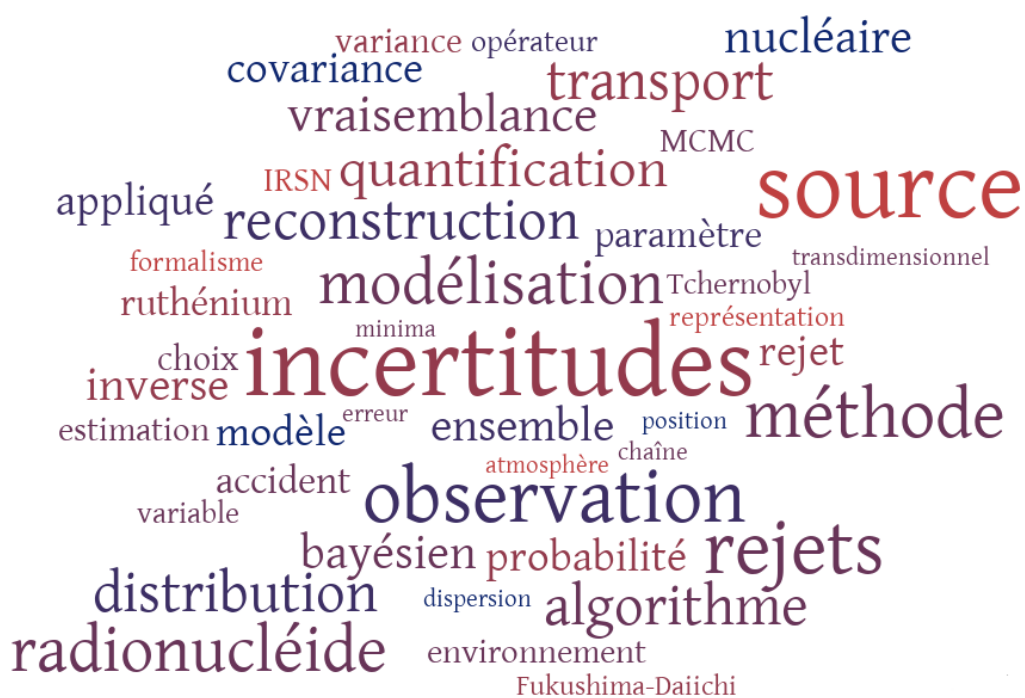


Inférence bayésienne et quantification d'incertitudes pour l'estimation de sources de rejets de radionucléides

Joffrey Dumont Le Brazidec



École doctorale Sciences, Ingénierie et Environnement

Inférence bayésienne et quantification d'incertitudes pour l'estimation de sources de rejets de radionucléides

Joffrey Dumont Le Brazidec

Thèse de doctorat, spécialité : Sciences et Techniques de l'Environnement

Jury composé de

Dr Sophie Ricci	CERFACS	<i>Rapporteure</i>
Pr Lionel Soulhac	LMFA	<i>Rapporteur</i>
Pr Paola Cinnella	Sorbonne université	<i>Examinatrice</i>
Dr Anne Mathieu	IRSN	<i>Examinatrice</i>
Dr Didier Lucor	LIMSI-CNRS	<i>Examineur</i>
Pr Marc Bocquet	ENPC	<i>Directeur de thèse</i>
Dr Olivier Saunier	IRSN	<i>Encadrant de thèse</i>
Dr Yann Richet	IRSN	<i>Invité</i>
Dr Yelva Roustan	ENPC	<i>Invité (co-encadrant de thèse)</i>

Table des matières

Remerciements	7
Conventions et abréviations	9
Développement des algorithmes	11
Introduction	13
1 Modélisation de la dispersion atmosphérique	17
1.1 Processus physiques	18
1.1.1 Structure de l’atmosphère	18
1.1.2 Couches et phénomènes atmosphériques	20
1.1.3 Transport et processus	22
1.2 Modèle numérique	25
1.3 Equation de transport	27
1.3.1 Formulation moyennée	28
1.3.2 Choix de modélisation des processus	29
1.4 Opérateurs d’observation	31
1.4.1 Définitions	31
1.4.2 Construction de l’opérateur d’observation	31
2 Problème inverse	37
2.1 De l’évaluation d’une source à la modélisation inverse	39
2.1.1 Approches ascendantes et descendantes	39
2.1.2 Cadre de la reconstruction d’une source de radionucléides	39
2.2 Modélisation inverse déterministe du terme source	42
2.2.1 Principes	42
2.2.2 Méthodes paramétriques et non-paramétriques	43
2.2.3 Équation d’observation	44
2.2.4 Formulation variationnelle par les moindres carrés	45
2.2.5 Terme de régularisation	46
2.2.6 L’estimateur BLUE	47
2.2.7 Modélisation et estimation des incertitudes	48

3	Bayes et le problème inverse	51
3.1	Philosophie bayésienne	51
3.1.1	Intepretation bayésienne des probabilités	52
3.1.2	Formule de Bayes	52
3.1.3	Possibilité d'un formalisme	53
3.1.4	Priors et information	54
3.1.5	Méthodes bayésiennes en estimation de terme source	55
3.2	Description probabiliste du problème	56
3.2.1	Définition des premières variables d'intérêt	57
3.2.2	Définition de la vraisemblance	58
3.2.3	Définitions des priors	61
3.2.4	Équivalences entre formulations variationnelles et bayésiennes	66
3.3	Méthodes de Monte-Carlo par Chaînes de Markov	70
3.3.1	L'algorithme Metropolis-Hastings	70
3.3.2	Définition des probabilités de transition	72
3.4	Application à l'évènement de détection de ruthénium 106 en Europe en 2017	76
3.4.1	Description du rejet de ^{106}Ru d'origine inconnue	76
3.4.2	Résultats	81
4	Méthodes d'accélération de l'échantillonnage	83
4.1	Le parallel tempering	84
4.1.1	Etat de l'art sur l'accélération de la convergence des MCMC	84
4.1.2	L'algorithme du parallel tempering	85
4.1.3	Application au cas ^{106}Ru	95
4.2	Descente de Stein à gradient variable	103
4.2.1	Description de la méthode	103
4.2.2	Dérivation du noyau et du gradient du logarithme de la distribution a posteriori	105
4.2.3	Application à l'accident du ^{106}Ru	110
5	Méthodes de quantification des incertitudes	117
5.1	Fonction de vraisemblance	121
5.1.1	Choix de la fonction de vraisemblance	121
5.1.2	Incertitudes dans le choix de la vraisemblance	122
5.1.3	Propositions de distributions de probabilité adaptées	123
5.2	Modélisation de la matrice de covariance	130
5.2.1	Limitations de la modélisation de R	130
5.2.2	Proposition d'une méthode de tri en fonction de la pertinence	132
5.2.3	Tri général des observations	142
5.2.4	Classification spatiale des observations	143

5.3	Méthodes d'ensemble	144
5.3.1	Création de l'ensemble d'opérateurs d'observation	145
5.3.2	Évaluation de la qualité d'un ensemble	147
5.4	Application au cas du ^{106}Ru	152
5.4.1	Paramétrisation	152
5.4.2	Application des méthodes	157
5.5	Application au cas des feux de Tchernobyl en avril 2020	172
5.5.1	Description	172
5.5.2	Application des méthodes	176
6	Échantillonnage dans le cas de rejets massifs et complexes	181
6.1	Échantillonnage transdimensionnel	183
6.1.1	Sélection de modèles	183
6.1.2	Algorithme du Reversible-Jump MCMC	187
6.1.3	Représentation transdimensionnelle de la fonction de rejet	190
6.1.4	La question des priors	196
6.1.5	Prior sur les logarithmes des débits de rejet	197
6.1.6	Prior sur la partition de frontières	201
6.1.7	Description de la probabilité de transition	205
6.1.8	Symétrisation des probabilités de transition dans le taux d'acceptation	207
6.1.9	Calcul du jacobien	207
6.1.10	Résumé des taux d'acceptation	209
6.2	Mélange de mesures	211
6.3	Reconstruction du terme source de ^{137}Cs rejeté lors de l'accident de Fukushima-Daiichi	213
6.3.1	Description du rejet de ^{137}Cs de l'accident de Fukushima-Daiichi	213
6.3.2	Paramétrisation	217
6.3.3	Application des méthodes	220
	Conclusions et perspectives	233
	Bibliographie	239

Remerciements

En premier lieu, je tiens à remercier sincèrement Sophie Ricci et Lionel Soulhac pour avoir pris le temps de relire ce manuscrit, et pour leurs retours et conseils. Je tiens également à remercier Paola Cinnella pour avoir accepté de présider le jury, et Anne Mathieu, Didier Lucor et Yann Richet pour leur participation à la fois au jury et aux deux comités de thèse où ils auront pu commenter et aiguiller l'évolution de mes travaux. Plus généralement, un grand merci à l'ensemble du jury pour leurs nombreuses questions pertinentes et remarques constructives.

Évidemment merci, Olivier et Marc, de vous être toujours montrés très encourageants et accessibles tout au long de cette thèse. J'ai grâce à vous progressé autant scientifiquement, qu'à d'autres niveaux, plus techniques, comme des manières de travailler (les fameux 95 → 99%), réfléchir, et penser un sujet. En particulier, merci à toi Marc d'avoir su par ton exigence me canaliser en m'obligeant à aller au bout de mes idées ; et à toi, Olivier, de m'avoir montré par l'exemple comment formaliser rigoureusement et simplement des sujets complexes.

Merci aussi à mon co-encadrant Yelva qui m'aura guidé trois ans durant dans les méandres de Polyphemus, et aura passé un nombre non négligeable d'heures à m'expliquer (une partie seulement !) de tout ce qu'il faut savoir sur le transport atmosphérique. Et merci à mon collègue de bureau Alban pour le temps qu'il a consacré à m'aider, principalement sur des sujets de programmation et d'efficacité, et qui m'aura tracé un chemin à suivre par sa rigueur.

Je souhaiterais adresser des remerciements à tous mes collègues, avec qui j'ai été très heureux de partager ces trois années. En particulier, à l'IRSN, je souhaiterais remercier Damien dont j'ai pu profiter des nombreux conseils, idées, ou encouragements ; Thierry et Raphaël mon collègue de bureau avec qui j'ai pris beaucoup de plaisir à discuter, aussi bien physique et changement climatique, qu'énigmes et bien d'autres choses ; Irène, Denis, et Arnaud pour leurs nombreux conseils d'expérience toujours judicieux (et Denis pour m'avoir guidé lors de ma première conférence !). Plus généralement, un grand merci à tous les membres du BMCA : Bao, Emilie, Maryline, Jérôme, Stéphanie, Ben, Vanessa, Emmanuel, Alicia et du SESUC plus généralement. Au CEREAA, je souhaiterais adresser des remerciements à Youngsoeb dont la présence permet de réduire drastiquement le temps de résolution de mes problèmes techniques et tous mes collègues du laboratoire que je suis très heureux d'avoir fréquenté et de fréquenter ces deux prochaines années : Lya, Cédric, Camille, Léa, Palmira, Cécile, Oscar, Thibaut, Alexis, Quentin, Victor, Mouhamet, Pierre,

Yunyi, Clémentine, Aurélie, Martin, Bertrand, Constantin, Pietro, Véronique, Karine, Zhizhao, et Lydie.

Pour finir, je souhaite remercier ma famille et mes amis, et spécialement ceux qui se sont portés volontaires pour participer à la lourde tâche de relecture du manuscrit ! Un énorme merci, donc, pour toutes ces heures passées à relire des pans de ma thèse à maman, Gaëlle, papa, Chloé et Lucas, Robin, Solenn et Emmanuella, et Alexandre. Merci aussi à Jacques de m'avoir donné la chance de m'exprimer à travers le stage dans lequel j'ai pu découvrir que j'aimais la recherche, et à Anna, en particulier pour m'avoir encouragé il y a maintenant quatre ans à m'engager dans cette thèse. Enfin, un immense merci à tous ceux qui ont pu assister à la soutenance et m'encourager depuis leurs écrans, ça m'a fait très plaisir, et à ceux que je n'ai pas cités mais qui m'ont accompagné pendant ces trois ans !

Conventions et abréviations

Variables, paramètres et données

\mathbf{x}	Vecteur des variables liées à la source
x_1	Longitude de la source
x_2	Latitude de la source
\mathbf{q}	Vecteur représentant le terme source (évolution temporelle du rejet) continu ; vecteur des débits de rejets
N_{imp}	Nombre d'impulsions, nombre de débits de rejets, ou taille du vecteur \mathbf{q}
\mathbf{R}	Matrice de covariance d'erreur d'observation
r	Terme diagonal (principal) de \mathbf{R}
\mathbf{B}	Matrice de covariance d'erreur du prior sur le vecteur des débits de rejets ; matrice de covariance d'erreur d'ébauche
b	Terme diagonal (principal) de \mathbf{B}
\mathbf{y}	Vecteur d'observations
N_{obs}	Nombre d'observations, ou taille du vecteur d'observations
N_{sta}	Nombre de stations où les observations sont définies
\mathbf{H}	Opérateur d'observation
\mathbf{H}_{x_1, x_2}	Opérateur d'observation pour une source de coordonnées (x_1, x_2)
N_e	Taille de l'ensemble amélioré d'opérateurs d'observation
\mathbf{y}_S	Vecteur de prédictions correspondant aux observations
$N_{\text{imp}, m}$	Nombre d'impulsions minimales
$N_{b, \text{max}}$	Nombre maximum de frontières intérieures
Λ	Partition de frontières

Conventions stylistiques

Objet	Style	Exemple
Scalaire	italique	u
Vecteur	caractères gras, minuscules	\mathbf{x}
Matrice	caractères gras, majuscules	\mathbf{H}

Acronymes

CLA	Couche Limite Atmosphérique
QI	Quantification d'Incertitudes
ETS	Estimation du Terme Source
MAP	Maximum A Posteriori
pdf	Probability Density Function
MCMC	Méthodes de Monte Carlo par Chaînes de Markov
MH	Metropolis-Hastings
PT	Parallel Tempering
BIC	Bayesian Information Criterion
AIC	Akaike Information Criterion
TRRA	Total Retrieved Released Activity
^{106}Ru	Ruthénium 106
^{137}Cs	Césium 137
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
CEREA	Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique
UNSCEAR	United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
CEPMET	Centre Européen pour les Prévisions Météorologiques à Moyen Terme

Développement des algorithmes

Les algorithmes décrits dans cette thèse ont été initialement codés en langage python et parallélisés à l'aide de l'outil OpenMP. L'augmentation du nombre de variables à échantillonner nous a amené, à partir du chapitre 4, à développer tous les algorithmes en langage c++ orienté objet afin d'améliorer les performances. Les opérations ont été parallélisées quand cela était possible. La librairie Eigen a été utilisée pour gérer toutes les opérations linéaires et la librairie TPPDAConfiguration pour gérer les fichiers de configurations.

Toutes les méthodes MCMC et de quantification d'incertitudes décrites dans cette thèse sont rassemblées dans un programme principal. Celui-ci comprend en particulier :

- l'algorithme du parallel tempering qui intègre l'algorithme de Metropolis-Hastings ;
- la prise en compte de plusieurs opérateurs d'observation ;
- l'algorithme de tri des observations selon le critère de pertinence ;
- l'algorithme du Reversible-Jump MCMC.

En revanche, l'algorithme de descente de Stein par gradient variable a été développé dans un programme séparé.

Les performances en temps de calcul sont décrites à chaque application. Sommairement, le temps de calcul d'un échantillonnage unidimensionnel avec un algorithme de parallel tempering et pour un seul opérateur d'observation déterministe est d'environ dix minutes sur une machine de calcul de douze coeurs.

