durée de 2h chacun (4 exposés de 30 minutes) ou en sessions « contributives » de 2h découpées en 5 exposés de 20 minutes chacun.

Les différents exposés ont abordé l'ensemble des sujets de la thématique : métamodèles et plus généralement apprentissage machine (*machine learning*) avec une place très importante pour la régression par processus gaussien, calage des paramètres et plus généralement problèmes d'inversion et d'optimisation, planification d'expériences numériques, analyse de sensibilité et prédiction d'évènements extrêmes.

**En collaboration avec EDF R&D (porteur principal) et CentraleSupélec, le DER/SESI a proposé et co-organisé un mini-symposium en 3 parties intitulé « *Metamodel-based approaches for robust (stochastic) inversion and optimization* », comprenant 12 présentations dont une sur la méthodologie ICSCREAM (DER/SESI) et une autre sur la calibration bayésienne des modèles de neutronique par L. Berry (DER/SPRC). Ce mini-symposium était notamment organisé dans le cadre du projet ANR SAMOURAI<sup>1</sup>, démarré en 2021 et dans lequel le DER/SESI est co-pilote d'un *workpackage* sur les métamodèles pour la grande dimension.**

On peut noter la forte présence de la communauté française des *computer experiments*. Plus généralement, deux pôles jouent un rôle significatif sur le sujet de la quantification des incertitudes en simulation numérique : la communauté américaine bien sûr mais aussi celle européenne composée principalement du Groupe de Recherche CNRS MASCOT-NUM<sup>2</sup>, et du groupe SAMO<sup>3</sup> organisateur de la conférence du même nom.

**Les exposés sont globalement d'un niveau très élevé et spécialisé, ce qui reflète bien le dynamisme et l'émulation dans cette discipline, en plein essor.** On peut cependant regretter le trop grand nombre de sessions en parallèle, qui rend le choix (pertinent) difficile surtout avec des titres de mini-symposium extrêmement proches pour certains. L'investissement dans l'organisation d'un mini-symposium en 3 parties limite également l'accès aux autres mini-symposium.

## 2. Co-organisation d'un mini-symposium avec présentations du DER

Porté principalement par V. Chabridon (EDF R&D) et co-organisé avec Julien Bect (CentraleSupélec), ce mini-symposium avait pour but de fournir une vue d'ensemble des avancées récentes concernant à la fois les questions théoriques et les aspects appliqués de deux problèmes récurrents posés par la quantification des incertitudes :

<sup>1</sup>Projet intitulé « *Simulation Analytics and Metamodel-based solutions for Optimization, Uncertainty and Reliability Analysis* » et démarré en mars 2021, réunissant des partenaires industriels et académiques (CEA/DES, EDF R&D, IFPEN, Safran, CentraleSupélec, EMSE et Polytechnique Montréal).

<sup>2</sup>Groupe de recherche français sur les méthodes stochastiques pour l'analyse des codes numériques. Le CEA/DES est membre du bureau depuis sa création.

<sup>3</sup>Groupe *Sensitivity Analysis of Model Output*, impliquant principalement le centre commun de recherche (JRC) d'Ispra, l'université de Milan, l'ETH Zurich, et le GdR MASCOT-Num.

cea	CR	CEA/DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS DO07 – 12/05/2022	0	4/20
NATURE		CHRONO UNITÉ	INDICE	PAGE

**l'inversion robuste et l'optimisation robuste.** On retrouve ces problèmes notamment dans les études de fiabilité ou de conception.

L'inversion consiste à identifier l'ensemble des valeurs de paramètres d'entrée (variables scénarii par exemple) conduisant au dépassement d'une valeur seuil données pour la quantité d'intérêt (variable en sortie du modèle). Le paradigme d'inversion « robuste » fait référence au fait que des variables (supplémentaires) incontrôlables doivent être pris en compte dans le processus d'inversion des paramètres scénarii. Dans le domaine de l'optimisation, des incertitudes relatives à des paramètres d'entrée aléatoires peuvent également être considérées, indépendamment d'autres paramètres que l'on cherche à optimiser (paramètres de conception par exemple). A noter que la calibration (ou calage de paramètres) peut être vu comme un problème d'optimisation (cf. présentation de L. Berry du DER/SPRC).

Dans ce contexte, l'objectif du mini-symposium était ainsi de présenter les **nouvelles avancées autour des approches basées sur l'utilisation des méta-modèles**. La proposition de mini-symposium incluant l'ensemble des 12 présentations retenues est détaillée en [Annexe 1](#) du Compte Rendu.

Parmi les présentations du mini-symposium, figuraient deux présentations du DER :

- **Présentation de la méthodologie ICSCREAM (A. Marrel, DER/SESI)**, développée en collaboration avec EDF R&D, pour l'identification des configurations pénalisantes de paramètres scénarii, dans l'étude de l'accident APRP BI (Accident de Perte de Réfrigérant Primaire par Brèche Intermédiaire) sur un Réacteur à Eau Pressurisée avec injection de sécurité en branche froide à court terme. Cette méthodologie combine des outils statistiques avancés et récents d'analyse de sensibilité globale et ciblée, de métamodélisation en grande dimension et de propagation des incertitudes. Son efficacité a été démontrée sur plusieurs cas d'application de complexité croissante parmi lesquels un cas réacteur complet avec une centaine de variables incertaines dont une dizaine de paramètres scénario à pénaliser. Plus généralement, **cette méthodologie générique permet de traiter un large spectre d'applications, impliquant la simulation numérique avec un grand nombre de variables incertaines**. Les slides de la présentation sont données en [Annexe 2](#) du Compte Rendu.
- **Présentation des travaux de thèse de L. Berry (DER/SPRC, avec co-direction du DER/SESI)** portant sur la **calibration d'un modèle de neutronique à partir de mesures expérimentales, via une méthodologie combinant émulateur du modèle, régression linéaire bayésienne et analyse de sensibilité**. L'objectif est de calibrer les données technologiques<sup>4</sup> du cœur fournies en entrée du modèle numérique afin de réduire les écarts entre les calculs et des mesures expérimentales équivalentes réalisées à l'aide d'une instrumentation In-Core. Cette calibration s'appuie sur l'approximation du simulateur par un émulateur peu coûteux en temps CPU : construction d'un modèle physique simplifié *via* le régime des petites perturbations puis approximation par un modèle de régression linéaire bayésienne. Une analyse de sensibilité montre qu'il est possible de négliger l'incertitude sur les paramètres de l'émulateur et de les fixer dans une approche dite "*plug-in*" sans introduire de biais supplémentaire dans le processus de calibration. Une distribution *a posteriori* des paramètres technologiques est alors estimée. **La présentation de L. Berry a permis d'illustrer la complexité des problématiques industrielles rencontrées** (bien au-delà des illustrations analytiques souvent proposées) **et ainsi la puissance des outils et méthodes statistiques pour y apporter des réponses pertinentes**, dans un cadre mathématique rigoureux garantissant la confiance dans les résultats obtenus.

A noter également qu'une autre thèse dont la direction est assurée par A. Marrel au DER/SESI a fait l'objet d'une présentation dans le cadre d'une session de contributions (hors mini-symposium). Il s'agit des travaux de F. Hakimi en dernière année de thèse au DTN/SMTA. Ses travaux portent également sur la calibration et validation d'un simulateur numérique (code MC3D), modélisant l'interaction corium-eau en séquence accidentelle pouvant conduire au phénomène d'explosion de vapeur.

### 3. Résumés d'exposés marquants

- **Présentation plénière de M. Gu - Scalable Gaussian Process for Computer Model Emulation and Uncertainty Quantification.** Département de Statistiques et Probabilités Appliquées, Université de Californie (USA).  
Gu a présenté plusieurs de ses travaux majeurs autour de l'utilisation du métamodèle (ou émulateur) processus gaussien (PG) pour l'approximation des simulateurs numériques dont :
  - **Estimation plus robuste des hyperparamètres du PG** par un choix judicieux de loi *a priori* et une reparamétrisation des hyperparamètres. Les améliorations ainsi obtenues sur la forme de la

<sup>4</sup>Les incertitudes sur les données technologiques sont principalement liées à l'usinage du cœur (tel que fabriqué) et à son assemblage.

fonction de vraisemblance à maximiser pour estimer les hyperparamètres du PG sont démontrées théoriquement et empiriquement. Des travaux sont actuellement réalisés au DER/SESI (projet SIMU/PICI2) pour étudier d'autres approches pour rendre plus robuste l'estimation des hyperparamètres *via* des critères de validation sur la variance de prédiction du métamodèle. **Ces travaux pourront être comparés à l'approche de Gu**, notamment sur les exemples analytiques proposés dans ses papiers de 2018 et 2019.