Deux méthodes développées dans cette thèse sont coûteuses dans leur application en temps de calcul :

- l'échantillonnage transdimensionnel à l'aide du Reversible-Jump MCMC qui comprend à chaque itération de l'algorithme le calcul de plusieurs vecteurs de taille N_{obs} par une série d'opérations linéaires ;
- l'utilisation combinée à chaque itération de plusieurs opérateurs d'observation dans le cadre des méthodes d'ensemble. Dans un échantillonnage classique avec l'algorithme de Metropolis-Hastings, l'opération la plus importante est le produit matriciel de l'opérateur d'observation de dimensions $N_{\text{obs}} \times N_{\text{imp}}$ avec le vecteur des débits de rejet de taille N_{imp} . Quand l'algorithme du parallel tempering est appliqué, cette

opération doit être effectuée N_T fois. Quand N_e opérateurs d'observation sont pris en compte, le nombre d'opérations à réaliser est encore multiplié par N_e ce qui conduit à d'importants temps de calcul.

Introduction

En cinquante ans, deux accidents nucléaires majeurs, Tchernobyl en 1986, et Fukushima-Daiichi en 2011, sont survenus. Par ailleurs, des événements de rejets mineurs de radionucléides dans l'atmosphère sont fréquemment constatés par les autorités. Dans le futur, nous serons probablement amenés à être confrontés à d'autres pollutions radioactives.

L'industrie nucléaire est une industrie importante en Europe, principalement utilisée pour produire de l'électricité. En 2020, l'énergie nucléaire représente 26 % de la production totale d'électricité dans l'Union européenne et 72 % de la production d'électricité française. Plus précisément, 126 réacteurs nucléaires sont opérationnels dans 15 pays européens dont 56 français, 4 sont en construction et 24 sont planifiés.

La production de l'énergie nucléaire est une des énergies les moins émettrices de dioxyde de carbone et se situe au niveau de l'éolien avec 12 grammes d'équivalent CO₂ pour la production d'un kWh, ce qui en fait un élément clé dans la lutte contre le réchauffement climatique. Dans le rapport SR15 (IPCC 2018), le GIEC (Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat) examine 85 scénarios maintenant un réchauffement sous 1.5°C et fournissant des prédictions sur les variations de nucléaire en 2010 et 2100. Sur ces 85 scénarios, 7 envisagent une baisse du nucléaire mondial entre 2010 et 2100, et donc 92 % des scénarios envisagent une hausse du nucléaire mondial dans le cadre d'un respect des accords de Paris sur le climat.

Autrement dit, l'énergie nucléaire est probablement amenée à se développer dans les futures décennies pour répondre aux accords de réduction des émissions de gaz à effet de serre.

Cependant, la probabilité de survenue d'un accident nucléaire n'est pas nulle. En effet, les accidents de Tchernobyl puis Fukushima-Daiichi ont eu des impacts sanitaires et environnementaux importants. Selon l'UNSCEAR, les rejets de radionucléides pendant l'accident de la centrale nucléaire de Tchernobyl ont entraîné le décès d'au moins cent personnes, et pourraient être responsables de milliers (selon la plupart des estimations) ou dizaines de milliers d'autres (selon les estimations les plus pessimistes). L'accident de la centrale nucléaire de Fukushima-Daiichi suite à un tsunami, bien qu'aucun décès démontré n'ait été enregistré en lien avec les radiations, a provoqué une importante contamination des eaux japonaises et a forcé l'évacuation de plus de cent mille habitants, à l'origine de milliers de décès liés à l'aggravation de maladies préexistantes et au stress résultant du

traumatisme de l'évacuation (Hayakawa 2016 ; Hasegawa et al. 2016).

D'autre part, des rejets mineurs de substances radioactives sont régulièrement détectés par les autorités. En 2017, plusieurs stations européennes de surveillance de la radioactivité dans l'atmosphère détectent du ^{106}Ru ¹. En 2020, les incendies en Ukraine² autour de la zone d'exclusion de Tchernobyl ont mené à la dispersion de ^{137}Cs à l'échelle européenne par remise en suspension depuis les territoires contaminés. Par ailleurs, une élévation des niveaux de radioactivité a été détectée durant le mois de juin en Europe du nord³. Dans la grande majorité des cas, ces rejets n'ont pas d'impact sanitaire ou environnemental.

Ainsi, afin de protéger les populations et l'environnement de futurs rejets de substances radioactives dans l'atmosphère, issus de potentiels accidents, il est nécessaire de pouvoir réagir de manière adaptée. Plus précisément, il est important de pouvoir estimer les rejets de manière suffisamment robuste afin que les évaluations basées sur l'utilisation de modèles de dispersion atmosphérique soient les plus pertinentes possibles. Ces évaluations sont effectuées par les autorités afin de prendre des décisions telles que le maintien de la mise à l'abri des populations ou encore la restriction de consommation et de commercialisation des denrées alimentaires contaminées. L'IRSN s'intéresse en priorité aux rejets pouvant avoir des conséquences en France.

Or, l'évaluation des rejets est très dépendante de la connaissance du terme source, c'est-à-dire la connaissance de l'origine du rejet en termes d'amplitude, de cinétique, et de composition des radionucléides.



Le bayésianisme est une forme d'épistémologie qui prône l'usage de l'inférence bayésienne dans le raisonnement scientifique. Dans un formalisme bayésien, toute forme de connaissance doit être modélisée à l'aide d'un degré de crédibilité, ou probabilité, compris entre 0 et 1.

Ce degré de crédibilité est calculé à partir de l'appréciation d'information, et permet par la suite de construire des a priori ou préjugés : l'état courant de la connaissance. Le degré de crédibilité est ensuite mis à jour au fur et à mesure de l'arrivée de nouvelles informations.

Dans ce formalisme peut être réalisée une quantification des incertitudes. La quantification des incertitudes est la science de la caractérisation quantitative des incertitudes, et s'intéresse à évaluer la probabilité des résultats et des paramètres d'un système quand celui-ci n'est pas entièrement déterminé. La quantification des incertitudes est liée à une épistémologie

1. www.irsn.fr/FR/Actualites_presse/Actualites/Pages/20171109_Detection-Ruthenium-106-en-france-et-en-europe-resultat-des-investigations-de-l-IRSN.aspx

2. www.irsn.fr/FR/Actualites_presse/Actualites/Documents/IRSN_NI-Tchernobyl-Incendie-Zone-d-Exclusion-Ukraine_24042020.pdf

3. www.irsn.fr/FR/Actualites_presse/Actualites/Documents/IRSN_NI-2-Detection-Radioactivite-Europe-Nord_22072020.pdf

probabiliste : les systèmes ne sont jamais entièrement déterminés et devraient toujours être étudiés selon l'angle des probabilités.

Plus précisément, un système peut être étudié à l'aide de distributions de probabilité. Ces distributions de probabilité décrivent certains paramètres d'intérêt du système et sont reconstruites à partir de méthodes d'échantillonnage : un ensemble d'échantillons est produit et suit la loi de probabilité.



En sciences, un problème inverse est une situation dans laquelle on tente de déterminer les causes d'un phénomène à partir des observations expérimentales de ses effets. Dans un problème inverse, les causes sont représentées par un ensemble de paramètres, puis traduites en quantités commensurables aux observations expérimentales. La démarche du problème inverse consiste alors à reconstruire les paramètres qui permettent de rendre compte au mieux des observations.

Cette thèse s'intéresse au développement de méthodes permettant d'améliorer la résolution du problème inverse dans le cas d'un rejet de radionucléides, c'est-à-dire à reconstruire la source d'une émission de substances radioactives dans l'atmosphère. Dans notre cas précis, le problème inverse est construit à partir de l'utilisation conjointe de mesures dans l'environnement de radionucléides et d'un modèle de transport capable de simuler les conséquences sur l'environnement d'une source émettrice donnée de substances radioactives. Plus précisément, le modèle de transport décrit le parcours de polluants émis depuis une source dans l'atmosphère, ce qui permet de formuler des prédictions comparables aux mesures et d'évaluer la pertinence de la source.

Ce problème est soumis à beaucoup d'incertitudes comme celles émanant du modèle de transport, des champs météorologiques utilisés comme données d'entrée du modèle ou des observations.

Ces travaux de thèse s'intéressent donc à poser et résoudre un tel problème inverse dans un formalisme bayésien, c'est-à-dire à reconstruire la source et à quantifier les incertitudes associées. Ils s'intéressent à développer dans ce formalisme des méthodes pour quantifier la distribution de l'origine du rejet, du terme source, de la variance des erreurs associées et d'y intégrer de l'incertitude. Ces méthodes seront appliquées et validées sur des événements de rejet de différentes natures. Néanmoins, l'enjeu de ces travaux se situe dans le développement de méthodes bayésiennes et non dans l'exploitation des résultats de leur application.

Le chapitre 1 décrit le modèle de transport atmosphérique utilisé pour simuler le transport des radionucléides dans cette thèse. Le chapitre 2 est une courte introduction au problème inverse associé, où nous présentons le cadre déterministe et les méthodes classiques.

Dans le chapitre 3, nous introduisons et décrivons le formalisme bayésien appliqué à la modélisation inverse de sources de radionucléides. Une première méthode d'échantillonnage, l'algorithme MCMC de Metropolis-Hastings, est décrite et appliquée sur l'évènement des rejets de ^{106}Ru en Europe à l'automne 2017. Des problèmes liés à des minima locaux restreignant l'échantillonnage nous amènent dans le chapitre 4 à développer d'autres méthodes : l'algorithme du parallel tempering puis la descente de Stein par gradient variable sont adoptés et utilisés sur le cas du ^{106}Ru . Les résultats obtenus avec l'algorithme du parallel tempering ont été publiés dans Dumont Le Brazidec et al. 2020.

L'objet du chapitre 5 est de poser la question de la quantification des incertitudes et d'améliorer la reconstruction des distributions marginales des variables décrivant la source. Plusieurs méthodes sont proposées afin de mieux quantifier les incertitudes liées au choix de la vraisemblance, celles liées à la modélisation de la matrice de covariance de la vraisemblance, ainsi que celles liées à la modélisation de la météorologie et du transport. Leur application sur le cas du ^{106}Ru est décrite dans Dumont Le Brazidec et al. 2021. Enfin, la méthode bayésienne est étendue dans le chapitre 6 aux cas de rejets accidentels majeurs et complexes. Un algorithme approprié à l'échantillonnage de tels rejets est développé et appliqué à la reconstruction des rejets de ^{137}Cs lors de l'accident de Fukushima-Daiichi. Ces résultats feront l'objet d'un article.

1 Modélisation de la dispersion atmosphérique

Sommaire

1.1	Processus physiques	18
1.1.1	Structure de l'atmosphère	18
1.1.2	Couches et phénomènes atmosphériques	20
1.1.3	Transport et processus	22
1.2	Modèle numérique	25
1.3	Equation de transport	27
1.3.1	Formulation moyennée	28
1.3.2	Choix de modélisation des processus	29
1.4	Opérateurs d'observation	31
1.4.1	Définitions	31
1.4.2	Construction de l'opérateur d'observation	31

L'étude de la dispersion atmosphérique des polluants par modélisation, qui repose sur le principe que l'on peut représenter leur parcours dans l'atmosphère sur la base de la théorie de la mécanique des fluides, débute véritablement au cours des années 1950 (Hanna 2010). Des expériences de terrain, principalement dans des contextes militaires, sont menées dans l'objectif de mieux comprendre la dispersion des rejets chimiques, biologiques, puis nucléaires.

À la fin des années 1960, du fait de l'apparition de normes de qualité de l'air, et de la création d'agences environnementales, le sujet de la protection de l'environnement devient une préoccupation majeure. Des expériences à échelle locale à partir par exemple de cheminées dans les installations industrielles, puis de plus longue portée commencent alors à être réalisées.

Cette thèse repose sur l'utilisation d'un modèle de transport construit sur la base de cet historique. Dans ce premier chapitre, nous nous attachons à décrire succinctement les différents phénomènes qui dominent le transport de particules dans l'atmosphère. À partir de ces phénomènes peut être formulée une équation de transport, que nous présentons dans le cadre restreint et simplifié de l'étude du mouvement des radionucléides. Ensuite, le

modèle de dispersion atmosphérique employé dans cette thèse pour simuler le transport des radionucléides dans l'atmosphère est introduit. Nous définissons alors l'opérateur d'observation, l'objet construit à partir du modèle de dispersion qui est utilisé concrètement dans cette thèse.

1.1 Processus physiques

Les mouvements atmosphériques couvrent un large éventail d'échelles temporelles et spatiales - de centièmes de secondes à des milliers d'années, et de quelques millimètres à des milliers de kilomètres. Pour évaluer à ces différentes échelles les processus qui dominent ces mouvements, plusieurs sous-domaines d'études ont vu le jour.

Le sujet qui nous intéresse dans cette thèse nécessite des estimations de variables météorologiques (par exemple, le champ de vent, le champ de température, ou encore la turbulence) sur des domaines s'étendant horizontalement sur plusieurs centaines de kilomètres. Cette estimation dépend de la prise en compte de différents types de phénomènes :

- des phénomènes et processus atmosphériques intervenant à de grandes échelles spatiales ou temporelles dont les effets peuvent être pris en compte explicitement dans les modélisations ;
- des phénomènes plus locaux, intervenant à des échelles de temps et d'espace faibles par rapport à celles qui sont explicitement résolues par un modèle, et qui seront représentés par des paramétrisations, éventuellement des champs moyennés comme expliqué en section 1.3.1. Un exemple d'un tel processus est la turbulence présentée en section 1.1.3.2.

Dans cette première partie, nous introduisons ces phénomènes, détaillés par Stull 1988 ou Seinfeld et al. 2008, et en donnons une description concise.

Plus précisément, nous décrivons d'abord la structure de l'atmosphère, puis les couches qui la composent en section 1.1.2. À partir de ce cadre, les phénomènes qui régissent les mouvements horizontaux et verticaux sont décrits dans les parties 1.1.3.1 et 1.1.3.2. Les processus de dépôt et les processus chimiques sont ensuite abordés dans les sections 1.1.3.3 et 1.1.3.4.

1.1.1 Structure de l'atmosphère

Dans le cas d'un rejet important, des quantités non négligeables de polluants comme des particules radioactives peuvent être transportées sur de très longues distances. La modélisation de la dispersion de ces particules doit alors être réalisée sur des domaines de plusieurs milliers de kilomètres carrés. Il est nécessaire de savoir dans quel domaine

vertical le panache sera contenu lors d'un tel transport (Defforge 2019). Autrement dit, il est nécessaire de s'intéresser à la structure verticale de l'atmosphère décrite en figure 1.1.

L'atmosphère est divisée en plusieurs couches qui sont définies à partir du profil vertical de la température. Les quatre premières couches de l'atmosphère sont :

- la troposphère entre 0 et 8-18 km, où la température décroît avec l'altitude ;
- la stratosphère, du dessus de la troposphère jusqu'à 50 km au-dessus du sol, où la température croît avec l'altitude. Ce réchauffement est une conséquence de l'absorption du rayonnement solaire par la couche d'ozone ;
- la mésosphère, située entre la stratosphère et 80km, où la température décroît avec l'altitude ;
- la thermosphère qui va de la mésopause jusqu'à 500km d'altitude, où la température croît avec l'altitude.

Les limites supérieures de chaque couche sont appelées tropopause, stratopause, et mésopause.

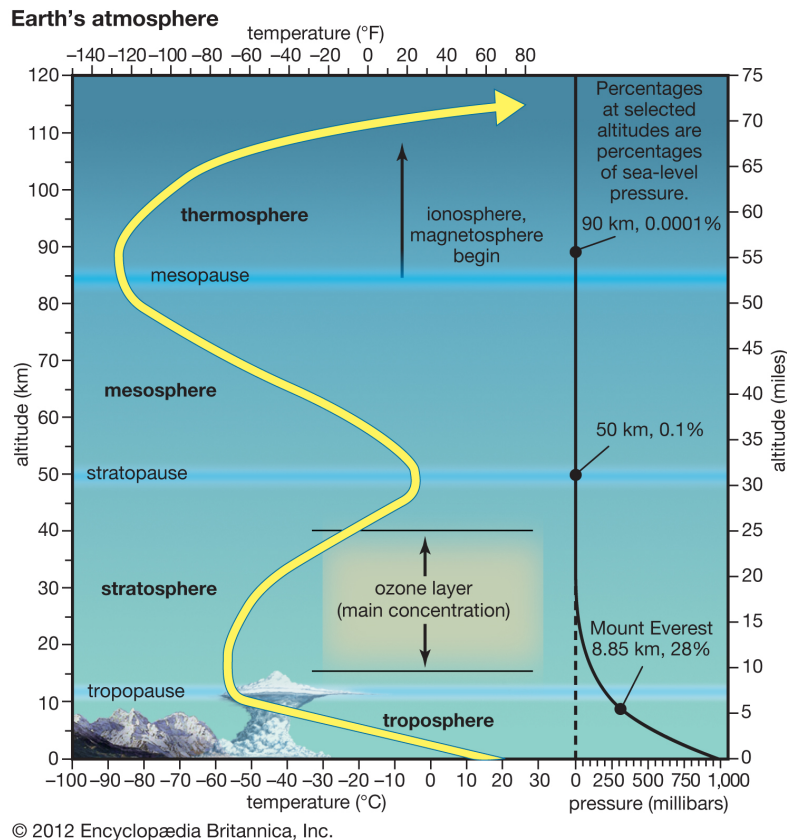


Figure 1.1 – Structure verticale de l'atmosphère (Sato et al. 2018).

La partie la plus basse de la troposphère, qui est en contact avec le sol, est appelée la couche limite atmosphérique (CLA) décrite sur la figure 1.2. Dans la CLA ont lieu de nombreux processus d'échanges de matière ou de chaleur entre l'air et la surface sous-jacente.

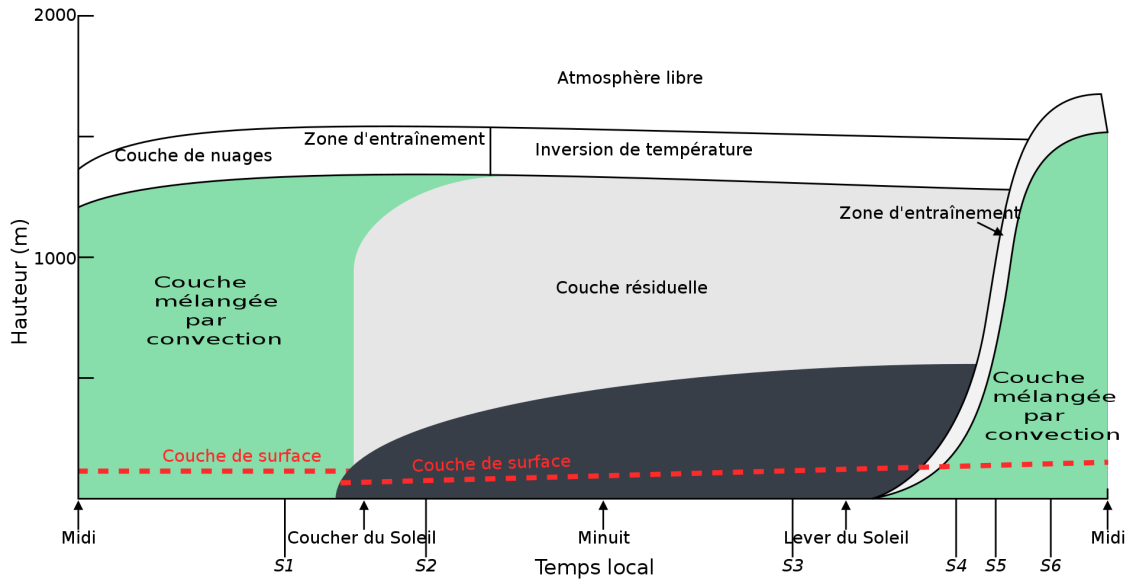


Figure 1.2 – Couche limite atmosphérique (Isabelle 2014).

La hauteur de la CLA varie entre quelques dizaines de mètres (typiquement la nuit) et plus d'un kilomètre (le jour). On appelle le reste de la troposphère la troposphère libre.

1.1.2 Couches et phénomènes atmosphériques

Le transport des polluants s'étudie en partie au travers de la météorologie, c'est-à-dire la science qui a pour objet l'étude et la modélisation des phénomènes atmosphériques. Ces phénomènes atmosphériques sont caractérisés par des échelles spatiales et temporelles différentes, que l'on peut résumer comme dans le tableau 1.1 ci-dessous.

Échelle	Taille caractéristique	Phénomènes atmosphériques typiques
Échelle synoptique	10^4 km	Mouvements synoptiques
Méso échelle	1 km - 1000 km	Mouvements thermiques ascendants, orage
Micro échelle	< 1 km	Turbulence, influence obstacle (bâtiments) : micro-météorologie

Table 1.1 – Échelles spatiales caractéristiques des phénomènes atmosphériques (Winiarek 2014).

Un phénomène ne peut donc être décrit explicitement dans le cadre d'une modélisation

que si l'on travaille à une certaine résolution. Selon le cas étudié, on peut se permettre, ou non, de travailler à plus ou moins haute résolution et donc expliciter plus ou moins de phénomènes.

À micro-échelle, pour décrire certains phénomènes dans la partie basse de la CLA, on a besoin de travailler à haute résolution : l'influence de la surface terrestre, de la canopée, et par exemple des bâtiments en milieu urbain est importante (Defforge 2019). On s'intéresse typiquement à la météorologie à micro-échelle lors de l'étude de la dispersion de particules en milieu urbain. En effet, la résistance des obstacles qui s'exerce sur le vent et l'augmentation de la turbulence, due aux effets de sillage des structures urbaines, ralentissent localement l'écoulement moyen. Les bâtiments peuvent également dévier horizontalement ou verticalement l'écoulement moyen de l'atmosphère et donc la trajectoire des particules.

A méso-échelle, on a besoin de travailler à moyenne résolution et on a recours à des paramétrisations pour décrire certains phénomènes dans la couche limite atmosphérique. Par exemple, le vent vertical étant généralement faible, le transport vertical des polluants reste principalement régi par les phénomènes de turbulence, c'est-à-dire des mouvements tourbillonnaires couvrant un large spectre d'échelles. Les obstacles pouvant engendrer une partie de cette turbulence ne sont par contre plus explicités mais représentés par une rugosité moyenne. Par ailleurs les polluants émis près de la surface finissent aussi par atteindre l'atmosphère libre. En première approximation on fait alors l'hypothèse que le vent est indépendant de la surface terrestre et ne dépend plus que de la force de Coriolis et du gradient de pression (vent géostrophique). Le transport vertical dans l'atmosphère libre est plus lent que dans la CLA. Les vents moyens verticaux restent faibles et la turbulence y est intermittente.

Nous allons travailler avec des données météorologiques qui explicitent des phénomènes atmosphériques à méso-échelle, et nous nous focaliserons sur la description de ces processus dans les vingt premiers kilomètres en altitude pour deux raisons :

- d'abord, car en cas de rejet de polluants radioactifs dans l'air, l'objectif est de mesurer l'impact de ces rejets sur les populations ou les surfaces stratégiques (comme les cultures agricoles). Ainsi, nous sommes intéressés par ce qui se déroule à la surface, c'est-à-dire dans la troposphère et particulièrement dans ses 5000 premiers mètres ;
- ensuite, car les échanges entre la troposphère et la stratosphère sont très lents en comparaison avec le temps de dispersion d'un panache. Par conséquent, les transports de particules dans cette thèse seront uniquement modélisés dans la troposphère.

Dans les prochaines sections, nous décrivons les différents phénomènes atmosphériques modélisés pour étudier le transport des particules à méso-échelle.

1.1.3 Transport et processus

La modélisation de la dispersion des particules est basée sur l'équation de transport que nous décrivons en section 1.3. Cette équation décrit les phénomènes physiques où des particules, de l'énergie ou d'autres quantités sont transférées à l'intérieur d'un système physique en raison des processus de la diffusion et de l'advection. Plus précisément, cette équation dépend de :

- la diffusion qui dépeint le transport relatif par rapport au milieu environnant en mouvement ;
- l'advection qui représente le transport à la vitesse du milieu environnant.
- les termes de production (source) et de perte (dépôt, processus chimiques) qui traduisent les variations des propriétés non imputables à l'advection et la diffusion.

Dans la suite, nous décrivons ces divers processus.

1.1.3.1 Déplacements horizontaux : le vent

L'advection désigne couramment le transport d'une quantité additive (la chaleur, l'énergie interne, un élément chimique arbitraire, les charges électriques) par le mouvement du milieu, quelle que soit l'origine de ce mouvement (instabilité gravitaire ou entraînement forcé).

En ce qui nous concerne, l'advection se résume essentiellement au transport horizontal des particules par les vents "moyens". On parle alors d'advection horizontale. La composante verticale des vents "moyens" étant faible, l'advection verticale peut souvent être négligée par rapport à la diffusion turbulente.

Dans la CLA, la vitesse de ces vents moyens horizontaux est typiquement de quelques mètres par seconde. Il existe cependant un gradient vertical important. En effet, à proximité du sol, à la hauteur de rugosité, on considère que la vitesse du vent est nulle du fait de l'adhérence. La vitesse du vent augmente ensuite avec l'altitude pour rejoindre au sommet de la CLA la valeur du vent géostrophique (Winiarek 2014).

1.1.3.2 Déplacements verticaux : la turbulence

La couche limite atmosphérique est un milieu très turbulent dans lequel des mouvements d'air, semblables à des tourbillons, dissipent l'énergie cinétique de l'écoulement. Ces tourbillons participent à la dispersion des polluants dans l'atmosphère, notamment sur la verticale.

Un écoulement turbulent est caractérisé par un large spectre d'échelles spatiales et temporelles. Les plus petites échelles ne peuvent généralement pas être explicitées dans les modèles. Plus précisément, les processus de turbulence dans la CLA sont des processus locaux dont on a besoin de représenter l'impact aux échelles résolues par notre modèle. On les représente alors via un mécanisme de diffusion, qui est responsable de la dilution des

polluants le long de leur parcours dans l'atmosphère (et donc de la baisse des concentrations en aval des sources). Ainsi, on ne résout pas explicitement les variations de concentrations à l'échelle locale en lien avec les tourbillons de la turbulence, mais on représente l'effet diffusif que ça a sur les concentrations moyennes résolues par le modèle.

Différents phénomènes sont à l'origine de la turbulence :

- le cisaillement du vent : le différentiel entre la vitesse du fluide au sol (nulle), et la vitesse du fluide au-dessus du sol (non-nulle) peut entraîner de la turbulence. Le cisaillement est dépendant de la présence éventuelle d'obstacles au sol ;
- les variations de température dans un fluide qui créent un gradient de densité et de l'instabilité : un mouvement est créé par poussée d'Archimède, qui tire une parcelle d'air vers le haut. On emploie pour caractériser ce processus le terme de convection, qui peut être lié au réchauffement du sol.

La turbulence, dominant le transport vertical, définit la hauteur de la couche limite, c'est-à-dire la couche où les échanges entre le sol et l'air environnant sont rapides :

- la nuit, la hauteur de couche limite est déterminée par le cisaillement du vent. Le mélange est beaucoup moins efficace pendant la nuit et n'atteint qu'une petite centaine de mètres ;
- le jour, la hauteur de couche limite est liée au réchauffement du sol. De manière générale, la couche limite pendant la journée est instable et croît pour atteindre un maximum l'après-midi.

1.1.3.3 Dépôt

Un autre type de processus modélisé par l'équation de transport est celui du dépôt de particules au sol.

Il existe deux types de dépôt :

- le processus de dépôt sec qui représente le transfert, de l'atmosphère vers le sol, de polluants situés près de la surface et captés par celle-ci, notamment par absorption ou adsorption. Son intensité dépend en particulier :
 - des conditions météorologiques ;
 - de la nature de la surface, comme le type de sol et la densité de la végétation éventuelle ;
 - de la saison (qui définit l'état de la végétation) ;
 - des propriétés physico-chimiques du polluant considéré.

La description du processus de dépôt sec contient beaucoup d'incertitudes. Bien que l'information sur l'occupation des sols soit relativement facile à obtenir, le manque de données empiriques conduit à une faible paramétrisation de ce processus physique ;

- le processus de dépôt humide, ou lessivage, ou encore l'entraînement au sol des polluants par les précipitations. Il existe deux types de dépôt humide :
 - le dépôt humide des polluants qui peuvent pénétrer les gouttes de pluie et les accompagner jusqu'au sol ;
 - le dépôt qui suit un échange de masse des polluants entre la phase gazeuse interstitielle et la phase aqueuse que représente l'ensemble des gouttes d'eau à l'intérieur des nuages.

La présence de pluie et de nuages est difficile à diagnostiquer, ce qui constitue une source d'incertitudes importante dans la modélisation des flux de dépôt humides.

1.1.3.4 Processus physico-chimiques

Selon la nature des différentes espèces considérées, des réactions chimiques et/ou photochimiques, des transformations physiques (e.g. condensation) doivent être représentées pour rendre compte de processus de production ou destruction de ces espèces.

Ces processus sont relativement complexes et généralement non-linéaires. Ils dépendent du temps, de l'espace, et des conditions météorologiques (éclairage, pression, température, humidité).

Dans les situations accidentelles étudiées, on considérera que le fait de ne pas prendre en compte ces transformations constitue une approximation acceptable par rapport aux incertitudes liées à la représentation des autres processus (et notamment le terme source). On considérera donc les espèces mises en jeu comme des espèces passives chimiquement. Néanmoins, et puisque dans ces travaux l'on étudie des radionucléides, le processus de décroissance radioactive sera considéré.

1.2 Modèle numérique

Avant de décrire en détail l'équation de transport sur la base des processus définis dans les sections précédentes, nous nous intéressons ici à la façon dont nous allons modéliser les processus de transport atmosphérique. Pour simuler le comportement et le déplacement des particules dans l'atmosphère, il existe deux grands types d'approches :

- les modèles dits "online" qui prennent en compte des couplages entre les équations décrivant l'écoulement et l'évolution des concentrations de polluants. À méso-échelle, ces modèles sont parfois utilisés en qualité de l'air et en science du climat. Par contre, en situation accidentelle, les couplages sont souvent négligeables car l'influence des polluants sur l'écoulement est faible aux échelles d'espace et de temps auxquelles on s'intéresse ;
- les modèles dits "offline" qui résolvent l'équation de transport en considérant que l'influence des polluants sur les champs météorologiques et les phénomènes de dispersion est négligeable. L'équation de transport que nous décrivons dans la section 1.3 se place dans ce formalisme.

Selon le cas d'étude (situation accidentelle, qualité de l'air) et l'échelle modélisée, plusieurs approches parmi les modèles offline peuvent être envisagées (Winiarek 2014). Nous détaillons dans la suite deux approches parmi les plus utilisées, notamment en situation opérationnelle :

- les modèles lagrangiens particuliers qui sont basés sur le suivi dans le temps de panaches de pollution - ou particules - le long de leurs trajectoires.
Plus précisément, à partir d'une source (ou d'un récepteur dans un cadre de modélisation inverse), un grand nombre de particules numériques sont émises. La trajectoire de chaque particule est suivie par le modèle, leur mouvement étant constitué :
 - d'une composante déterministe liée au champ de vent moyen,
 - d'une composante stochastique qui décrit la variabilité due à la turbulence.

La concentration de polluants est ensuite évaluée en fonction de la répartition de ces particules numériques ;

- les modèles eulériens que l'on utilise en particulier à grande et méso-échelle. Dans le formalisme eulérien, l'écoulement est suivi par un observateur depuis une position fixe. Dans ce cadre fixe, compte tenu des champs de vent et de la turbulence, les modèles eulériens résolvent les équations de transport pour un scalaire, qui représente la concentration de polluants.