- **Extension du PG dans le cas de variables de sortie « massives »**, telles que des fonctions temporelles et des champs spatiaux comprenant par exemple de l'ordre de  $k=10^9$  coordonnées. Pour éviter de construire un métamodèle PG pour chacune des  $k$  sorties et réduire la complexité du calcul de la loi prédictive, Gu propose un *parallel partial* PG. Ces travaux ont un intérêt dans le cas de variables fonctionnelles discrétisées très finement, avec potentiellement des hétérogénéités locales et pour lesquelles on souhaite avoir une prédiction précise en chaque coordonnée. Autrement, une approche plus simple avec réduction de dimension (du type analyse en composantes principales) combinée à une métamodélisation des coefficients par PG donne souvent des résultats très satisfaisants.
- **Extension du PG aux cas des entrées et sorties multi-dimensionnelles (et corrélées) et aux modèles dynamiques**. Gu utilise un filtre de Kalman et lisseur Rauch-Tung-Striebel comme techniques de marginalisation permettant de calculer la vraisemblance et faire des prédictions du PG sans approximation.

La plupart de ces développements sont implémentés dans le package RobustGaSP disponible en langage R (site du CRAN) et Matlab (GitHub) et des applications sont proposées sur plusieurs cas test : modèle d'écoulement pyroclastique ou encore simulation de dynamique moléculaire.

Cet exposé illustre bien l'intérêt majeur et le dynamisme des communautés UQ et *machine learning* autour de l'extension des métamodèles PG aux problématiques plus complexes : grandes bases de données, variables spatio-temporelles, systèmes dynamiques. Ce sujet est aussi un des principaux thèmes de recherche du DER/SESI dans le cadre du projet SIMU/PICI2 et au-delà dans le cadre du projet I3P Incertitudes et du projet ANR SAMOURAI.

- **Mini-symposium sur les logiciels pour la quantification des incertitudes**. L'objectif était de réunir les experts en développement de logiciels dans tous les domaines de la quantification des incertitudes et de présenter leurs récents développements.

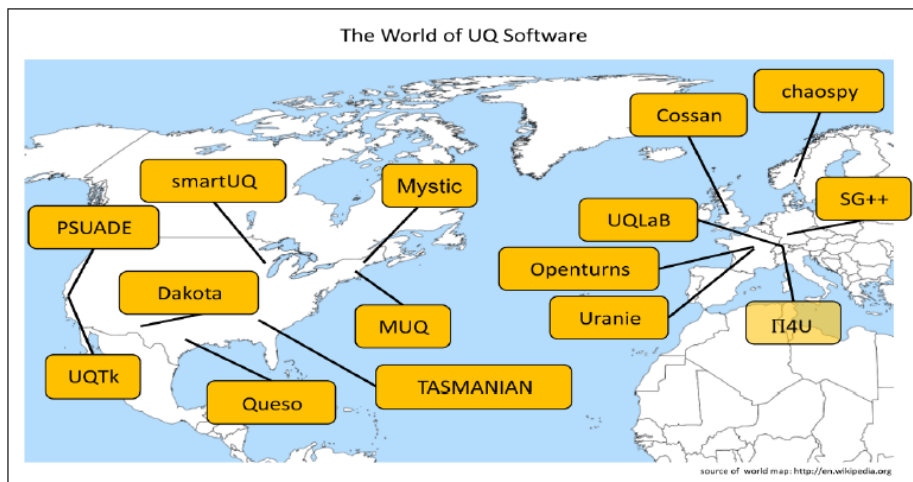


Figure 1 - Logiciels dédiés au traitement des incertitudes en 2018, figure extraite du CR de la Conférence SIAM-UQ 2018 référencée DEN/DANS/DM2S/STMF/LGLS/CRM/2018-62899.

Ainsi, depuis cette cartographie issue de la dernière conférence SIAM-UQ de 2018, plusieurs nouveautés et avancées notables ont été identifiées et montrent **le dynamisme et l'intérêt de la communauté UQ pour produire des outils opensource**. Plus particulièrement, **dans le même esprit que les plateformes URANIE (développée par le CEA) et OpenTURNS (EDF R&D), sont à noter :**

- **Emergence de la plateforme LAGUN (Safran-IFPEN – Langage R – avec IHM)**  
Initiée en interne par Safran Tech puis co-développée avec l'IFPEN depuis 2019, cette plateforme en langage R et Shiny offre une interface conviviale et très facile d'utilisation pour le déploiement des différentes étapes du traitement des incertitudes. Cette plateforme a été développée dans le

cea	CR	CEA/DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS DO07 – 12/05/2022	0	6/20
NATURE		CHRONO UNITÉ	INDICE	PAGE

cadre du Groupe de Recherche CNRS MASCOT-NUM, auquel participe le CEA/DES depuis plus de 15 ans et est d'ailleurs hébergé sur son site : <http://gdr-mascotnum.org/lagun/>. Utilisable en ligne (solution de type *SaaS* pour *Software-as-a-Service*) ou installable en local (sur demande aux développeurs), la plateforme permet de **réaliser via son IHM de dérouler l'ensemble du workflow de traitement des incertitudes** : planification d'expériences, lancement du simulateur (ou import de données externes), pré-analyse graphique des résultats, construction de différents métamodèles, analyse de sensibilité, propagation des incertitudes et enfin, optimisation sous incertitudes. La plateforme offre aussi des **tutoriaux très détaillés et pédagogiques** pour permettre aux ingénieurs une utilisation avisée des méthodes. Lagun qui s'adresse aux ingénieurs (non spécialistes des méthodes UQ) vise ainsi à intégrer des méthodes de pointe *via* la collaboration Safran-IFPEN mais aussi *via* les contributions des chercheurs développeurs de la communauté UQ (choix du langage R qui est le principal langage, avec Python, de développement de packages par les statisticiens).

○ **Evolution du logiciel UQLab (ETH Zurich – Langage Matlab)**

Développée depuis 2013 par l'ETH<sup>5</sup> Zurich (Suisse) en langage MATLAB, ce logiciel très complet regroupe lui aussi toutes les étapes classiques du traitement des incertitudes et plus généralement la plupart des méthodes développées par le GdR MASCOT-NUM et la communauté UQ (<https://www.uqlab.com/>). **S'appuyant sur des ressources significatives et une veille scientifique très active**, UQLab propose régulièrement de nouveaux modules, à la pointe des méthodes. Un des autres points forts d'UQLab est sans aucun doute sa **documentation très soignée et très complète sur chaque module** (incluant théorie, méthodologie et une large panel d'exemples). Cependant, UQLab présentait (jusqu'à présent) deux inconvénients majeurs : l'achat d'une licence dans le cas d'une utilisation par les industriels (peu compatible aujourd'hui avec un monde UQ en *opensource*) et surtout son langage MATLAB qui nécessitait de disposer d'une licence du logiciel du même nom développé par la société MathWorks<sup>6</sup>. De plus, l'utilisation du seul langage Matlab est de moins en moins pertinent : les langages R et Python sont aujourd'hui les langages privilégiés pour les développements *opensource* dans la communauté UQ.

Les développeurs d'UQLab ont donc décidé **deux évolutions majeures pour cette année** :

- **Passage du logiciel en *opensource* depuis février 2022**, avec fusion en un seul et même outil des modules et du cœur du logiciel ;
- **Création du projet UQCloud** : solution de type *SaaS* où le logiciel UQLab est pré-installé et compilé sur un cloud (« *Docker Container* » ici pour UQLab) sur lequel l'utilisateur peut directement réaliser son étude UQ, permettant ainsi de s'affranchir d'une licence Matlab. Des *wrappers* avec différents langages (Python, R, Julia...) sont d'ailleurs fournis. Concernant l'interfaçage avec le langage Python, il a aussi été créé UQ[Py]lab qui regroupe l'ensemble des liaisons fonctionnelles permettant d'accéder aux fonctions d'UQLab *via* du langage Python. La première version d'UQ[py]Lab 1.0 est prévue pour l'été 2022. Cette évolution est similaire à celle déjà réalisée sur URANIE, initialement codée en langage Root, avant l'ajout d'un *wrapper* Python pour les différentes fonctions.