Plus précisément, l'équation de transport est résolue sur un maillage : une grille de calcul qui représente le domaine de simulation discrétisé.

Cette approche est très utilisée en prévision de qualité de l'air, ou en situation accidentelle. Elle nécessite de fournir en entrée du modèle des champs météorologiques précalculés à l'échelle correspondante.

De nombreuses simulations de transport sont réalisées dans cette thèse. Le modèle de dispersion atmosphérique utilisé est le modèle eulérien ldX, qui fait partie de la plateforme opérationnelle C3X de l'IRSN (Tombette et al. 2014). Ce modèle de transport a été validé sur l'incident d'Algésiras, la campagne ETEX, ainsi que sur l'accident de Tchernobyl (Quélo et al. 2007) et l'accident de Fukushima-Daiichi (Saunier et al. 2013). Il a été construit à partir du système de modélisation de la qualité de l'air Polyphemus, et de son module de simulation eulérienne Polair3D (Mallet et al. 2007).

Dans la prochaine section, au sein du formalisme eulérien, l'équation de transport restreinte au mouvement des radionucléides est décrite.

1.3 Equation de transport

On considère une concentration d'activité c associée dans l'atmosphère à un radionucléide en phase particulaire. Cette concentration est soumise aux processus détaillés dans la partie 1.1.3 : advection, diffusion, décroissance radioactive, dépôt sec et lessivage. L'équation de transport est établie à partir des équations de Navier-Stokes réactives en utilisant deux hypothèses :

- l'hypothèse de dilution, qui consiste à négliger l'action des polluants sur l'écoulement du fluide : la dynamique de l'écoulement est ainsi indépendante de la situation de rejet de polluants, et en conséquence, les champs météorologiques sont connus (modélisation dite "offline") ;
- l'hypothèse d'incompressibilité.

Cette équation traduit le principe de conservation de l'activité. Sa représentation continue s'écrit :

$$\frac{\partial c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \underbrace{-\nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)c(\mathbf{x}, t))}_{\text{Advection par le vent}} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{K}_b(\mathbf{x}, t)\nabla c(\mathbf{x}, t))}_{\text{Diffusion brownienne}} - \underbrace{\lambda(\mathbf{x}, t)c(\mathbf{x}, t)}_{\text{Lessivage}} - \underbrace{\xi(c(\mathbf{x}, t))}_{\text{Décroissance radioactive}} + \underbrace{\sigma(\mathbf{x}, t)}_{\text{Source}}. \quad (1.1)$$

Les différents termes de cette équation représentent les phénomènes habituellement considérés pour modéliser l'évolution et le transport des particules (Roustan 2005) :

- $c(\mathbf{x}, t)$ représente la concentration en activité, exprimée en Bq.m^{-3} , à la position spatiale \mathbf{x} et à l'instant t ;
- l'advection par le vent, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, décrit le déplacement des radionucléides avec la masse d'air dans laquelle ils se trouvent, comme expliqué en section 1.1.3.1 ;
- l'homogénéisation des concentrations sous l'effet de la diffusion brownienne est représentée à travers la matrice des coefficients de diffusivité \mathbf{K}_b en $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$;
- le terme de lessivage est un terme de perte prenant en compte le retrait de l'atmosphère d'une partie de l'activité suite à son incorporation dans le sol, comme décrit en section 1.1.3.3 ;
- le terme de décroissance radioactive $\xi(c(\mathbf{x}, t))$ décrit la réduction du nombre de noyaux radioactifs instables. Nous ne considérons en revanche pas de production ou de destruction chimique, comme expliqué en section 1.1.3.4 ;
- enfin le terme source $\sigma(\mathbf{x}, t)$ correspond aux différentes émissions à l'intérieur du domaine modélisé (en $\text{Bq.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$).

1.3.1 Formulation moyennée

L'équation (1.1) décrit l'évolution de la concentration c au niveau "microscopique". Cependant, comme expliqué en section 1.1.3.2, il est impossible de prendre en compte toutes les échelles de la turbulence dans les modèles de dispersion atmosphérique à méso-échelle. Dans les types de modèles généralement utilisés aujourd'hui, une autre approche est privilégiée : la décomposition de Reynolds. Puisqu'il est impossible de décrire toutes les échelles, on a recours à l'utilisation de moyennes.

Plus précisément, les champs de concentration $c(\mathbf{x}, t)$ et de vent $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ peuvent être décomposés en la somme d'un champ moyen et de fluctuations autour de cette moyenne (i.e., fluctuation turbulente) :

$$\begin{aligned} c(\mathbf{x}, t) &= \overline{c(\mathbf{x}, t)} + c'(x, t), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \overline{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)} + \mathbf{u}'(x, t), \end{aligned} \quad (1.2)$$

avec, donc :

$$\begin{aligned} \overline{c'(x, t)} &= 0, \\ \overline{\mathbf{u}'(x, t)} &= 0. \end{aligned} \quad (1.3)$$

On peut alors appliquer cet opérateur de moyenne à l'équation 1.1. Un terme de flux turbulent $\nabla \cdot (c'\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t))$ apparaît que l'on choisit de modéliser ici par un terme diffusif. Autrement dit, on considère que les tourbillons de l'écoulement qui ne sont pas explicités dans l'équation moyennée ont un effet diffusif sur les concentrations moyennes. Ce terme de flux turbulent peut être paramétrisé à l'aide d'une matrice de coefficients turbulents $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ (en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), en se basant sur l'hypothèse de proportionnalité avec le gradient de la concentration moyenne.

$$\nabla \cdot (\overline{c'\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t)}) = -\nabla \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)\nabla c(\mathbf{x}, t)). \quad (1.4)$$

L'effet d'homogénéisation des concentrations par la turbulence étant dans l'atmosphère beaucoup plus important que celui de la diffusion brownienne, cette dernière est par conséquent habituellement négligée.

Des considérations précédentes, on déduit l'équation moyenne effectivement employée pour représenter le transport des radionucléides dans l'atmosphère :

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \underbrace{-\nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)c(\mathbf{x}, t))}_{\text{advection par le vent}} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)\nabla c(\mathbf{x}, t))}_{\text{turbulence}} - \underbrace{\lambda(\mathbf{x}, t)c(\mathbf{x}, t)}_{\text{Lessivage précipitations}} \\ &+ \underbrace{\xi(c(\mathbf{x}, t))}_{\text{décroissance radioactive}} + \underbrace{\sigma(\mathbf{x}, t)}_{\text{source}} \end{aligned} \quad (1.5)$$

après application de l'opérateur de moyenne, des décompositions proposées, et prise en compte de la linéarité de la décroissance radioactive (et donc de l'opérateur ξ). L'opérateur de moyenne est omis pour raisons de lisibilité.

En général la modélisation concerne un domaine fini. Pour résoudre l'équation de transport moyennée, on prend alors en compte des conditions aux limites, données par :

- les flux entrants aux frontières latérales du domaine simulé ;
- le processus de dépôt sec symbolisé par une vitesse caractéristique de dépôt sec v_d ;
- les éventuelles émissions de surface au niveau du sol ;
- et généralement par un flux nul sur la face supérieure du domaine, comme expliqué dans la section 1.1.2.

1.3.2 Choix de modélisation des processus

Dans cette courte section, nous décrivons nos choix de modélisation/paramétrisation des différents processus caractérisant l'équation de transport.

La matrice de diffusion \mathbf{K} est supposée diagonale : les termes non-diagonaux de \mathbf{K} sont considérés comme négligeables. La diffusion turbulente verticale est quantifiée à travers le troisième coefficient diagonal de la matrice de diffusion \mathbf{K} . Celui-ci est logiquement noté K_{zz} ou plus simplement K_z . Deux paramétrisations sont utilisées pour décrire K_z :

- la paramétrisation de Troen et Mahrt 1986 en condition instable dans la CLA ;
- la paramétrisation de Louis 1979 dans le reste de l'atmosphère ;

Le terme de diffusion horizontal est lui nommé K_h et est dans ces travaux considéré nul : $K_h = 0 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$.

En ce qui concerne la vitesse de dépôt sec, celle-ci est considérée comme constante et typiquement égale à

$$v_d = 2.10^{-3} \text{ m.s}^{-1}. \quad (1.6)$$

Le coefficient de lessivage λ est considéré égal à $\Lambda_0 p_0$, où $\Lambda_0 = 5.10^{-5} \text{ h} \cdot (\text{mm.s})^{-1}$ et p_0 est l'intensité des précipitations en mm.h^{-1} (Baklanov et Sørensen 2001).

Le domaine est discrétisé verticalement en couches de plus en plus espacées : par exemple, on considère 15 couches de plus en plus espacées de 0 à 8000m. Le rejet à la source est alors considéré comme réparti sur plusieurs couches. Cette répartition dépend du type d'évènement considéré. On peut par exemple considérer qu'il est réparti sur les deux couches les plus basses :

- à 40% dans la première couche (entre 0 et 40 m),
- à 60% dans la deuxième couche (entre 40 et 120 m).

A partir du modèle eulérien ldX et de sa paramétrisation décrite ci-dessus, nous décrivons dans la prochaine partie la construction et le calcul de l'opérateur d'observation. L'opérateur d'observation est la matrice représentant le modèle physique que nous utilisons concrètement dans les équations de cette thèse.

1.4 Opérateurs d'observation

1.4.1 Définitions

Dans la suite de cette thèse, le transport atmosphérique est pris en compte à travers une matrice : l'opérateur d'observation. L'opérateur d'observation noté \mathbf{H} est une matrice représentant le transport d'un terme source donné. Plus précisément, l'opérateur d'observation transforme un terme source donné en un vecteur de prédictions comparable au vecteur d'observations du problème. Pour le construire, nous avons besoin de définir le vecteur des débits de rejet, représentant le terme source, ainsi que le vecteur de prédictions.

1.4.1.1 Le vecteur des débits de rejet

Le terme source peut être représenté par une fonction du débit de rejet, q_t . La fonction du débit de rejet est une fonction qui décrit l'évolution de la quantité de radionucléides en fonction du temps. Un débit de rejet est exprimé en Bq.s^{-1} .

L'équation de transport (1.5) ne possède pas de solution analytique et est donc résolue de façon approchée. Plus précisément, elle est discrétisée afin que l'on puisse procéder à une intégration numérique. Comme une fonction continue ne peut être reconstruite avec l'approximation numérique de l'équation de transport (par construction mathématique), ce qu'on retrouve en réalité est une fonction en escaliers représentant cette fonction continue, i.e., un vecteur de débits de rejet constants sur des intervalles temporels : \mathbf{q} . Chaque élément de ce vecteur représente la valeur du débit de rejet durant un certain intervalle de temps. Nous définissons une impulsion comme un intervalle temporel où le débit de rejet est constant. Le nombre d'impulsions, soit le nombre d'intervalles temporels, c'est-à-dire la taille du vecteur \mathbf{q} , est noté N_{imp} .

1.4.1.2 Le vecteur de prédictions

Nous définissons dans cette sous-partie le vecteur de prédictions. Pour cela, nous nommons \mathbf{y} le vecteur décrivant les observations mesurées à un ensemble de stations, et pour un ensemble d'intervalles temporels. On peut alors définir $\mathbf{y}_S = \mathbf{y}_{S, x_1, x_2, h, \mathbf{q}}$ le vecteur des prédictions correspondantes calculées à l'aide du modèle de transport pour une source donnée de coordonnées (x_1, x_2, h) et un terme source associé représenté par un vecteur de débits de rejet \mathbf{q} . Ce vecteur de prédictions correspond aux concentrations simulées du modèle de dispersion, aux lieux, temps, et intervalles temporels des observations. Autrement dit, si notre modélisation était parfaite, nous aurions : $\mathbf{y}_S = \mathbf{y}$.

1.4.2 Construction de l'opérateur d'observation

Dans cette partie, nous définissons l'opérateur d'observation. Nous pouvons construire, à partir :

- du modèle eulérien ldX ,
- d'une source rejetant des radionucléides définie par ses variables $(x_1, x_2, h, \mathbf{1}_q)$ avec $\mathbf{1}_q$ un vecteur de débit de rejets unitaires,

une matrice \mathbf{W} contenant pour chaque maille d'un domaine l'activité volumique prédite par le modèle.

Plus précisément, \mathbf{W} une matrice de prédictions de taille $(N_{x_1}, N_{x_2}, N_z, N_t, N_{\text{imp}})$ peut être calculée, où N_{x_1}, N_{x_2} représentent le nombre de mailles en longitude et en latitude, N_z le nombre de mailles verticales considérées, N_t le nombre de mailles temporelles, et N_{imp} la taille de $\mathbf{1}_q$. Un coefficient (i, j, z, t, k) de \mathbf{W} représente l'activité volumique prédite par le modèle aux coordonnées spatio-temporelles (i, j, z, t) pour un débit de rejet unitaire au temps k .

On suppose maintenant que la hauteur du rejet est connue. La construction de l'opérateur d'observation \mathbf{H} repose alors sur l'hypothèse de linéarité de la relation source-concentration qui découle des hypothèses constitutives du modèle de transport. Autrement dit, l'opérateur d'observation ne dépend pas de l'amplitude du rejet considéré, mais seulement du moment du rejet considéré. Plus précisément, du vecteur \mathbf{q} , l'opérateur d'observation ne dépend que de sa composante temporelle, c'est-à-dire le nombre d'impulsions N_{imp} et la taille de chacune de ces impulsions.

A partir de ces deux hypothèses, et de \mathbf{W} , on peut extraire une matrice de taille $N_{\text{obs}} \times N_{\text{imp}}$: l'opérateur d'observation \mathbf{H} . La construction algorithmique de cette matrice est décrite en section 1.4.2.1. L'opérateur d'observation se lit de la façon suivante : la colonne j de \mathbf{H} est le vecteur de prédictions \mathbf{y}_S :

- correspondant au vecteur d'observations \mathbf{y} du cas étudié,
- pour une source de coordonnées (x_1, x_2) ,
- pour un terme source unitaire rejeté pendant l'impulsion, c'est-à-dire l'intervalle temporel, j .

Il en vient l'équation décrivant la relation entre l'opérateur d'observation \mathbf{H} et le vecteur de prédictions \mathbf{y}_S associé au vecteur d'observations \mathbf{y} :

$$\mathbf{y}_S = \mathbf{H}\mathbf{q}. \tag{1.7}$$

\mathbf{H} est donc la matrice de taille $N_{\text{obs}} \times N_{\text{imp}}$ qui, pour une source située aux coordonnées (x_1, x_2) de débits de rejet définis sur N_{imp} intervalles temporels, permet de calculer les prédictions du modèle associé au vecteur d'observations \mathbf{y} .

Dans les prochaines sections :

- nous décrivons le calcul algorithmique de \mathbf{H} ;

- puis, nous nous intéressons à la façon dont l'ensemble des opérateurs d'observation $\{\mathbf{H}_{x_1, x_2}\}_{(x_1, x_2)}$ pour chaque position (x_1, x_2) est calculé. Si la position de la source est inconnue, alors les coordonnées sont des variables continues que l'on doit estimer à l'intérieur d'un certain domaine. Or, le calcul d'un opérateur d'observation \mathbf{H}_{x_1, x_2} pour une certaine position est coûteux. Nous ne pouvons donc calculer qu'un nombre limité d'opérateurs d'observation, lié à un nombre limité de positions. La section 1.4.2.2 décrit comment nous traitons le cas de toutes les autres positions.

1.4.2.1 Calcul algorithmique de \mathbf{H}

On suppose dans cette partie les coordonnées de la source (x_1, x_2) fixées et, comme dans la partie précédente, nous définissons les différentes quantités en omettant ces coordonnées dans un souci de lisibilité : par exemple $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{x_1, x_2}$.

Dans cette section, nous décrivons plus précisément la façon dont nous pouvons décomposer la matrice \mathbf{H} définie dans l'équation 1.4.2 afin d'obtenir la relation (1.7). L'opérateur d'observation \mathbf{H} est la matrice qui contient pour chaque observation sa prédiction associée pour un terme source unitaire.