○ **Logiciel UQpy (Univ. Johns Hopkins – Langage Python)**

Développée depuis 2020 par l'Université Johns Hopkins (USA) en langage Python, le logiciel UQpy s'articule autour de modules reprenant les étapes clés du traitement des incertitudes (similaires aux plateformes LAGUN, URANIE, ou encore OPENTurns). Disponible sur <https://uqpyproject.readthedocs.io/en/latest/index.html>, sa modularité et le langage Python permet d'en faire une **toolbox facile d'utilisation et à partir de laquelle de nouvelles méthodes peuvent être rapidement implémentées, testées**, et intégrées et/ou combinées aux autres méthodes de traitement des incertitudes. Elle ne constitue cependant **pas réellement une plateforme**, il n'y a pas d'IHM et sa documentation porte essentiellement sur l'implémentation des méthodes (similaire à une documentation pour des packages R). Son utilisation semble davantage pertinente pour des développements de R&D en Python dans le domaine UQ, souhaitant notamment diffuser leurs méthodes dans la communauté (mise à disposition du code par les auteurs d'une publication pour permettre une reproduction des résultats, par exemple).

<sup>5</sup>École Polytechnique Fédérale de Zurich. Le logiciel UQLab disponible sur <https://www.uqlab.com/> est développé par la Chaire « Risque, Sûreté et Quantification des Incertitude » sous la supervision de B. Sudret et S. Marelli.

<sup>6</sup>En moyenne, de 1k€ à 2k€ pour une licence individuelle.

cea	CR	CEA/DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS DO07 – 12/05/2022	0	7/20
NATURE		CHRONO UNITÉ	INDICE	PAGE

Ainsi, l'émergence de nouvelles plateformes **opensource de qualité** (contributions des experts du domaine) incluant l'ensemble des étapes du workflow de traitement des incertitudes, **et les évolutions du logiciel UQLab amènent à réfléchir sur l'évolution de la plateforme interne URANIE. La pertinence d'une IHM et l'importance de tutoriels très pédagogiques** sont aussi mises en lumière par ses évolutions. **Une convergence ou fusion avec la plateforme d'EDF OpenTURNS pourrait être pertinente et (à nouveau) envisagée** : elle permettrait de mutualiser les contributions et ressources, d'autant plus qu'aujourd'hui la plateforme de nos partenaires s'est dotée d'une IHM *opensource* : Persalys (<https://persalys.fr/>), très appréciée des utilisateurs et qui pourrait répondre à certains besoins applicatifs du CEA/DES.

- **Mini-symposium sur l'analyse de sensibilité :**

**Proportional Marginal Effects (PME) for Sensitivity Analysis with Correlated Inputs – B. Iooss (EDF R&D, France).** Ces travaux s'inscrivent dans le cadre de **l'analyse de sensibilité globale d'un modèle numérique avec entrées statistiquement dépendantes**. Pour répondre à cette problématique, plusieurs travaux récents, notamment à EDF R&D et au DM2S/STMF ont été proposés autour des indices de Shapley, issus de la théorie des jeux coopératifs.

Cependant, ces indices présentent notamment un inconvénient : une entrée n'intervenant pas dans le modèle peut être associée à un indice de Shapley strictement positif s'il est corrélé à une entrée présente dans le modèle. Plus généralement, on observe une absence de discrimination entre l'influence des entrées en raison du principe (inhérent aux indices de Shapley) de la redistribution équitable de la contribution des entrées. Pour pallier ce problème, les auteurs proposent d'utiliser une autre règle d'allocation de la théorie des jeux appelée valeur proportionnelle. De nouveaux indices, **les effets marginaux proportionnels (PME)**, sont ainsi déduits. Il est montré par les auteurs que **les PME présentent un pouvoir de discrimination entre variables influentes et non influentes plus important que celui des effets de Shapley** (illustrations sur cas tests analytiques et industriels). Leur utilisation pour réaliser un *screening* (criblage) des variables d'entrées incertaines d'un modèle apparaît ainsi comme très pertinente. **Ces indices pourraient être intégrés à la plateforme URANIE, en complément des indices de Shapley.** En perspective, il nous semble également pertinent d'étudier la **construction d'un test statistique** pour tester la nullité de chaque indice PME afin de déterminer une valeur seuil de PME en dessous de laquelle une variable sera considérée comme non significativement influente. **EDF R&D est intéressé par cette idée qui pourrait constituer une proposition de collaboration pour 2023, dans le cadre des projets SIMU/PICI2 et I3P Incertitudes.**

- **Mini-symposium sur les méthodes à noyau :**

**Kernel-based Statistical Methods for Functional Data – G. Wynne (Imperial College Londres, U-K).** Les algorithmes statistiques basés sur l'utilisation de noyaux et surtout d'espaces fonctionnels associés ont connu un grand succès dans l'apprentissage statistique, mais aussi dans l'analyse de sensibilité. Des travaux récents réalisés au DER/SESI se sont d'ailleurs intéressés à ces approches notamment pour construire les indices de sensibilité de type HSIC, qui ont montré leur grande efficacité dans nos applications (indices utilisés notamment dans la méthode ICSCREAM). Dans les travaux présentés, Wynne et al. s'intéressent à la définition et l'utilisation des **noyaux dans le cadre spécifique de données fonctionnelles** : séries temporelles ou champs spatiaux par exemple. Ce type de données peut être rencontré aussi bien en entrée comme en sortie de nos modèles dans les applications traitées au CEA/DES. Dans le cadre du post-doctorat de R. EL Amri achevé en octobre 2021, **le DER/SESI a d'ailleurs proposé des noyaux pour les données fonctionnelles afin d'étendre l'utilisation des indices HSIC à ce type de variables.** Ces travaux ont fait l'objet d'un papier [1] actuellement en *review* et ont notamment été utilisés pour l'analyse de transitoires thermo-hydrauliques pour l'ilotage dans le projet GEN2&3/GESTN. **Une comparaison avec les noyaux fonctionnels proposés par Wynne et al. pourrait être très pertinente** (toujours dans le cadre des indices HSIC pour l'analyse de sensibilité), ainsi qu'une **application aux nouveaux transitoires d'ilotage** qui seront simulés en 2022.

[1] El Amri & Marrel. More powerful HSIC-based independence tests, extension to space-filling designs and functional data. Preprint 2021. <https://hal.archives-ouvertes.fr/cea-03406956/>.

	<b>CR</b>	<b>CEA/DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS DO07 – 12/05/2022</b>	<b>0</b>	<b>8/20</b>
NATURE		CHRONO UNITÉ	INDICE	PAGE

## Annexe 1 : Mini-symposium en 3 parties

12/04 de 9h30 à 11h30, 13/04 de 13h45 à 15h45 et 14/04 de 14h à 16h

### Organizers:

Vincent CHABRIDON (EDF R&D), Julien BECT (CentraleSupélec, L2S), Amandine MARREL (CEA)

### Title:

**"Metamodel-based approaches for robust (stochastic) inversion and optimization"**

### Abstract:

*This mini-symposium aims at providing an overview of recent advances regarding both theoretical issues and applied aspects of two canonical problems in uncertainty quantification: namely, robust inversion and robust optimization. These two classes of problems are frequently encountered in several applied fields, from reliability and risk assessment to robust and reliable design. Inversion consists in the identification of the set of input values leading to a given output threshold exceedance. It is sometimes known as excursion set identification. Robustness appears as soon as uncontrollable variables (typically, environmental parameters) have to be handled, leading to the so-called "robust inversion" paradigm. In the optimization field, uncertainties can be inserted at every stage and several formulations can be considered. Robust (or stochastic) optimization plays a fundamental role in several applied fields. For some cases, inversion and robust optimization can be intertwined and strong links can be highlighted between them. The scope here is to present new trends of research, especially in the unifying context of metamodel-based approaches seen as a powerful framework for tackling both robust inversion and optimization in the context of costly numerical simulators. Theoretical developments, computational methods and related software, as well as challenging applications, will serve as an illustration of the current breadth and liveliness of these research fields.*

### List of speakers:

#### ► Session 1

- "Robust inversion under uncertainty for flooding risk analysis"  
**Charlie SIRE (speaker)**  
 Institute for Radiological Protection and Nuclear Safety  
31 avenue de la division Leclerc 92262 Fontenay-aux-Roses, France  
 <mailto:yann.richet@irsn.fr> ☎ +33 1 58 35 88 84
- "Safe set estimation of expensive to evaluate functions with Gaussian processes"  
**Dario Azzimonti (speaker)**  
 Dalle Molle Institute for Artificial Intelligence USI-SUPSI  
Polo universitario Lugano - Campus Est, Via la Santa 1  
CH-6962 Lugano-Viganello  
 <mailto:dario.azzimonti@idsia.ch> ☎ +41 (0)58 666 66 66
- "Set inversion under functional uncertainties with joint meta-models"  
**Clémentine Prieur (speaker)**  
 Université Grenoble Alpes, Bâtiment IMAG, 700 Av. Centrale, 38401 Saint-Martin-d'Hères  
 [clementine.prieur@univ-grenoble-alpes.fr](mailto:clementine.prieur@univ-grenoble-alpes.fr) ☎ +33 4 57 42 17 77
- "Agnostic Multi-Fidelity Regression for Aerospace Design Applications "  
**Pietro Marco Congedo**  
 INRIA  
 [pietro.congedo@inria.fr](mailto:pietro.congedo@inria.fr)

#### ► Session 2

- "The ICSCREAM methodology: Identification of penalizing configurations in computer experiments using screening and metamodel – Applications in thermal-hydraulics"  
**Amandine Marrel (speaker), Bertrand Iooss, Vincent Chabridon**  
 French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA)  
CEA, DES, DER, Cadarache Center, F-13108 Saint Paul Lez Durance, France  
 [amandine.marrel@cea.fr](mailto:amandine.marrel@cea.fr)



	<b>CR</b>	<b>CEA/DES/IRESNE/DER/SESI/LEMS DO07 – 12/05/2022</b>	<b>0</b>	<b>9/20</b>
NATURE		CHRONO UNITÉ	INDICE	PAGE

6. "Reliability-based inversion: Stepwise uncertainty reduction strategies?"  
**Romain Ait Abdelmalek-Lomenech (speaker), Julien Bect, Emmanuel Vazquez**  
✉ Université Paris-Saclay, CNRS, CentraleSupélec, Laboratoire des signaux et systèmes, 91190, Gif-sur-Yvette, France  
CentraleSupélec, bât. Bréguet, 3, rue Joliot Curie, 91190 Gif-sur-Yvette  
📧 [julien.bect@centralesupelec.fr](mailto:julien.bect@centralesupelec.fr) ☎ +33 (0)1 69 85 14 25
7. "Adaptive yield optimization with mixed gradient information"  
**Mona Fuhrländer (speaker), Sebastian Schöps**  
✉ Computational Electromagnetics Group, Technische Universität Darmstadt, Schlossgartenstr. 8, 64289 Darmstadt, Germany  
Centre for Computational Engineering, Technische Universität Darmstadt, Dolivostr. 15, 64293 Darmstadt, Germany  
📧 [mona.fuhrlaender@tu-darmstadt.de](mailto:mona.fuhrlaender@tu-darmstadt.de) ☎ +49 6151 16 24414
8. "Calibration of neutronic model based on Bayesian linear regression and sensitivity analysis with Sobol' indices"  
**Louis Berry (speaker), Amandine Marrel, Fabrice Gamboa**  
✉ French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA)  
CEA, DES, DER, Cadarache Center, F-13108 Saint Paul Lez Durance, France  
📧 [louis.berry@cea.fr](mailto:louis.berry@cea.fr)

► **Session 3**

9. "Sampling criteria for constrained bayesian optimization under uncertainties"  
**Julien Pelamatti (speaker)**  
✉ EDF R&D, 6 quai Watier, 78 401, Chatou, France  
📧 [julien.pelamatti@edf.fr](mailto:julien.pelamatti@edf.fr)
10. "Multi-objective robust optimization using adaptive Kriging for problems with mixed continuous-categorical variables"  
**Moustapha Maliki (speaker), Bruno Sudret**  
✉ ETH Zurich - Institute of Structural Engineering  
Chair of Risk, Safety and Uncertainty Quantification  
📧 [moustapha@ibk.baug.ethz.ch](mailto:moustapha@ibk.baug.ethz.ch)
11. "Multi-objective robust Bayesian optimization"  
**Jixiang Qing, Ivo Couckuyt (speaker)**  
✉ IDLab, Ghent University – imec  
iGent, Technologiepark-Zwijnaarde 126, B-9052 Gent, Belgium  
📧 [ivo.couckuyt@ugent.be](mailto:ivo.couckuyt@ugent.be) ☎ +32 9 331 49 91
12. "A two-step procedure for time-dependent reliability-based design optimization involving piece-wise stationary Gaussian processes"  
**Miguel Munoz Zuniga (speaker)**  
✉ IFP Énergies Nouvelles, Département de mathématiques appliquées  
1-4 Avenue du Bois Préau, 92852 Rueil-Malmaison, France  
📧 [miguel.munoz-zuniga@ifpen.fr](mailto:miguel.munoz-zuniga@ifpen.fr)

## Annexe 2 : Slides de la présentation de A. Marrel (DER/SESI)



agence nationale de la recherche

PROGRESS MEETING - CATHSBI ACTION



### ICSCREAM\* METHODOLOGY

\*Identification of penalizing Configurations using SCREening And Metamodel

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

**Amandine MARREL (CEA DES/IRESNE/DER)**  
**Bertrand IOOSS (EDF R&D)**  
**Vincent CHABRIDON (EDF R&D)**

SIAM UQ 2022 IRESNE | DER | SESI | LEMS

Institut de recherche sur les systèmes nucléaires pour la production d'énergie bas carbone

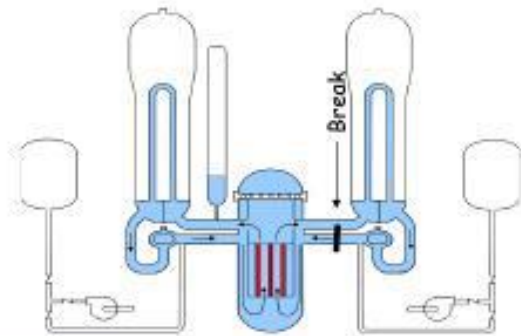
Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives - [www.cea.fr](http://www.cea.fr)



### Simulation of IB-LOCA nuclear accident

**Accidental scenario on pressurized water reactor: IB-LOCA**  
**LOSS** of primary **Coolant Accident** due to a **Intermediate Break** in cold leg

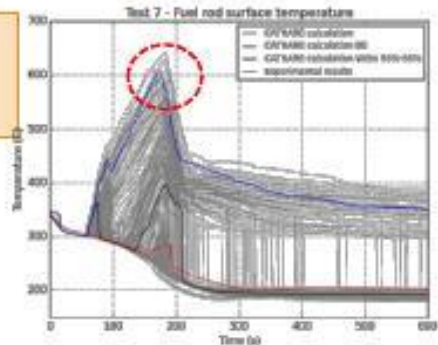
**d (~ 100) input random variables:**  
 Critical flowrates, initial/boundary conditions, phys. eq. coef., ...