Chaque observation y_i est :

- une mesure associée à une station représentée dans une maille,
- une mesure associée à une période temporelle,
- modélisée comme mesurée au centre du premier niveau vertical, c'est-à-dire au centre de la première couche verticale.

Dans un premier temps, nous pouvons donc extraire de \mathbf{W} une sous-matrice \mathbf{V} de dimensions $(N_{\text{sta}}, N_t, N_{\text{imp}})$ où

- N_{sta} est le nombre de stations où nous avons une ou plusieurs observations ;
- N_t est le nombre d'intervalles temporels Δ_t (et chaque observation est mesurée sur un agrégat d'un ou plusieurs intervalles temporels) ;
- N_{imp} est le nombre d'impulsions.

On note dans la suite $v_{n,t,i}$ le coefficient de \mathbf{V} à la position $n \in [1, N_{\text{sta}}]$, $t \in [1, N_t]$, et $i \in [1, N_{\text{imp}}]$. Ce coefficient correspond à l'activité volumique de la substance rejetée à un moment donné, à une station donnée et pour un débit de rejet unitaire associé à une impulsion donnée.

On se place maintenant dans le cas où les observations sont des mesures d'activité volumique. De fait, une prédiction $y_{S,i}$

- correspondant à l'observation i mesurée
 - à une station n_i ;

– à une période $[t_i, t_i + k_i \Delta_t]$, où t_i correspond au moment du début de la mesure et k_i à la durée de la mesure (nombre de pas de temps) ;

- et calculée à partir d'un vecteur de débits de rejet $\mathbf{q} = [q_1, \dots, q_{N_{\text{imp}}}]$;

est le résultat de la somme :

$$y_{S,i} = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \sum_{t=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \frac{v_{n_i,t,j} q_j}{k_i \Delta_t}, \quad (1.8)$$

où on modélise l'activité volumique sur une période spécifique comme la moyenne des activités volumiques des sous-périodes minimales.

Ceci est égal à :

$$y_{S,i} = \mathbf{q}^\top \left[\sum_{t=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \frac{v_{n_i,t,1}}{k_i \Delta_t}, \dots, \sum_{t=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \frac{v_{n_i,t,N_{\text{imp}}}}{k_i \Delta_t} \right]. \quad (1.9)$$

L'ensemble des vecteurs :

$$\left\{ \left[\sum_{t=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \frac{v_{n_i,t,1}}{k_i \Delta_t}, \dots, \sum_{t=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \frac{v_{n_i,t,N_{\text{imp}}}}{k_i \Delta_t} \right] \mid i \in [1, N_{\text{obs}}] \right\}, \quad (1.10)$$

chacun étant associé à une observation et permettant de calculer la prédiction correspondante, peuvent être agrégés dans une matrice : l'opérateur d'observation \mathbf{H} . Plus précisément :

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \sum_{t=t_1}^{t_1+k_1 \Delta_t} \frac{v_{n_1,t,1}}{k_1 \Delta_t} & \dots & \sum_{t=t_1}^{t_1+k_1 \Delta_t} \frac{v_{n_1,t,N_{\text{imp}}}}{k_1 \Delta_t} \\ \dots & \dots & \dots \\ \sum_{t=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \frac{v_{n_i,t,1}}{k_i \Delta_t} & \dots & \sum_{t=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \frac{v_{n_i,t,N_{\text{imp}}}}{k_i \Delta_t} \\ \dots & \dots & \dots \\ \sum_{t=t_N}^{t_N+k_N \Delta_t} \frac{v_{n_N,t,1}}{k_N \Delta_t} & \dots & \sum_{t=t_N}^{t_N+k_N \Delta_t} \frac{v_{n_N,t,N_{\text{imp}}}}{k_N \Delta_t} \end{bmatrix} \quad (1.11)$$

avec donc $v_{n_i,t,j}$ qui correspond à l'activité volumique de radionucléides simulée par le modèle de dispersion à l'emplacement de la station n_i correspondant à l'observation i , au temps t , pour un vecteur de débits de rejet $\mathbf{q} = (0, \dots, 1_j, \dots, 0)$. Ici $N = N_{\text{obs}}$ et est utilisé pour des raisons de lisibilité.

$\mathbf{H}_{x_1, x_2} = \mathbf{H}$ est donc finalement une matrice 2D de taille $N_{\text{imp}} \times N_{\text{obs}}$ où le coefficient à la ligne i et à la colonne j correspond à la prédiction associée à l'observation i pour un débit de rejet unitaire émis au moment j .

On peut noter que le calcul de l'opérateur d'observation dans le cas où les observations sont des mesures de dépôt diffère dans le fait que le dépôt est une mesure cumulée, et qu'une concentration est une mesure moyennée. Par conséquent, on ne calcule pas le dépôt comme une moyenne mais comme une somme.

1.4.2.2 Interpolation spatiale de l'opérateur d'observation

Il n'existe pas de relation simple entre deux opérateurs d'observations calculés à des positions différentes : \mathbf{H}_{x_1, x_2} et $\mathbf{H}_{x'_1, x'_2}$ pour $(x_1, x_2) \neq (x'_1, x'_2)$. Or, nous avons besoin dans la suite de cette thèse de simuler la dispersion de radionucléides à partir de nombreuses sources à de nombreuses positions différentes, et nous ne pouvons calculer systématiquement l'opérateur d'observation exactement associé. Par conséquent, l'opérateur d'observation à une position donnée est approximé par interpolation bilinéaire à partir d'une grille d'opérateurs d'observation calculés par le modèle de transport.

Plus précisément, pour une situation où la localisation de la source est inconnue et recherchée, un ensemble de matrices $\{\mathbf{H}_{x_1, x_2}\}_{(x_1, x_2)}$ est calculé où les coordonnées (x_1, x_2) couvrent le domaine spatial discrétisé où nous recherchons la source. Une fois cette étape terminée, l'opérateur d'observation d'une source de coordonnées spatiales (u, v) est calculé comme l'interpolation bilinéaire des quatre matrices l'encadrant, puisqu'en pratique, l'emplacement (u, v) de la source est contenu dans une maille de notre domaine.

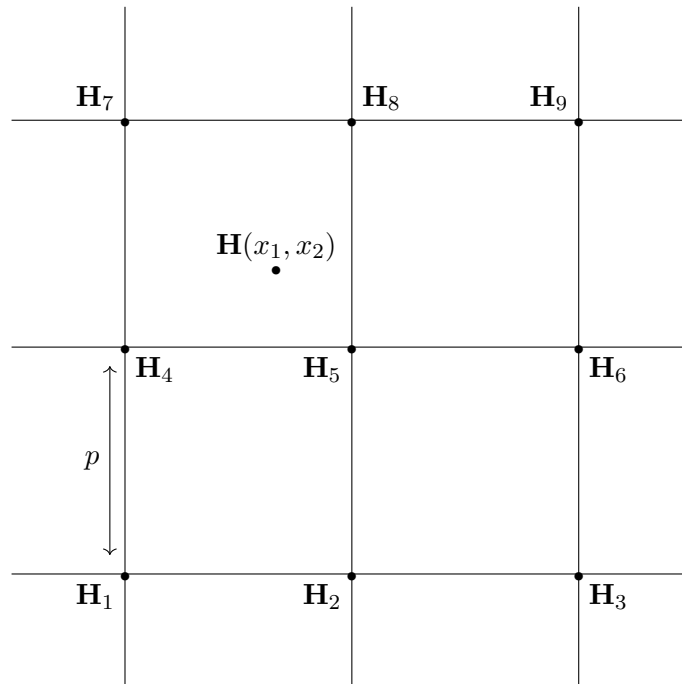


Figure 1.3 – Grille des opérateurs d'observation. L'ensemble des opérateurs d'observation $\{\mathbf{H}_i\}_{i \in [1,9]}$ est pré-calculé à l'aide du modèle de dispersion atmosphérique ldX selon la matrice (1.11). $\mathbf{H}(x_1, x_2)$ est interpolé bilinéairement à l'aide de $\mathbf{H}_4, \mathbf{H}_7, \mathbf{H}_8, \mathbf{H}_5$. p est la résolution de la grille d'opérateurs d'observation.

Dans un souci de lisibilité, dans cette thèse, nous utilisons régulièrement \mathbf{H} plutôt que

\mathbf{H}_{x_1, x_2} pour identifier une matrice correspondant à l'emplacement d'une source (x_1, x_2) quand l'explicitation de l'emplacement n'est pas nécessaire.

Dans le prochain chapitre, nous abordons le sujet du problème inverse et nous intéressons à la façon dont ce problème peut être posé dans le cadre de la reconstruction d'une source de radionucléides.

2 Problème inverse

Sommaire

2.1	De l'évaluation d'une source à la modélisation inverse	39
2.1.1	Approches ascendantes et descendantes	39
2.1.2	Cadre de la reconstruction d'une source de radionucléides	39
2.2	Modélisation inverse déterministe du terme source	42
2.2.1	Principes	42
2.2.2	Méthodes paramétriques et non-paramétriques	43
2.2.3	Équation d'observation	44
2.2.4	Formulation variationnelle par les moindres carrés	45
2.2.5	Terme de régularisation	46
2.2.6	L'estimateur BLUE	47
2.2.7	Modélisation et estimation des incertitudes	48

Un problème inverse est une situation dans laquelle les causes d'un phénomène physique sont estimées à partir des observations expérimentales de ses effets.

On retrouve la résolution de problèmes inverses dans de nombreux domaines scientifiques tels que la sismologie (avec la localisation de l'origine d'un tremblement de terre), l'astrophysique, ou encore les prévisions météorologiques.

Dans le cadre des sciences atmosphériques et de l'estimation de rejets de polluants dans l'atmosphère, le problème inverse correspond au problème de l'estimation du terme source. Le terme source est défini comme l'expression de la nature, de la quantité et de la cinétique de rejet des produits d'une installation en conditions normales de fonctionnement, ou au cours d'un accident. La modélisation inverse du terme source est alors définie comme son estimation à partir de l'utilisation

- des mesures sur le terrain ;
- d'un modèle de transport qui simule la dispersion des polluants dans l'atmosphère.

Comme illustré sur la figure 2.1, grâce au terme source reconstruit et aux champs météorologiques, le modèle de transport peut ensuite être utilisé pour modéliser l'impact d'un rejet dans l'environnement.

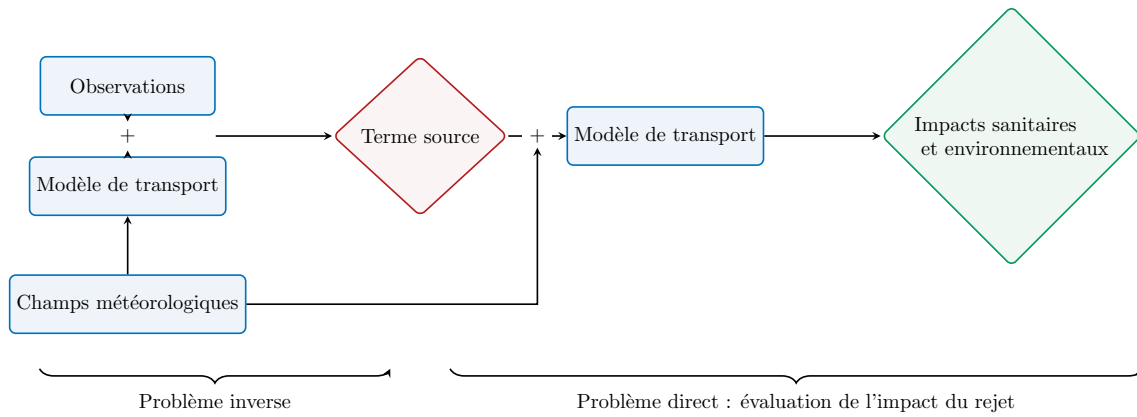


Figure 2.1 – Intérêt de la modélisation inverse du terme source dans l'évaluation de l'impact d'un rejet de radionucléides.

Dans ce chapitre, nous expliquons tout d'abord pourquoi nous avons retenu la méthode du problème inverse, puis le cadre dans lequel nous allons l'appliquer. Dans une deuxième partie, nous décrivons les principes importants de la modélisation inverse du terme source.

2.1 De l'évaluation d'une source à la modélisation inverse

Dans cette courte section, nous proposons dans un premier temps de faire un rapide résumé des deux grandes approches d'évaluation de sources. Ensuite, nous présentons le cadre dans lequel nous allons appliquer nos méthodes inverses : celui de la reconstruction d'une source de radionucléides.

2.1.1 Approches ascendantes et descendantes

L'évaluation des émissions de polluants atmosphériques, par exemple de nature radiologique, est un sujet de grande importance dans les sciences de l'atmosphère. Leur estimation est directement liée au problème de l'estimation du terme source qui peut être résolu selon deux grands types de démarches :

- l'approche ascendante (dite bottom-up) repose principalement sur l'élaboration d'un inventaire des rejets à l'aide d'un modèle physique ou statistique décrivant le processus d'émission. Elle est basée sur une description (par exemple statistique) du modèle du processus d'émission en réalisant un véritable état des lieux. Par exemple, pour reconstruire les émissions des gaz à effet de serre, les informations détaillées des pays peuvent être utilisées (la consommation d'énergie, ainsi que la répartition de la population). Autrement dit, c'est une démarche d'où l'on part du « bas », c'est-à-dire de l'échelon le plus fin, pour consolider progressivement et opérer une synthèse ;
- l'approche descendante (dite top-down) (Nisbet et Weiss 2010) est basée sur l'idée de partir des conséquences pour établir les causes. Cette approche recouvre les méthodes inverses, qui combinent des mesures environnementales (par exemple, les concentrations atmosphériques) avec un modèle de transport.

Dans cette thèse, nous nous intéressons à la reconstruction de sources de rejet de produits radioactifs dans l'atmosphère. Dans ce cadre, les informations sur le débit de rejet et son évolution temporelle, la hauteur d'émission et parfois la localisation de la source peuvent être incomplètes. Par conséquent, pour ces cas, les approches classiques s'inscrivent dans le cadre de la modélisation inverse (et donc de l'approche descendante).

2.1.2 Cadre de la reconstruction d'une source de radionucléides

Les méthodes de modélisation inverse s'appliquent sur et à l'aide d'objets rigoureusement définis. Dans cette sous-section, nous proposons de caractériser deux objets :

- la source, c'est-à-dire, l'objectif à reconstruire ;
- les données du problème, c'est-à-dire, le vecteur d'observations.

Pour reconstruire la source, il nous faut d'abord définir un ensemble de paramètres qui suffisent à la décrire complètement. Cet ensemble de paramètres est constitué :

- de paramètres connus, et définis avant l'application des méthodes de modélisation inverse. Ce sont
 - des paramètres soumis à peu d'incertitudes ;
 - des paramètres éventuellement incertains mais peu sensibles, et dont l'incertitude aura ainsi peu d'impact (comme la hauteur de rejet) ;
 - des paramètres qui complexifieraient trop le problème s'ils n'étaient pas définis à l'avance.

Typiquement, on considérera la hauteur d'émission, la composition isotopique, et éventuellement la localisation des radionucléides rejetés comme des paramètres connus ;

- de paramètres inconnus, et donc des variables qui doivent être retrouvées. Ce sont les paramètres soumis à de larges incertitudes qui nécessitent l'utilisation de méthodes inverses. Par exemple, on considérera les débits de rejet, ou parfois la localisation, comme des variables.