**Modelled with CATHARE2 code:**

- Models complex thermal-hydraulic phenomena
- **Large CPU cost for one code run (> 1 hour)**

**Variable of Interest:**  
 2<sup>nd</sup> peak of cladding temperature (PCT)  
 = scalar output



 Objective in IB-LOCA safety study



- In IB-LOCA modeling framework, uncertain input parameters are:
  - ▶ (Type 1) Initial conditions, physical model parameters ⇒ Probabilistic ( $U, LU, N, LN$ )
  - ▶ (Type 2) **Scenario parameters (min / max bounds)** ⇒ **No probabilistic**

**Objective in support of safety studies**  
 Identify the most **penalizing configurations** for **Type 2** inputs,  
 under the uncertainties of **type 1** inputs.  
**Penalizing configurations** ⇔ leading to **high PCT values**

IB-LOCA: *Intermediate Break LOSS of Coolant Accident*

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Document préparé par CEA – Réproduction et diffusion autorisées au CEA sousses à l'autorisation de l'auteur IRESNE / DER / SESI / LEMS

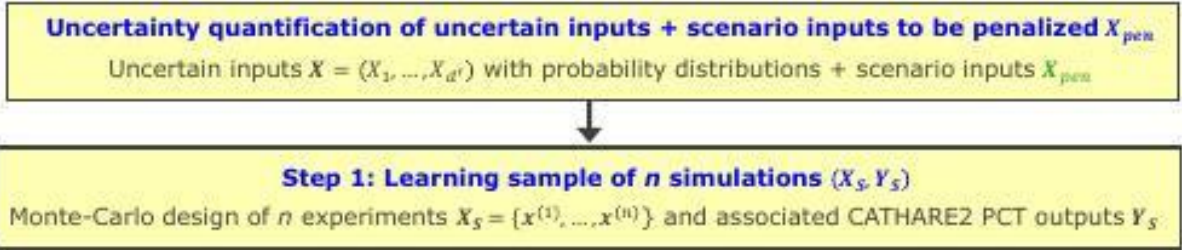
 Objective in IB-LOCA safety study 3

Problems & constraints

- **Very large number of inputs (~100)**, but **effective** dimension might be lower
  - Each CATHARE simulation ~ 1 hour ⇒ around 1000 simulations available
  - Phenomena involved are complex **with strong non-linearities**
  - Black-box model: intrusive methods not possible
- ⇒ **Monte Carlo sampling + advanced statistical tools for data analysis**
- ✓ Screening and sensitivity analysis
  - ✓ Approximation with metamodel
  - ✓ Uncertainty propagation
- ⇒ **Adapted to VERY HIGH DIMENSIONAL test case (~100 uncertain inputs)**

⇒ ICSCREAM\* methodology in 4 Main Steps  
*\*Identification of penalizing Configurations using SCREening And Metamodel*

 **STEP 1: Monte Carlo Sampling design**

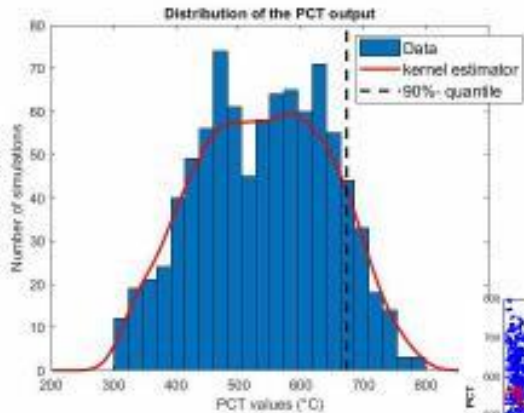


Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
 Document préparé au CEA – Réproduction et diffusion autorisées au CEA sous réserve de l'attribution de l'auteur IRESNE / DER / SESI / LEMS

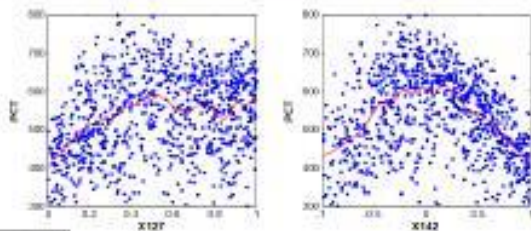
 **STEP 1: Monte Carlo Sampling design**  
*Illustration on the IB-LOCA test case*

- ▶  **$d = 96$  uncertain variables** with associated probability distributions (almost indep.)
- ▶  **$n = 889$  CATHARE2 simulations** : Monte-Carlo sample with inputs drawn following their assumed probability distributions

Empirical quantile 90%:  **$q_{0.9} \approx 673.18^\circ\text{C}$**   
**Critical configurations** are defined as:  **$\text{PCT} > q_{0.9}$**




Scatter plots with 1-D local polynomials for trends



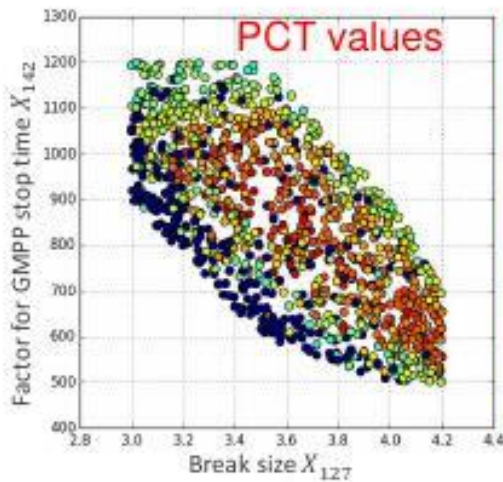
Complex relationships of **PCT** w.r.t. inputs

**Metamodeling of PCT** according to such a large number of inputs is a hard task

 **STEP 1: Monte Carlo Sampling design**  
*Illustration on the IB-LOCA test case*

**Among 96 inputs, 2 scenario inputs to be penalized (here dependent):**

- ▶  $X_{127}$  (break size): uniform distribution on [3, 4.2] inches
- ▶  $X_{142}$  (factor for GMPP stop time): uniform random variable whose range of variation depends on the value of  $X_{127}$

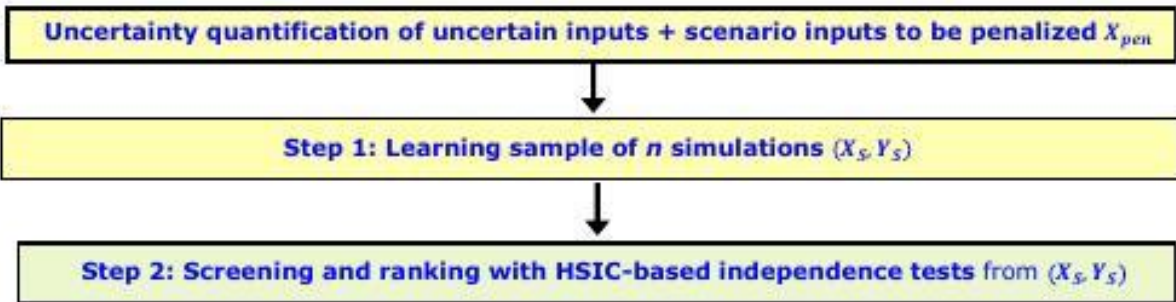



▶ **Objective:**  
 Precisely capture **critical configurations of  $(X_{127}, X_{142})$**  which lead to the **highest probability of PCT exceeding  $q_{0.9}$  ( $\approx 673.18$  °C)**

$$X_{pen} = \{X_{127}, X_{142}\} \subset X$$

GMPP : group of primary pumps

 **STEP 2: Screening & ranking of inputs**



 **STEP 2: Screening & ranking of inputs**

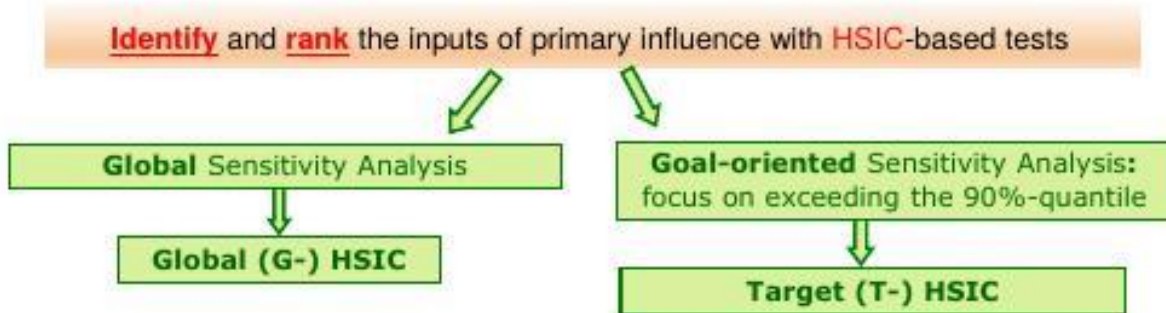
- **Main aims of Sensitivity Analysis (SA):** Understand the behavior of the model output w.r.t. inputs, quantify how the variability of the input parameters influences the output
- **For Screening purpose:** Separate the inputs into influential and non-influential
  - ⇒ Reduction of the model
    - Here: build a simplified model, referred to as metamodel
- **For Ranking purpose:**
  - Ranking the inputs by influence degree
    - Use in the building process of the metamodel (sequential building process)

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Document préparé par CEA – Réproduction et diffusion autorisées au CEA soumise à l'autorisation de l'auteur IRESNE / DER / SESI / LEMS  
Méthode de recherche sur les systèmes nucléaires pour la production d'énergie bas carbone

 **STEP 2: Screening & ranking of inputs**

**Hilbert-Schmidt Independence Criterion (HSIC)** compares the joint distribution between  $Y$  and  $X_i$  and the product of marginals of  $Y$  and  $X_i$

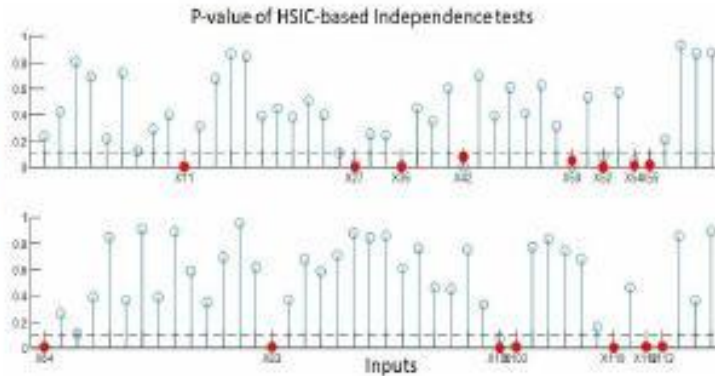
- ⇒ **“Generalized cross-covariance”** based on embeddings of probability distributions in **Reproducing Kernel Hilbert Space**
- ⇒ High-dimensional method for global sensitivity analysis (GSA)
- ⇒ Computation from **a unique random sample**, of reasonable size (in practice few hundreds)
- ⇒ HSIC-based **statistical independence tests for a more robust screening**



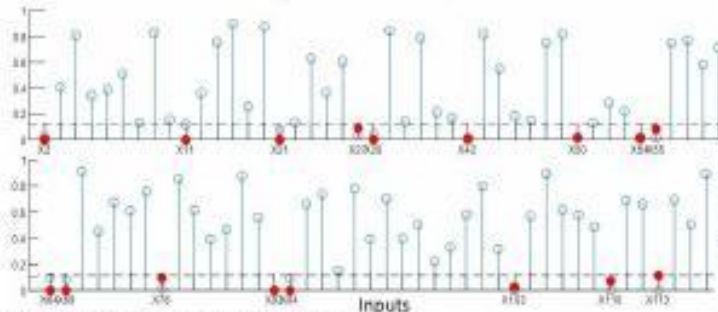
**STEP 2: Screening & ranking of inputs**  
*Illustration on the IB-LOCA test case*

**Global-HSIC tests**

~ 18 influential inputs in GSA  
**Influence ++ : X142 (GMPP time)**  
**Influence + : X127 (break size)**  
**Influence : X113, X110, X11**  
 Lower influence : X50, X42, X112, X83, X64, X125, X55, X103, X36, X27, X54, X102, X52



**P-value of Target-HSIC-based Independence tests**



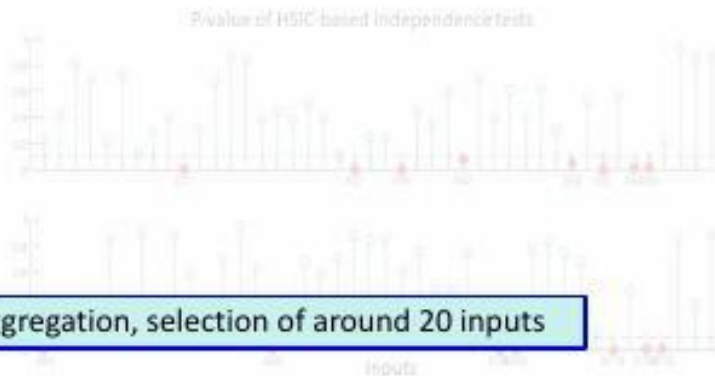
**T-HSIC** ⇔ Impact on exceeding the 90%-quantile  $\hat{q}_{0.9}(Y)$

~ 19 influential inputs in TSA  
**Influence ++ : X142 (GMPP time)**  
**Influence + : X113, X110, X127, X125, X83**  
 Lower influence : X42, X103, X76, X50, X55, X54, X2, X27, X28, X21, X84, X64, X11

**STEP 2: Screening & ranking of inputs**  
*Illustration on the IB-LOCA test case*

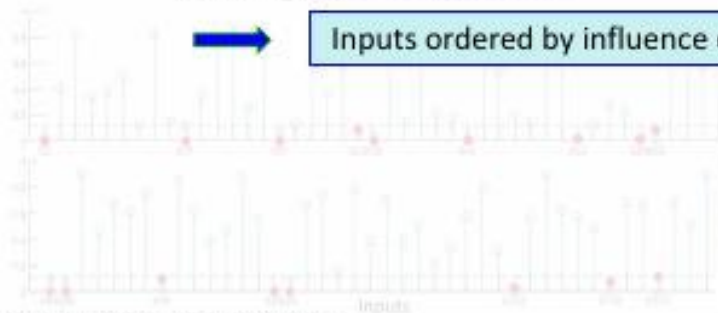
**Global-HSIC tests**

~ 18 influential inputs in GSA  
**Influence ++ : X142**  
**Influence + : X127**  
**Influence : X113, X110, X11**  
 Lower influence : X50, X42, X112, X83, X64, X125, X55, X103, X36, X27, X54, X102, X52




➔ From aggregation, selection of around 20 inputs

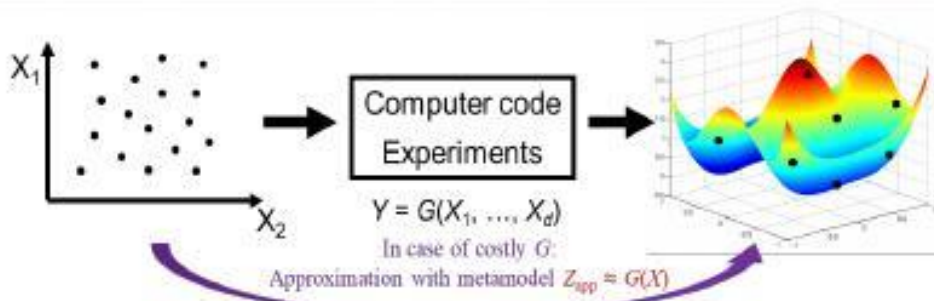
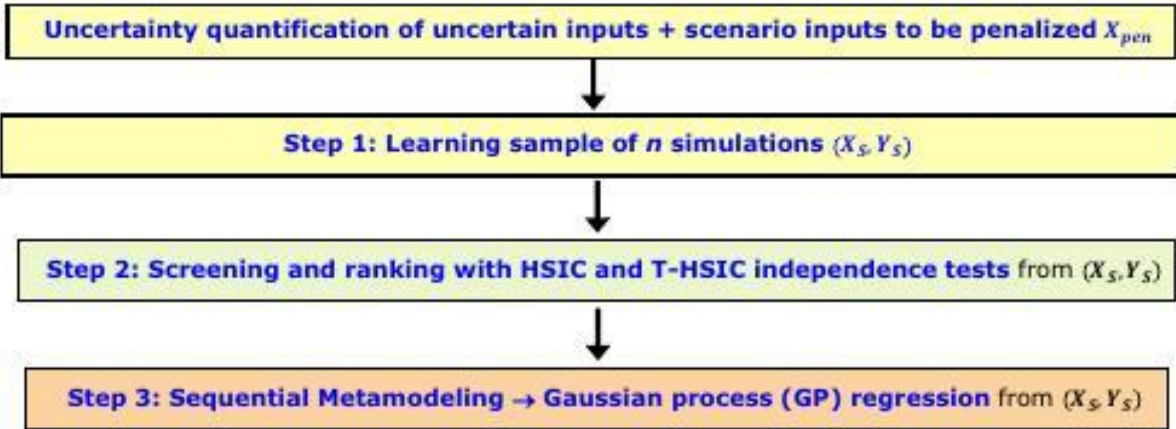
**P-value of Target-HSIC-based Independence tests**