Comme décrit précédemment, ces paramètres inconnus ou variables devront être estimés à partir d'observations. Différents types de mesures peuvent être utilisées :

- des mesures d'activité volumique (Winiarek et al. 2012 ; Y. Liu et al. 2017). En France, des mesures d'activité volumique dans l'air sont effectuées de manière systématique par le réseau Opéra-Air¹. D'autre part, pour plusieurs événements traités dans cette thèse, certaines mesures proviennent de capteurs liées au Traité d'Interdiction Complète des Essais Nucléaires (TICE)². Ces mesures ne seront pas décrites. Il est important de noter qu'un capteur mesurant des activités volumiques dans l'air possède une limite de détection, c'est-à-dire une concentration en-dessous de laquelle l'activité volumique est considérée comme nulle ;
- des mesures de débit de dose, c'est-à-dire l'énergie par unité de masse et de temps absorbée (Saunier et al. 2013) ;
- des dépôts de radionucléides au sol (Winiarek et al. 2014).

La caractérisation de la source dépend du type d'évènement étudié. On peut en effet distinguer les évènements de rejet en deux grandes catégories :

- des évènements majeurs comme l'accident de Fukushima-Daiichi en mars 2011. Ces évènements sont caractérisés par l'accès à un grand nombre d'observations, de larges

1. www.irsn.fr/FR/Larecherche/outils-scientifiques/installations-moyens-experimentaux/Opera/Pages/reseau-Opera-Air.aspx#.X-yuS9ZCfiQ

2. <https://onu-vienne.delegfrance.org/OTICE-970>

variations temporelles dans le rejet, de grande quantités de radionucléides rejetées et donc des transports lointains de concentrations significatives ;

- des évènements mineurs comme les rejets de ruthénium 106 en Europe à l'automne 2017. Ces évènements sont caractérisés par un nombre d'observations plus petit, des observations prélevées sur des durées plus longues (car la durée de prélèvement est inversement proportionnelle à la limite de détection), une localisation du rejet parfois non connue, et une variance temporelle du terme source plus petite.

2.2 Modélisation inverse déterministe du terme source

L'approche la plus utilisée en modélisation inverse pour l'évaluation de terme source est l'approche variationnelle déterministe. Cette méthode consiste à estimer le terme source optimal (Winiarek et al. 2012; Bocquet 2012; Saunier et al. 2013) en minimisant une fonction de coût mesurant les différences entre

- les mesures observées et simulées,
- les mesures simulées et un terme dit d'ébauche,

à l'aide d'outils comme la descente de gradient (Saunier et al. 2019) ou des algorithmes génétiques (Schmehl et al. 2012).

Nous développons dans les prochaines sections les principes et les enjeux de la méthode variationnelle déterministe.

2.2.1 Principes

Un modèle mathématique est un système représentant les structures essentielles d'une réalité à l'aide d'un ensemble de paramètres, et capable à son niveau d'en expliquer le fonctionnement³. Autrement dit, un modèle mathématique a pour but de prévoir, étant donné ses paramètres, le comportement d'un système et donc de formuler des prédictions.

Dans de nombreuses situations, l'objectif n'est pas la connaissance exacte de l'état physique de notre système, mais seulement la connaissance de ses effets sur certains objets (par exemple, les effets d'un champ gravitationnel ou d'un rejet de radionucléides nocives dans l'atmosphère). La finalité est en effet de convertir l'état du système physique (ici, le champ gravitationnel ou la source du rejet de radionucléides) en ce que nous voulons observer (ici, les mouvements de la planète considérée ou les conséquences sanitaires et environnementales, respectivement).

La modélisation mathématique consiste alors en deux étapes :

- la détermination de l'état du système que l'on note \mathbf{x} , c'est-à-dire des paramètres physiques qui le décrivent ;
- l'application d'un opérateur à l'état estimé du système afin de prévoir le comportement de ce que nous voulons observer.

C'est la modélisation de conséquences à partir des causes d'un phénomène.

La modélisation inverse est à l'opposé une représentation de la cause d'un phénomène à partir de ses conséquences. C'est toujours une modélisation, mais le but n'est plus de formuler des prédictions, mais d'utiliser les observations et les prédictions d'un modèle pour reconstruire l'état physique d'un système. Plus précisément, la modélisation inverse consiste à déterminer les variables de modèle inconnues qui caractérisent au mieux un

3. <http://atilf.atilf.fr/tlfv3.htm>

système dont la sortie (qu'elle soit numérique ou physiquement mesurée) est partiellement connue.

Dans notre cas, les techniques de modélisation inverse réalisent une estimation objective du terme source en utilisant les informations issues des observations et du modèle numérique qui simule la dispersion. Du modèle numérique qui simule la dispersion est déduit l'opérateur d'observation \mathbf{H} qui a pour rôle de produire, à partir d'une source donnée \mathbf{x} , un vecteur de prédictions commensurable au vecteur d'observations. Cela permet d'évaluer la correspondance entre le vecteur d'observations et un état physique du système donné \mathbf{x} , et ainsi de choisir le vecteur \mathbf{x} le plus adapté.

2.2.2 Méthodes paramétriques et non-paramétriques

Les statistiques paramétriques forment le cadre habituel de la statistique. En statistique paramétrique, un modèle est construit à partir d'un nombre fini et limité de paramètres définis à l'avance. Dans notre cas, c'est la source à reconstruire qui est réduite à un nombre limité de paramètres à estimer.

Ce cadre paramétrique permet d'intégrer des contraintes dans un système. Ainsi, le problème inverse est parfois naturellement régularisé. Ce sujet est discuté dans la section 2.2.5. L'inconvénient est que selon la compatibilité de la vraie source avec la paramétrisation choisie, l'inversion peut conduire à un résultat éloigné de la réalité, voire conduire à des résultats non physiques.

Une autre stratégie repose sur l'utilisation de méthodes dites non-paramétriques pour reconstruire la source. Le principe est d'éviter autant que possible de paramétriser le problème, en minimisant le nombre d'hypothèses sur la forme, la nature ou le type de la distribution des variables aléatoires. Par exemple, le champ complet d'émissions peut être reconstruit, en le discrétisant au maillage du modèle (de météorologie ou de transport). Le nombre de variables est alors très élevé, éventuellement plus élevé que le nombre d'observations disponibles. Les méthodes non-paramétriques sont à la fois robustes et souples puisqu'elles ne s'appuient pas sur des hypothèses a priori fortes sur la nature de la source. Mais elles ont leurs propres limites. Typiquement, un nombre de variables trop élevé peut être trop coûteux à évaluer. D'autre part, le problème est très souvent non régularisé : il existe un nombre infini de solutions.

Dans notre cas, les différences au niveau applicatif entre une méthode paramétrique et une méthode non-paramétrique reposent sur :

- la recherche des variables décrivant la position :
 - la méthode paramétrique consiste à supposer qu'il existe un nombre fini de positions : par exemple, une seule et unique source. Si on suppose la hauteur du

rejet connue, cela revient à chercher deux variables : les coordonnées de la dite source ;

- la méthode non-paramétrique consiste à ne pas paramétrer la position. On suppose qu'il existe un rejet par maille. Le rejet final est par conséquent une somme de toutes ces émissions ;
- la recherche des variables décrivant la fonction du débit de rejet de radionucléides :
 - la méthode paramétrique consiste à assumer que le rejet est constant sur certaines périodes de temps ;
 - la méthode non-paramétrique, elle, ne suppose le rejet constant qu'au pas de temps minimum (celui de la météorologie ou du modèle de dispersion), voire ne fait aucune hypothèse et procède par interpolation.

Les méthodes non paramétriques sont évidemment bien plus coûteuses en temps de calcul, et sont sujettes à des phénomènes de surapprentissage. Nous nous placerons dans la suite de cette thèse dans le cadre des méthodes dites paramétriques.

Nous décrivons dans les prochaines parties le formalisme du problème inverse dans le cadre des méthodes paramétriques. Plus précisément :

- l'équation d'observation sur lequel le problème inverse est basé est décrite en section 2.2.3 ;
- en section 2.2.4, nous développons l'équation d'observation à l'aide d'une formulation variationnelle par les moindres carrés ;
- le terme de régularisation et son utilité sont introduits en section 2.2.5 ;
- enfin, à partir de cette formulation par les moindres carrés et le terme de régularisation, nous introduisons
 - l'estimateur BLUE, une solution au problème inverse, en section 2.2.6 ;
 - différentes méthodes pour estimer les incertitudes liées à cette formulation en section 2.2.7.

2.2.3 Équation d'observation

Une hypothèse classique dans les situations accidentelles est de considérer le problème inverse linéaire et l'opérateur d'observation \mathbf{H} linéaire. On considère effectivement les processus physico-chimiques non-linéaires comme négligeables comme expliqué dans la section 1.1.3.4 du chapitre 1. Cela permet d'écrire, après discrétisation du terme source, la relation entre les observations et le vecteur source, ou équation d'observation :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \epsilon. \quad (2.1)$$

Dans cette équation, sont décrits :

- le vecteur d'observations \mathbf{y} dans $\mathbb{R}^{N_{\text{obs}}}$, avec N_{obs} le nombre d'observations ;
- l'opérateur d'observation, ou matrice source-récepteur du transport atmosphérique, \mathbf{H} , la matrice jacobienne du modèle numérique qui met en relation la source et les observations ;
- la source \mathbf{x} , c'est-à-dire le vecteur des variables décrivant la source du rejet : évolution du rejet, nature des radionucléides, localisation, ou encore hauteur du rejet ;
- de fait, le produit matriciel $\mathbf{H}\mathbf{x}$ qui correspond au transport atmosphérique d'un panache provenant d'une source \mathbf{x} , et plus précisément aux prédictions \mathbf{y}_S commensurables aux observations \mathbf{y} , comme décrit en section 1.4 du chapitre 1. Autrement dit, $\mathbf{H}\mathbf{x}$ contient les prédictions du modèle de dispersion aux sites des observations ;
- le vecteur d'erreur d'observation ϵ dans $\mathbb{R}^{N_{\text{obs}}}$ qui prend en compte les erreurs de mesures, de représentativité et une partie des erreurs de modèle. ϵ exprime aussi le concept de bruit, ou de résidus. Dans le but de trouver un modèle qui correspond aux données, leur analyse révèle si le modèle peut être considéré comme réaliste ou non.

2.2.4 Formulation variationnelle par les moindres carrés

La modélisation inverse par méthodes variationnelles cherche à sélectionner la meilleure source \mathbf{x} , c'est-à-dire la source dont les prédictions correspondent le mieux au vecteur d'observations \mathbf{y} . Pour cela, il faut définir une fonction qui a pour rôle de mesurer la différence entre le vecteur d'observations et un vecteur de prédictions. La définition de cette fonction rend possible la sélection de prédictions en fonction de leur ressemblance avec les observations. Le problème de sélection de la meilleure source est alors équivalent au problème de minimisation de cette fonction, que l'on appelle fonction de coût. On utilisera la notation

$J(\mathbf{x}) = J_{\mathbf{y}}(\mathbf{x})$ pour quantifier le coût d'une source \mathbf{x} calculée à partir de ses prédictions comparées avec le vecteur d'observations \mathbf{y} . Sa définition la plus classique est basée sur la formule des moindres carrés :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^{\top} \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) \quad (2.2)$$

où $\mathbf{R} = E[\epsilon\epsilon^{\top}]$ est la matrice de covariance d'erreur liée aux mesures et au modèle.

En contexte accidentel, le nombre d'observations est très souvent limité dans les heures qui suivent un accident. Les rejets sont alors trop peu contraints. De plus, les conditions météorologiques peuvent mener à une situation d'observabilité faible d'une partie de la source. Dans ces cas, la relation source-récepteur fournie par l'équation (2.2) constitue un problème inverse mal-posé (Enting 2002).

2.2.5 Terme de régularisation

Une définition d'un problème bien posé est proposée par Hadamard 1907 comme un problème

- possible, i.e., qui possède des solutions ;
- déterminé, i.e., dont la solution est unique ;
- toujours bien posé dans le cas d'un changement infinitésimal des données.

Un problème mal posé dans notre cas correspond très fréquemment à un problème qui ne respecte pas la seconde condition, et plus précisément à un problème qui possède une infinité de solutions. Autrement dit, il s'agit très souvent d'un problème tel que, si la source est définie par un ensemble de variables noté $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$:

$$\exists i, \forall x_i \in \mathbb{E}, \mathcal{J}(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n) = C, \quad (2.3)$$

avec C une constante minimisant \mathcal{J} et \mathbb{E} l'ensemble où la variable x_i est définie (souvent \mathbb{R} ou \mathbb{R}_+^*). On parle aussi de problème mal contraint. Pour éviter cet écueil, on ajoute généralement un terme de régularisation, c'est-à-dire, on introduit des hypothèses supplémentaires sur la source.

2.2.5.1 Régularisation de Tikhonov

Également connue en statistique sous le nom de régression d'arête ("ridge regression"), la régularisation de Tikhonov (Tikhonov et Glasko 1965) est la méthode de régularisation la plus connue. Un terme $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2$ est ajouté pour assurer l'unicité de la solution trouvée par minimisation de la fonction de coût :

$$\mathcal{J}_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2 + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 \quad (2.4)$$

où \mathbf{x}_0 désigne l'espérance de \mathbf{x} , aussi appelé première estimation ou terme d'ébauche, où $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2$ désigne $\mathbf{x}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}$ soit le carré de la norme pondérée, et de même $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 = \mathbf{x}^\top \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}$. La matrice

$$\mathbf{B} = \mathbb{E} \left[(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^\top \right] \quad (2.5)$$

correspond alors à la matrice de covariance de l'ébauche.

L'unicité de la solution au problème inverse est maintenant garantie, mais deux paramètres supplémentaires ont été introduits :

- un terme d'ébauche \mathbf{x}_0 doit être choisi. En pratique, il sera souvent considéré nul. En effet, l'ébauche correspond à l'information a priori, c'est-à-dire, l'information indépendante des mesures. De fait, une ébauche nulle signifie que sans données, on considère qu'il n'y a pas de rejet. Cette pratique est explorée plus spécifiquement dans les prochains chapitres, et en particulier dans le chapitre 3 ;

- la « matrice de Tikhonov » \mathbf{B} doit être judicieusement modélisée pour le problème considéré. Les termes de cette matrice régulent le coût de la perte dû à l'écart à l'ébauche. Autrement dit, ils délimitent à quel point le terme source devrait ressembler à l'ébauche. En effet, le but est de trouver un compromis entre les deux parties de la nouvelle fonction de coût, c'est-à-dire un bon équilibre entre l'importance donnée à diminuer l'erreur d'observation, et l'importance donnée à la régularisation.

Grech et al. 2008 présentent de nombreuses manières de régulariser le problème, comme la méthode de régularisation par entropie introduite par Bocquet 2005 pour la modélisation inverse de source.

2.2.6 L'estimateur BLUE

On suppose dans cette section que l'on utilise un terme de régularisation de Tikhonov et que les variables d'intérêt de la source se réduisent au terme source \mathbf{q} . Une fois que l'on a défini notre fonction de coût, il est nécessaire de la minimiser pour trouver le terme source optimal. La fonction de coût choisie est définie et dérivable sur $\mathbb{R}^{N_{\text{imp}}}$ avec N_{imp} la taille du vecteur terme source. Afin de trouver son minimum, on calcule son gradient :

$$\nabla \mathcal{J}(\mathbf{q}) = \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H}\mathbf{q} - \mathbf{y}) + \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \quad (2.6)$$

avec \mathbf{q}_0 le terme source d'ébauche.

On peut donc en déduire le terme source qui minimise la fonction de coût. Ce terme source est appelé BLUE (best linear unbiased estimator) (Asch et al. 2016) et est noté \mathbf{q}_{blue} .

$$\mathbf{q}_{\text{blue}} = \mathbf{q}_0 + \left(\mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} + \mathbf{B}^{-1} \right)^{-1} \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{q}_0) \quad (2.7)$$

Plusieurs problèmes peuvent être rencontrés lors de l'implémentation du BLUE (Farchi 2019)

- le coût de l'inversion des matrices \mathbf{R} et \mathbf{B} peut être très important selon le nombre d'observations ou le nombre de pas de temps utilisé pour décrire le terme source ;
- les matrices de covariance d'erreur d'observation et d'ébauche \mathbf{R} et \mathbf{B} peuvent être non connues. Le problème de leur estimation est introduit dans la prochaine section 2.2.7 ;
- enfin, et c'est le problème le plus important : la positivité de la source n'est pas assurée. La méthode peut donc donner des résultats absurdes.