➔ Inputs ordered by influence  $d^0$ , using  $P$ -values

~ 19 influential inputs in TSA  
**Influence ++ : X142**  
**Influence + : X113, X110, X127, X125, X83**  
 Lower influence : X42, X103, X76, X50, X55, X54, X2, X27, X28, X21, X84, X64, X11

 **STEP 3: Approximation with a GP Metamodel**



 **STEP 3: Approximation with a GP Metamodel**  
*For details on GP, See Rasmussen & Williams [2005], Gramacy [2021]*

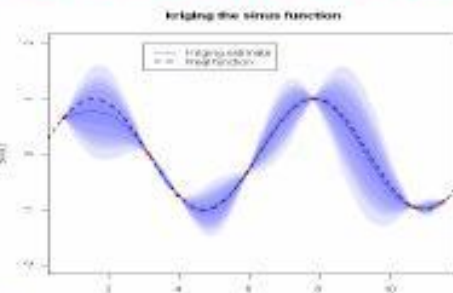
**Goal: replace code by a mathematical function called metamodel**

**Choice: Gaussian process (GP) metamodel**

see Rasmussen & Williams [2005]

Part of Supervised Machine Learning


**Advantage:** gives a prediction with an associated error bound (Gaussian distribution at each point)



→ **Challenge to be addressed here: how to build the GP in large dimension (d~100) ?**

→ **Use the information of screening and ranking from HSIC**  
 ⇒ **Sequential estimation of GP hyperparameters**



 **STEP 3: Approximation with a GP Metamodel**

⇒ Use of Step 2 results (HSIC-based ranking and screening)

**Inputs in GP covariance:**

- ✓ Main influential inputs in a tensorized anisotropic covariance
- ✓ Inputs of 2<sup>ndary</sup> influence in an isotropic covariance (coarser way)
- ✓ Non-significant influential inputs ⇒ effect only captured by an additional variance (nugget effect)

**Likelihood-based “forward” estimation of GP hyperparameters:**

- ✓ Robust Sequential building: successive inclusion of ordered influential inputs

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Document préparé par CEA – Réproduction et diffusion autorisées au CEA soumise à l'autorisation de l'émetteur IRESNE | DER | SESI | LEMS

 **STEP 3: Approximation with a GP Metamodel** 15

⇒ Use of Step 2 results (HSIC-based ranking and screening)

**Inputs in GP covariance:**

- ✓ Main influential inputs in a tensorized anisotropic covariance
- ✓ Inputs of 2<sup>ndary</sup> influence in an isotropic covariance (coarser way)
- ✓ Non-significant influential inputs ⇒ effect only captured by an additional variance (nugget effect)

**Likelihood-based “forward” estimation of GP hyperparameters:**


- ✓ Robust Sequential building: successive inclusion of ordered influential inputs

**Assessment of the accuracy of GP metamodel**

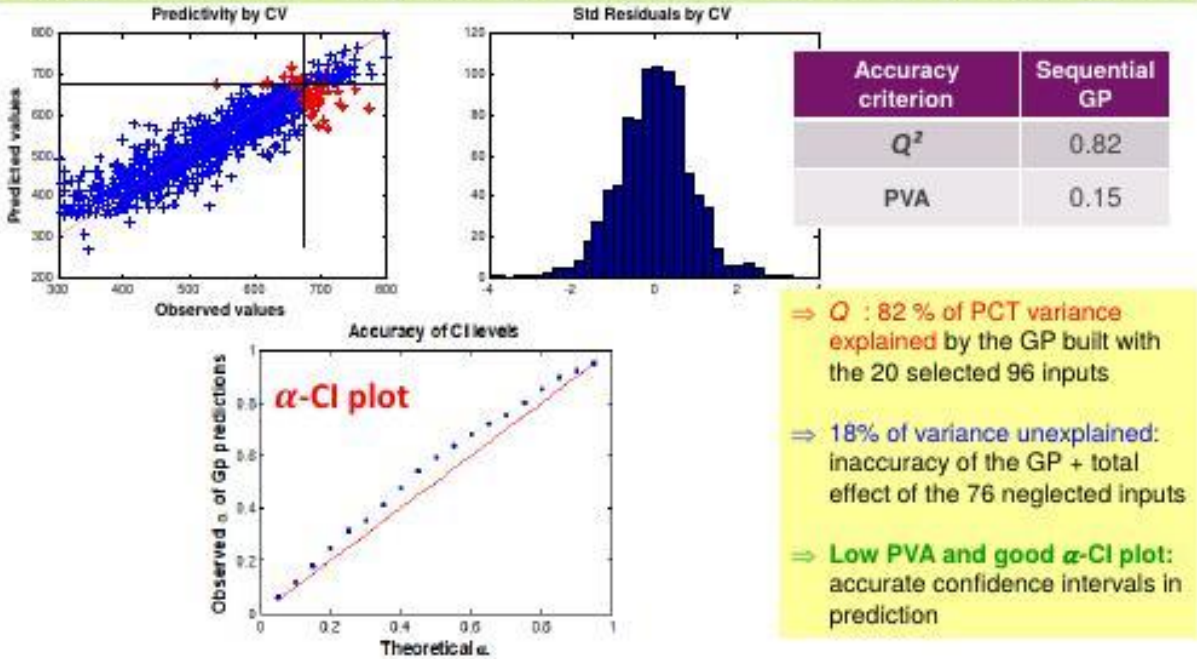
- **Quality of GP predictor**  $\hat{Y}_{GP}$ : predictivity coefficient  $Q^2$ , analysis of residuals
- **Quality of GP prediction variance and intervals**: Predictive Variance adequacy (PVA) coefficient,  $\alpha$ - $\alpha$  plot

⇒ In practice: Estimation by **Cross Validation**

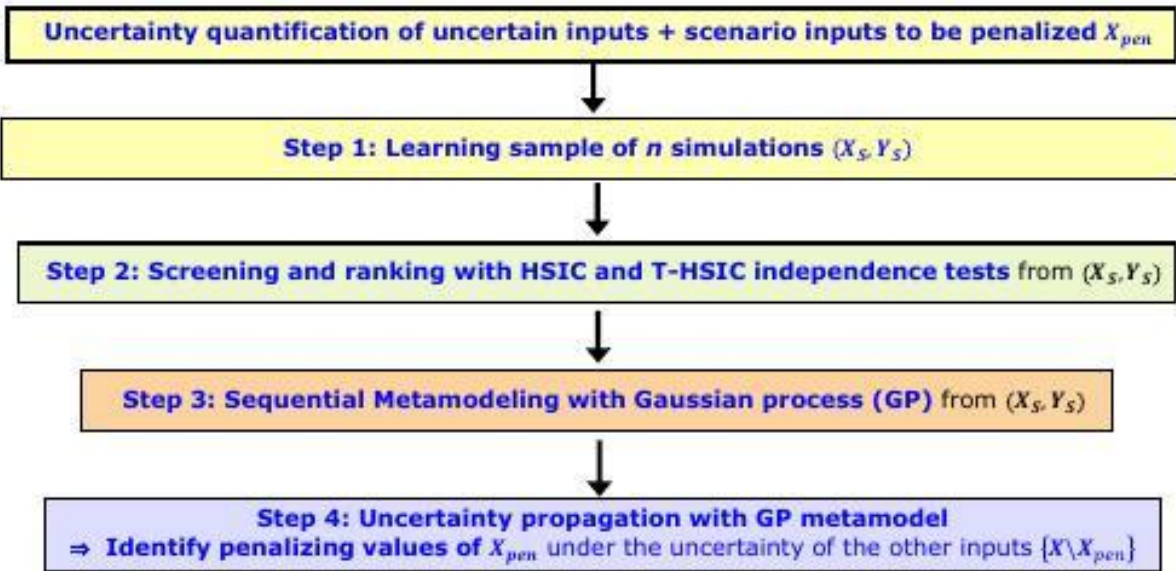
*Full description of GP validation criteria in Demay et al. [2021]*