D'autres méthodes, comme l'algorithme de descente de gradient, sont souvent préférés à l'estimateur BLUE dans la résolution du problème inverse comme dans (Saunier et al. 2013).

Quelle que soit la méthode, il est important de reconstruire les matrices liées aux erreurs d'observation et d'ébauche \mathbf{R} et \mathbf{B} . Dans les prochaines sous-sections, nous discutons des différentes méthodes utilisées pour estimer ces deux matrices de covariance.

2.2.7 Modélisation et estimation des incertitudes

Un problème important en modélisation inverse est la quantification d'incertitudes qui inclut le problème de l'estimation des matrices \mathbf{R} et \mathbf{B} . Les matrices \mathbf{R} et \mathbf{B} peuvent être modélisées par des hyper-paramètres qui constituent autant de variables à retrouver. Pour éviter de trop complexifier le problème, une hypothèse classique consiste à choisir des matrices scalaires :

$$\mathbf{R} = r\mathbf{I}_{N_{\text{obs}}} \quad (2.8a)$$

$$\mathbf{B} = b\mathbf{I}_{N_{\text{imp}}} \quad (2.8b)$$

avec N_{obs} le nombre d'observations, et N_{imp} le nombre d'impulsions, où une impulsion correspond à un pas de temps pendant lequel le débit de rejet est considéré comme constant (une des marches de la fonction en escalier introduite dans le chapitre précédent 1 en section 1.4.

Cette modélisation revient à faire deux hypothèses :

- les termes d'erreurs sont indépendants deux à deux, i.e., les termes de covariance sont nuls. C'est une approximation importante : en effet, si différentes observations proviennent du même instrument de mesure, alors elles seront très probablement corrélées (temporellement). De plus, les erreurs d'observations tiennent aussi compte des erreurs de modélisation et de représentation (Janjić et al. 2018), qui peuvent être corrélées spatialement ;
- les termes d'erreurs sont supposés avoir une variance unique, c'est-à-dire les termes diagonaux sont tous égaux. C'est l'hypothèse d'homoscédasticité : $\forall i, r_{ii} = r$. Cette hypothèse est généralement jugée acceptable dans le cas où toutes les observations sont de même nature (Y. Liu et al. 2017). Une hypothèse un peu moins contraignante est de définir plusieurs catégories de données dans notre vecteur d'observations et de définir une variance commune pour chacune de ces catégories d'observations (Winiarek et al. 2014).

Dans les prochaines sous-sections, nous proposons deux méthodes pour estimer les hyper-paramètres r et b où l'on se restreint au cas où l'hypothèse d'homoscédasticité est respectée. La source reconstruite est très sensible aux estimations des matrices \mathbf{R} et \mathbf{B} comme cela a été montré dans le cas de Tchernobyl (Davoine et Bocquet 2007), ou dans le cas de Fukushima-Daiichi (Winiarek et al. 2011 ; Stohl et al. 2012 ; Winiarek 2014).

Deux méthodes classiques sont décrites dans la suite : les méthodes de la L-Curve (Calvetti et al. 2004) ou Zero Crossing, et Minimal Product (Hansen 1992 ; Wu et al. 2013). Cet inventaire est non exhaustif : d'autres méthodes existent comme l'algorithme Expectation-Maximisation (Y. Liu et al. 2017), ou la méthode de validation croisée générale (Golub et al. 1979).

2.2.7.1 L-Curve ou Zero-Crossing

La fonction de coût en choisissant $\mathbf{x} = \mathbf{q}$ combinée avec l'équation (2.8) s'écrit :

$$\mathcal{J}(\mathbf{q}) = (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{q})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{q}) + \lambda^2 (\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)^\top (\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \quad (2.9)$$

avec $\lambda = \frac{\tau}{b}$.

Ainsi, l'estimateur $\mathbf{q}_{\text{blue}} = \underset{\mathbf{q}}{\text{argmin}} \mathcal{J}$ ne dépend que de λ . Quand λ est élevé, l'inversion est fortement contrainte par le terme de régularisation et \mathbf{q}_{blue} reste proche de l'ébauche \mathbf{q}_0 . Au contraire, quand λ est faible, l'inversion est principalement contrainte par l'écart aux observations (cas de surapprentissage des observations ou overfitting).

La L-curve est une méthode semi-empirique qui propose un équilibre entre la minimisation du terme de régularisation et la minimisation du terme d'écart aux observations. La courbe paramétrique définie par

$$\begin{aligned} x(\lambda) &= \ln \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{q}_{\text{blue}}(\lambda)\|_2 \\ y(\lambda) &= \ln \|\mathbf{q}_{\text{blue}}(\lambda) - \mathbf{q}_0\|_2 \end{aligned} \quad (2.10)$$

est théoriquement en forme de L comme représentée sur la figure 2.2. Le point de courbure maximal (le coin du L) détermine le coefficient λ d'équilibre (Hansen 1992). Il montre clairement le compromis entre la minimisation du terme de régularisation et la minimisation du terme d'erreur d'observation. Cette méthode est aussi appelée Zero-Crossing.

2.2.7.2 Minimal Product

La méthode du produit minimal vise également à trouver un compromis optimal entre les minimisations du terme d'écart à l'ébauche et du terme d'écart aux observations (Grech et al. 2008). Le compromis optimal correspond à la valeur qui minimise la fonction produit entre la norme de l'erreur d'observation et la norme du terme de régularisation :

$$P(\lambda) = \|\mathbf{q}_{\text{blue}}(\lambda) - \mathbf{q}_0\| \cdot \|\mathbf{H}\mathbf{q}_{\text{blue}}(\lambda) - \mathbf{y}\|. \quad (2.11)$$

Dans le prochain chapitre, et maintenant que nous avons décrit le problème inverse dans sa formulation déterministe, nous allons nous intéresser à sa description dans un formalisme probabiliste. Plus particulièrement, nous décrivons comment le problème inverse peut être résolu dans le cadre bayésien, et ce que l'inférence bayésienne peut apporter au problème inverse.

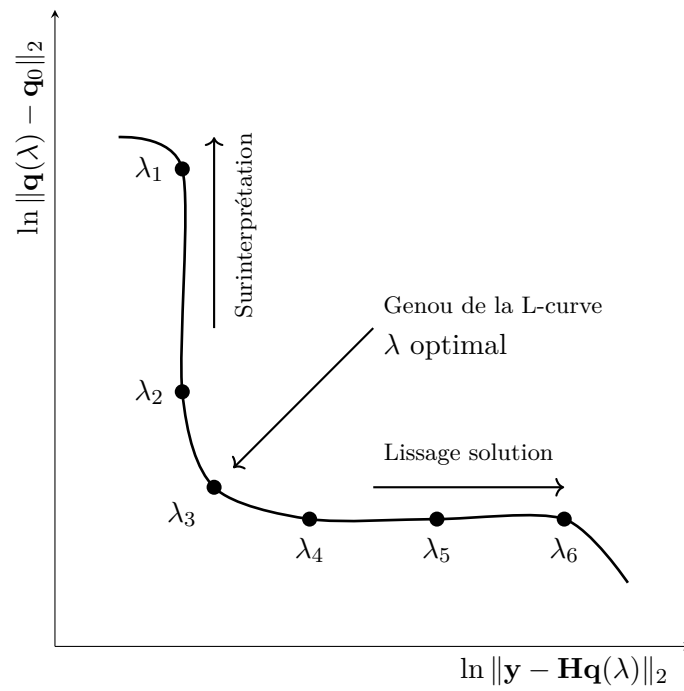


Figure 2.2 – Représentation de la méthode L-curve pour une régularisation de Tikhonov standard. En abscisse est mesuré l'écart aux observations, et en ordonnée l'écart à l'ébauche. Chaque point est noté à partir d'une valeur λ spécifique.

3 Bayes et le problème inverse

Sommaire

3.1 Philosophie bayésienne	51
3.1.1 Inteprération bayésienne des probabilités	52
3.1.2 Formule de Bayes	52
3.1.3 Possibilité d'un formalisme	53
3.1.4 Priors et information	54
3.1.5 Méthodes bayésiennes en estimation de terme source	55
3.2 Description probabiliste du problème	56
3.2.1 Définition des premières variables d'intérêt	57
3.2.2 Définition de la vraisemblance	58
3.2.3 Définitions des priors	61
3.2.4 Équivalences entre formulations variationnelles et bayésiennes	66
3.3 Méthodes de Monte-Carlo par Chaînes de Markov	70
3.3.1 L'algorithme Metropolis-Hastings	70
3.3.2 Définition des probabilités de transition	72
3.4 Application à l'évènement de détection de ruthénium 106 en Europe en 2017	76
3.4.1 Description du rejet de ^{106}Ru d'origine inconnue	76
3.4.2 Résultats	81

3.1 Philosophie bayésienne

Dans ce chapitre, nous abordons le sujet de l'inférence bayésienne et plus précisément le développement de méthodes inverses dans un cadre bayésien.

L'inférence bayésienne est une méthode dans laquelle l'information dont l'on dispose peut être explicitée précisément à l'aide de distributions de probabilité. C'est un cadre qui autorise, au sein de la procédure de reconstruction de la source, la quantification des incertitudes du problème. Or, le problème de l'estimation du terme source est sujet à de nombreuses erreurs qui peuvent provenir, par exemple :

- des bruits inhérents au processus d'acquisition des mesures environnementales,
- ou de la nature non linéaire des mécanismes physiques contrôlant la météorologie.

Par conséquent, une quantification des incertitudes est essentielle.

3.1.1 Inteprération bayésienne des probabilités

Pour étudier les incertitudes liées au problème de reconstruction de source, nous allons introduire le concept de probabilités en modélisation inverse. Plus précisément, nous allons présenter une interprétation bayésienne du problème inverse.

Il existe, en effet, historiquement, deux grandes interprétations des probabilités :

- l'interprétation fréquentiste, où la probabilité correspond à la fréquence relative d'ocurrence d'un certain évènement que l'on peut répéter un très grand nombre de fois (typiquement, un jeu de hasard) ;
- l'interprétation bayésienne, où l'on considère que l'on peut affecter des probabilités à des évènements sans forcément avoir accès à un grand nombre de réalisations des dits-évènements. Cette approche est nommée d'après le Révérend Thomas Bayes, mais a été vraiment développée selon les idées de Pierre-Simon de Laplace (Nguyên Hoang 2018).

L'interprétation bayésienne des probabilités permet donc de considérer des évènements qui ne peuvent être répétés, ou difficilement : il peut par exemple être considéré la probabilité qu'une certaine source soit à l'origine d'un certain accident nucléaire.

Ces évènements ne pouvant être répétés, les probabilités bayésiennes apparaissent comme subjectives comparées aux fréquentistes, notamment du fait de la nécessité de choisir des a prioris comme évoqué en section 3.1.4. Dans certains cas, c'est pourtant le fait de pouvoir tenir compte de ces préjugés qui rendent les probabilités bayésiennes puissantes et utiles.

3.1.2 Formule de Bayes

La formule de Bayes (Bayes 1763) peut être obtenue directement à partir d'une des définitions de la probabilité conditionnelle :

$$\overbrace{p(M|D)}^{\text{Posterior}} = \frac{\overbrace{p(D|M)}^{\text{Vraisemblance}} \overbrace{p(M)}^{\text{Prior}}}{\underbrace{p(D)}_{\text{Évidence}}}. \quad (3.1)$$

Dans cette équation, M représente typiquement un modèle et ses paramétrisations. D représente l'ensemble des données disponibles, souvent restreintes à celles qui peuvent nous aider à améliorer notre connaissance du modèle et de ses paramètres. Bien sûr, la formule de Bayes peut considérer tous types d'évènements M et D , mais dans cette thèse, nous nous consacrerons à l'évaluation de la probabilité de représentations de la réalité à partir de données.

Dans ce cas, la formule de Bayes est composée de :

- la distribution a posteriori $p(M|D)$, c'est-à-dire, la distribution de probabilité du modèle M en fonction des données D . C'est la distribution que nous souhaitons reconstruire et la solution au problème d'inférence : le posterior représente l'état final et complet (i.e., agrégeant toutes les informations et préjugés dont nous disposons) de nos connaissances. ;
- la vraisemblance $p(D|M)$ des données D compte-tenu du modèle M et de ses paramétrisations. La vraisemblance exprime la probabilité que les données D soient obtenues, en supposant que nous avons choisi un certain modèle M , et certaines paramétrisations. Il est intéressant de noter que les vraies variables ici sont le modèle M et ses paramétrisations. En effet, on parle bien de vraisemblance "en fonction" de M . Pourtant la quantité $p(D|M)$ est normalisée par rapport à D . De ce fait, la vraisemblance n'est techniquement pas une densité de probabilité ;
- l'a priori $p(M)$ sur le modèle M , c'est-à-dire l'information dont l'on dispose avant la prise en compte des données D . C'est le prior, ou préjugé. Le sujet du prior est abordé plus en détails dans la section 3.1.4 ;
- l'a priori sur les données, $p(D)$, auquel on s'intéressera peu car :
 - il est souvent difficile de calculer cet a priori ;
 - il est possible de s'en passer (car cette probabilité ne dépend que des données D fixes et pas du modèle M).

Cet a priori est un facteur d'intégration, ou constante de normalisation.

3.1.3 Possibilité d'un formalisme

Le formalisme probabiliste a un avantage fondamental sur la méthode déterministe, c'est-à-dire le formalisme variationnel évoqué en chapitre 2. Il permet de donner l'éventail des solutions possibles à un problème ainsi que les probabilités qui leur sont associées. De cette façon, l'inférence probabiliste permet de manipuler des propositions dont le degré de probabilité peut être représenté par des nombres réels.

Plus précisément, le formalisme bayésien nous permet de représenter l'état "courant" et "complet" de nos connaissances, et ainsi

- de mettre à jour cet état courant de nos connaissances à l'arrivée de nouvelles données ;
- d'incorporer et d'agréger tous nos a priori sur le modèle et ses paramètres d'une manière cohérente. Cela permet notamment de formaliser l'ajout d'un terme de régularisation (évoqué en section 2.2.5) comme un préjugé que l'on intègre au problème. Les vraisemblances de différents jeux de données peuvent aussi être assimilées de la même façon ;
- d'étudier toutes les variables d'intérêt en même temps, et donc de retrouver d'un seul coup la probabilité a posteriori jointe de toutes les variables que l'on cherche à

retrouver. C'est un avantage par rapport aux méthodes où l'on doit multiplier les algorithmes pour retrouver chaque variable indépendamment des autres. Cela permet de formaliser dans un cadre rigoureux des problèmes multivariés.

3.1.4 Priors et information

On s'intéresse ici à la définition des probabilités a priori. Le choix de ces probabilités est d'importance égale à celui de la vraisemblance, et doit être le résultat d'un examen rigoureux de l'information que l'on souhaite intégrer au problème.

3.1.4.1 Prior non-informatif

Un prior - ou préjugé - se construit à partir des croyances que l'on a à propos du système que l'on modélise. Par exemple : existe-t-il des raisons de penser que nos paramètres sont compris dans un certain domaine, ou simplement que certains domaines sont plus probables que d'autres ? Pour intégrer dans le formalisme bayésien une telle croyance, on utilise des priors dit informatifs qui vont apporter de l'information au problème et réduire sa complexité. Le choix du prior, une distribution de probabilité, permet de refléter au mieux ce préjugé.

Toutefois, il existe des variables dont on n'a aucun - ou dont on ne doit avoir aucun - préjugé. Il est alors nécessaire d'exprimer par le prior aussi peu d'information que possible. Pour exprimer cette ignorance, il est nécessaire d'utiliser un prior appelé non informatif : un prior qui exprime son ignorance sur les variables considérées.