 **STEP 3: Approximation with a GP Metamodel**  
Illustration on the test case

**Assessment of accuracy and predictivity of final GP metamodel built on  $N = 889$  simulations**



 **STEP 4: Uncertainty propagation with the GP**



## STEP 4: Uncertainty propagation with the GP

**Step 4: Uncertainty propagation with GP metamodel to identify the penalizing values of  $X_{pen}$  under the uncertainty of the other inputs  $\{X \setminus X_{pen}\}$** 

⇒ Precisely capture critical configurations of  $X_{pen} = \{X_{127}, X_{143}\}$  which lead to the highest probability of  $PCT > \hat{q}_{0.9}(Y)$  (under randomness of the other variables)

$$\begin{aligned}
 \hat{P}(X_{pen}) &= P[Y_{GP}(X_{exp}) > \hat{q}_{0.9} | X_{pen}] \\
 &= 1 - E\{1_{Y_{GP}(X_{exp}) \leq \hat{q}_{0.9}} | X_{pen}\} \\
 &= 1 - E\{1_{Y_{GP}(\bar{X}_{exp}, X_{pen}) \leq \hat{q}_{0.9}} | X_{pen}\} \\
 &= 1 - E\{E\{1_{Y_{GP}(\bar{X}_{exp}, X_{pen}) \leq \hat{q}_{0.9}} | \bar{X}_{exp}\} | X_{pen}\} \\
 &= 1 - \int_{\mathcal{X}_{exp}} \Phi\left(\frac{\hat{q}_{0.9} - \hat{Y}_{GP}(\bar{X}_{exp}, X_{pen})}{\sqrt{MSE[\hat{Y}_{GP}(\bar{X}_{exp}, X_{pen})]}}\right) dP_{\bar{X}_{exp}}(\bar{X}_{exp})
 \end{aligned}$$

$X_{exp}$ : explanatory inputs of the GP  
 $\bar{X}_{exp} = X_{exp} \setminus X_{pen}$

$\bar{X}_{exp}$  and  $X_{pen}$  are independent (necessary condition)

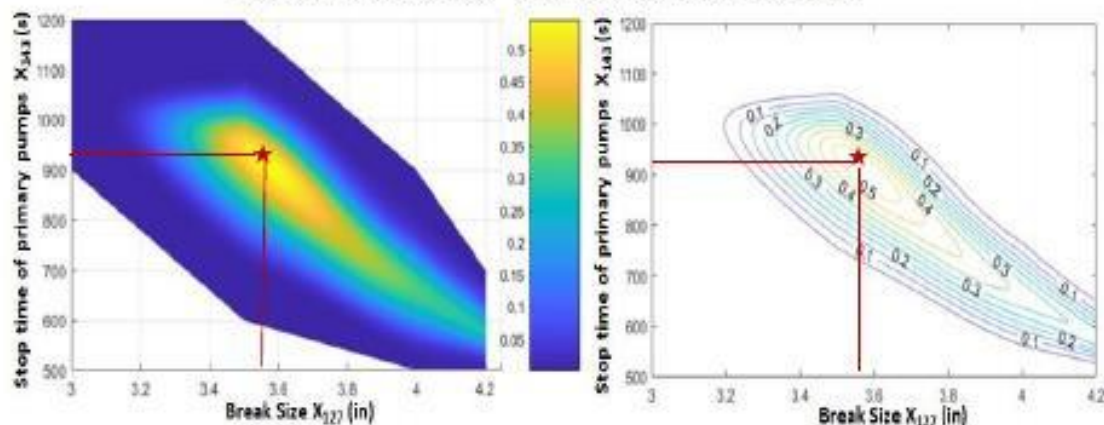
$\Phi$ : CDF of standard Gaussian distribution

Variation domain of  $\bar{X}_{exp}$       Joint distribution of  $\bar{X}_{exp}$

- In practice, for each value of  $X_{pen} = \{X_{127}, X_{143}\}$ ,  $\hat{P}(X_{pen})$  is estimated by intensive Monte-Carlo computation (here integral in dimension 18 in the use-case)


**STEP 4: Uncertainty propagation with the GP**  
**Illustration on the test case**
**Computation of  $\hat{P}(X_{pen})$** 

Probability of exceeding  $\hat{q}_{0.9} = 673.18^\circ\text{C}$ , according to  $X_{127}$  and  $X_{143}$



- ▶ Strong interaction between the two scenario parameters
- ▶ Worst case: (3.57 inches, 907.8 seconds)  $\Rightarrow \hat{P} \approx 0.55$
- ▶ Physical explanation: these two parameters drive the degradation of the water inventory
  - The smaller  $X_{127}$ , the longer the pump will have to run for the same inventory degradation
  - If  $X_{127} < 3.3 \Rightarrow$  the water inventory does not degrade too much (whatever GMPP)
  - If  $X_{127} > 3.9 \Rightarrow$  break tends to be prevailing and reduces the impact of stop time of GMPP

 **Conclusion and prospects**

- **Innovative Best-Estimate-Plus-Uncertainty approach for Industrial application with a large number of uncertain inputs**
  - ⇒ **Several advanced statistical tools efficiently combined**
  - ⇒ **Operational methodology able to deal with real complex cases with large number of inputs**
- **Global methodology based on ONE single Monte Carlo inputs-output sample:**
  - ⇒ Screening + global & target sensitivity analysis + Metamodel + Uncertainty propagation
- **Identification of penalizing configurations** with conditional probabilities estimated by GP-metamodel
- Other applications on IB-LOCA datasets with 10 inputs to be penalized (*See Marrel et al. [2021]*). Industrialization in EDF Uncertainty platform OPENTurns
- Planned improvements in the framework of the ANR  Project

Simulation Analytics and Metamodel-based solutions for Optimization, Uncertainty and Reliability Analysis 

 **Some References**

- F. Bachoc, Cross Validation and Maximum Likelihood estimations of hyper-parameters of Gaussian processes with model misspecification, *Computational Statistics and Data Analysis*, 2013.
- S. Da Veiga, Global sensitivity analysis with dependence measures, *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 85:1283-1305, 2015.
- M. De Loos and A. Marrel, New improvements in the use of dependence measures for sensitivity analysis and screening, *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 86:3038-3058, 2016.
- C. Demay, B. Iooss and L. Le Gratiet, A. Marrel. Model selection for Gaussian Process regression: applications on the characterization of chemical segregation, *Quality and Reliability Engineering International*, 2021.
- R. El Amri and A. Marrel. HSIC-based independence tests with optimal sequential permutations: application for sensitivity analysis of numerical simulators, *Quality and Reliability Engineering International*, 2021.
- B. Gramacy. Gaussian Process Modeling, Design, and Optimization for the Applied Sciences. Chapman and Hall/CRC, 2021.
- B. Iooss B., and P. Lemaître. A review on global sensitivity analysis methods. In *Uncertainty management in Simulation-Optimization of Complex Systems: Algorithms and Applications*, Springer, 2015.
- B. Iooss and A. Marrel, Advanced methodology for uncertainty propagation in computer experiments with large number of inputs, *Journal of Nuclear Technology*, 205:1588-1606, 2019.
- Gretton, Bousquet, Smola and Schölkopf. Measuring statistical dependence with Hilbert-Schmidt norms. In: *Proceedings Algorithmic Learning Theory*, 2015.
- **A. Marrel, B. Iooss and V. Chabridon, Statistical identification of penalizing configurations in high-dimensional thermalhydraulic numerical experiments: The ICSCREAM methodology, Nuclear Science & Engineering, 2021.**
- A. Marrel and V. Chabridon. Statistical developments for target and conditional sensitivity analysis: application on safety studies for nuclear reactor, *Reliability Engineering and System Safety* (214), 2021.
- P. Mazgaj, J-L. Vacher and S. Carnaveli. Comparison of CATHARE results with the experimental results of cold leg intermediate break LOCA obtained during ROSA-2/LSTF test 7, *EPJN*, 2, 2016.
- C.E. Rasmussen and C.K.I. Williams. Gaussian processes for machine learning. MIT Press, 2006.