3.1.4.2 Exemples de priors non informatifs

La distribution non-informative la plus évidente pour une variable x est la distribution uniforme sur l'ensemble des valeurs possibles prises par x (Yang et al. 1998). Néanmoins, le choix d'une distribution uniforme pose deux problèmes :

- d'abord, si la variable est définie sur \mathbb{R} , alors le prior ne sera pas une distribution puisque la distribution uniforme sur les réels n'est pas normalisable. Un tel prior est appelé "impropre". Mais c'est en général un problème mineur : on s'intéresse en statistiques bayésiennes à la distribution a posteriori et c'est cette distribution qui doit être normalisable ;
- surtout, l'a priori uniforme ne l'est que pour une paramétrisation donnée du problème. Si l'on change de paramétrisation, le changement de variables à l'aide du jacobien affecte nécessairement les priors.

Supposons par exemple que l'on s'intéresse à une variable x définie sur $[0, 1]$. Nous ne disposons que de peu d'informations sur cette variable, et nous décidons d'y associer un prior uniforme sur $[0,1]$. Supposons maintenant que l'on s'intéresse aussi à la variable x^2 sur laquelle nous n'avons pas plus d'informations, et qui est aussi définie

sur $[0,1]$. Dans ce cas, le prior uniforme sur $[0,1]$ de la variable x induit que notre nouvelle variable $s = x^2$ est beaucoup plus concentrée autour de 0 qu'autour de 1. Le choix de paramétrisation du problème (veut-on exprimer notre totale ignorance sur x ou le carré de x) est donc un choix qui exprime nécessairement une certaine connaissance, et pas seulement une ignorance.

Il existe d'autres types de priors non-informatifs qui ont le mérite de ne pas être sensibles au choix de paramétrisation du problème, c'est-à-dire qu'ils possèdent la propriété d'invariance. On peut citer :

- le prior de Jeffreys (Jeffreys 1946) que l'on décrit en détails dans le chapitre 5 ;
- le prior reposant sur le principe de maximum d'entropie. Le principe de maximum d'entropie déclare que la distribution de probabilité qui représente le mieux l'état courant des connaissances est celle avec la plus large entropie. Plus précisément, la distribution correspondant à l'entropie maximale est celle qui fait le moins d'hypothèses sur la véritable distribution des données, le principe de l'entropie maximale peut être considéré comme une application du rasoir d'Ockham (Jaynes 2003). La distribution choisie est celle qui prétend le moins être informée, ou qui admet le plus d'ignorance, au-delà des données du problème. On peut noter que la distribution de probabilité maximisant l'entropie en l'absence d'informations testables correspond à la distribution uniforme.
- Un autre prior non-informatif est décrit par Bernardo et A. F. M. Smith 2008. Le prior est construit pour maximiser à la fois l'information apportée par les données et la distance de Kullback entre le prior et le posterior. Dans les cas simples, la solution est le prior de Jeffreys.

Parfois, il n'existe pas de meilleur prior : un choix doit être fait. La formule de Bayes permet justement de faire apparaître ce choix de modélisation au grand jour. La question de l'information délivrée par les priors est étudiée par Tarantola et Valette 1982.

3.1.5 Méthodes bayésiennes en estimation de terme source

Plusieurs méthodes bayésiennes ont été développées dans le cadre du problème de l'estimation du terme source :

- Rajaona et al. 2015 développent un schéma adaptatif basé sur l'échantillonnage préférentiel (Importance Sampling), en améliorant le processus d'estimation, i.e., en tirant les leçons de précédentes séries d'échantillonnage. L'échantillonnage préférentiel est une méthode pour accélérer l'échantillonnage d'une distribution par méthode de Monte Carlo en échantillonnant selon une densité biaisée. Leur méthode est ensuite testée dans le cadre de l'expérience de Fusion Field Trials 2007 ;
- Tichý et al. 2016 proposent une méthode itérative de Bayes variationnelle sans recours à un réglage et, par conséquent, adaptée à une utilisation opérationnelle. L'algorithme

est ensuite testé à l'aide de données réelles provenant de l'expérience européenne sur les traceurs (ETEX) ;

- des algorithmes d'apprentissage automatique et d'échantillonnage par hypercube latin sont utilisés dans les travaux de Lucas et al. 2017 pour retrouver le terme source d'un gaz libéré par une centrale nucléaire côtière de Californie ;
- une autre classe de méthodes de modélisation inverse est basée sur le principe d'entropie maximale (Bocquet 2005).

Cependant, les méthodes les plus populaires d'estimation des distributions a posteriori des variables décrivant la source sont les algorithmes d'échantillonnage par méthodes de Monte Carlo à Chaîne de Markov (MCMC) :

- ces méthodes sont décrites par Delle Monache et al. 2008 qui les appliquent à une estimation stochastique de la position de la source de l'incident d'Algésiras ;
- Keats et al. 2007 échantillonnent les paramètres source d'un environnement urbain complexe en utilisant les algorithmes de Metropolis-Hastings et Hamiltonien hybride ;
- Chow et al. 2008 utilisent l'échantillonnage stochastique pour décrire le vecteur source d'un rejet en milieu urbain ;
- Yee et al. 2014 reconstruisent la position et le débit de rejet d'une installation de production d'isotopes médicaux en utilisant un algorithme Metropolis adaptatif à évolution différentielle à essais multiples qui archive les états passés ;
- Y. Liu et al. 2017 comparent plusieurs méthodes bayésiennes, y compris les méthodes MCMC, sur les accidents de Tchernobyl et Fukushima-Daiichi dans leur évaluation du terme source et des incertitudes associées.

3.2 Description probabiliste du problème

Dans notre cas spécifique, où \mathbf{x} désigne l'ensemble des variables d'intérêt qui caractérisent la source, et \mathbf{y} l'ensemble des observations disponibles, la formule de Bayes s'exprime comme suit :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y})} \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x}). \quad (3.2)$$

Dans le cadre bayésien, le problème de la reconstruction d'une source \mathbf{x} d'un rejet de radionucléides à partir d'observations \mathbf{y} est équivalent au problème visant à reconstruire la distribution a posteriori $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. Pour reconstruire cette distribution, il nous faut d'abord la définir, c'est-à-dire :

- décider quelles sont les variables d'intérêt à retrouver (et lesquelles ne le sont pas), c'est-à-dire, spécifier \mathbf{x} ;
- choisir une fonction de vraisemblance $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$;

- choisir une distribution a priori pour \mathbf{x} .

Nous traitons ces trois sujets dans les trois prochaines sections 3.2.1, 3.2.2, et 3.2.3. Une fois que la distribution a posteriori sera entièrement définie, il faudra nous intéresser au choix de l'échantillonneur, c'est-à-dire, le choix du moteur permettant de reconstruire numériquement notre distribution cible $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. C'est le sujet que nous traitons ensuite, en section 3.3.

3.2.1 Définition des premières variables d'intérêt

Un certain nombre de variables peuvent avoir leur importance lors de la caractérisation d'un rejet radioactif. Nous explicitons ci-dessous celles que nous considérons de prime abord comme les plus importantes :

- le terme source, et plus précisément la fonction du débit de rejet évoluant au cours du temps, l'objectif premier de la modélisation inverse. Cette fonction est modélisée dans le cadre de notre problème par une fonction en escaliers comme expliqué dans la section 1.4.1 du chapitre 1 et sur la figure 3.1. Chaque palier de cette fonction en escaliers correspond ainsi au rejet, constant, sur un pas de temps $\Delta_{t,\text{imp}}$, ou impulsion, décidé à l'avance.

Il est alors possible de définir un vecteur \mathbf{q} , dont chaque indice, i.e., chaque impulsion correspond à un palier de la fonction en escalier correspondante. Le pas de temps $\Delta_{t,\text{imp}}$ doit être calculé en fonction du problème, par exemple, en fonction du pas de temps des observations. Plus précisément, on s'intéresse dans ces travaux au vecteur des logarithmes des débits de rejet plutôt qu'aux débits de rejet pour des raisons expliquées dans la section 3.2.3.2 ;

- la position du rejet quand celle-ci n'est pas connue. Notons que le rejet est considéré dans cette thèse comme ayant une seule et unique origine, stable au cours du temps. La localisation est représentée par deux variables, les coordonnées : la longitude notée x_1 et la latitude notée x_2 ;
- la matrice \mathbf{R} de covariance de l'erreur d'observation qui est définie dans la section suivante.

Les autres variables décrivant le rejet sont considérées comme connues pour ne pas sur-complexifier le problème. On considère en effet la nature des radionucléides connues à l'avance, ou encore la hauteur du rejet définie comme précisé dans le chapitre 1 en section 1.3.2.

Par conséquent et pour le moment, le vecteur des variables d'intérêt que l'on cherche à reconstruire est

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, \mathbf{R}) \tag{3.3}$$

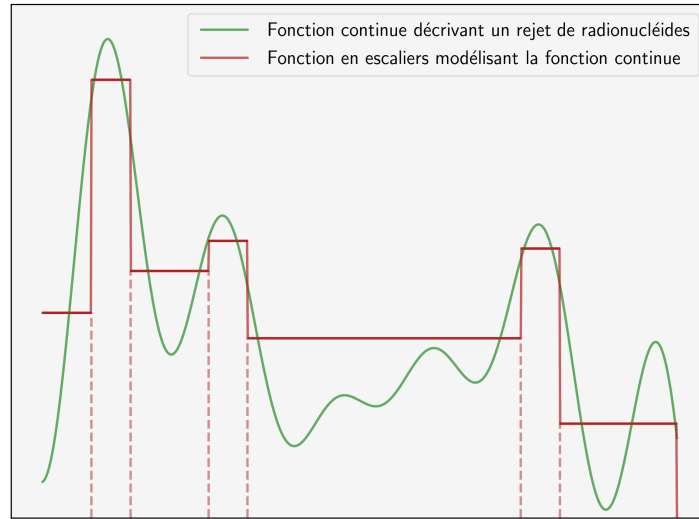


Figure 3.1 – Fonction de l'évolution temporelle du débit de rejet (en vert) et sa représentation par une fonction en escaliers (en rouge).

avec $\ln \mathbf{q}$ la notation pour

$$\ln \mathbf{q} = \ln \left(\frac{\mathbf{q}}{q_{\text{ref}}} \right) = \left[\ln \left(\frac{q_1}{q_{\text{ref}}} \right), \dots, \ln \left(\frac{q_{N_{\text{imp}}}}{q_{\text{ref}}} \right) \right] \quad (3.4)$$

un vecteur de taille N_{imp} le nombre d'impulsions, et q_{ref} un débit de rejet référence, par exemple $q_{\text{ref}} = 1 \text{Bq.s}^{-1}$. \ln est le logarithme naturel.

Dans ces travaux, nous utiliserons les termes de vecteur source, vecteur des variables décrivant la source, état, ou encore simplement variables pour désigner le vecteur \mathbf{x} des variables d'intérêt.

3.2.2 Définition de la vraisemblance

La vraisemblance est la fonction mesurant la probabilité de données \mathbf{y} selon une paramétrisation \mathbf{x} spécifique. Plus précisément, dans notre cas, la vraisemblance $\mathbf{y}|\mathbf{x}$ quantifie la différence entre les observations \mathbf{y} , par exemple des concentrations dans l'air de radionucléides, et un ensemble correspondant de concentrations modélisées à partir de l'opérateur d'observation \mathbf{H} et provenant de la source \mathbf{x} : les prédictions \mathbf{y}_S . Dans ces travaux, la notation $\mathbf{H}\mathbf{x}$ est aussi utilisée abusivement pour désigner le vecteur de prédictions.

Historiquement, la plupart des auteurs se reposent sur des statistiques gaussiennes pour décrire la fonction de vraisemblance (Yee 2008 ; Yee et al. 2014 ; Rajaona et al. 2015 ; Tichý et al. 2016). Un tel choix donne $\mathbf{y}|\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{R})$:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x})}}{\sqrt{(2\pi)^{N_{\text{obs}}} |\mathbf{R}|^{1/2}}}, \quad (3.5)$$

avec \mathbf{R} la matrice de covariance d'erreur d'observation et N_{obs} le nombre d'observations. Ici, $|\mathbf{R}|$ est équivalent à $|\det \mathbf{R}|$. On s'intéresse en particulier à cette matrice dans la section 3.2.3.3.

D'autres auteurs (Delle Monache et al. 2008 ; Senocak et al. 2008 ; Y. Liu et al. 2017 ; Saunier et al. 2019 ; Dumont Le Brazidec et al. 2020), néanmoins, ont fait le choix d'utiliser des statistiques log-normales pour quantifier la différence entre les observations et les prédictions. La loi log-normale possède en effet deux atouts majeurs par rapport à la loi normale :

- elle n'admet que les observations, ou prédictions associées, positives ce qui est cohérent avec la nature de ces objets ;
- elle permet de quantifier la différence entre les observations et les prédictions correspondantes de manière relative. Cela nous autorise ainsi à manier beaucoup plus facilement des observations d'ordres de grandeur significativement différents.

Le choix de la vraisemblance est un enjeu majeur, et sera étudié dans le chapitre 5 à la section 5.1.

Dans le cas de la loi log-normale :

$$\mathbf{y}|\mathbf{x} \sim \ln -\mathcal{N} \left(\ln \left(\frac{\mathbf{H}\mathbf{x}}{c_{\text{ref}}} \right), \mathbf{R} \right) \quad (3.6)$$

avec c_{ref} une concentration référence, par exemple $c_{\text{ref}} = 1\text{mBq.m}^{-3}$. Cela donne alors une distribution multivariable de densité :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{e^{-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mathbf{y}}{\mathbf{H}\mathbf{x}} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y}}{\mathbf{H}\mathbf{x}} \right)}}{\sqrt{(2\pi)^{N_{\text{obs}}} |\mathbf{R}|^{1/2} \prod_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \frac{y_i}{c_{\text{ref}}}}}, \quad (3.7)$$

où

$$\ln \left(\frac{\mathbf{y}}{c_{\text{ref}}} \right) = \left[\ln \left(\frac{y_1}{c_{\text{ref}}} \right), \dots, \ln \left(\frac{y_{N_{\text{obs}}}}{c_{\text{ref}}} \right) \right]. \quad (3.8)$$

Un problème émerge néanmoins de l'utilisation de la loi log-normale : son intolérance aux zéros. En effet, les observations nulles (qui correspondent aux mesures en-dessous des limites de détection) ne peuvent pas être quantifiées par des statistiques log-normales puisqu'elles reposent en dehors de leurs domaines de définition. Pour résoudre cette difficulté, il est nécessaire de définir un seuil y_t et une fonction résultante ξ_t :

$$\xi_t : \mathbf{y} \rightarrow \xi_t(\mathbf{y}) = \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{c_{\text{ref}}} \right), \quad (3.9)$$

où \mathbf{y}_t est un vecteur constant de taille N_{obs} : $\mathbf{y}_t = y_t \mathbf{1}_{N_{\text{obs}}}$ avec $\mathbf{1}_{N_{\text{obs}}}$ le vecteur unitaire de taille N_{obs} . ξ_t est alors utilisé en lieu et place de la fonction logarithmique dans la définition de la distribution log-normale (Y. Liu et al. 2017).

Avant d'assigner une valeur à y_t , nous devons comprendre son rôle et l'impact qu'aura son choix.

Une très faible valeur de y_t serait équivalent à donner une grande importance aux observations nulles. Plus spécifiquement, maximiser une vraisemblance log-normale avec un y_t très petit reviendrait prioritairement à minimiser les erreurs entre les observations nulles et les prédictions associées (ou les observations avec les prédictions associées nulles). Plus généralement, plus la valeur de y_t sera petite, plus les très petites observations auront de la valeur dans la maximisation de la vraisemblance.

Cependant, au contraire, une valeur trop grande de y_t diminuerait l'importance accordée aux observations nulles. L'objectif est de trouver un compromis acceptable.

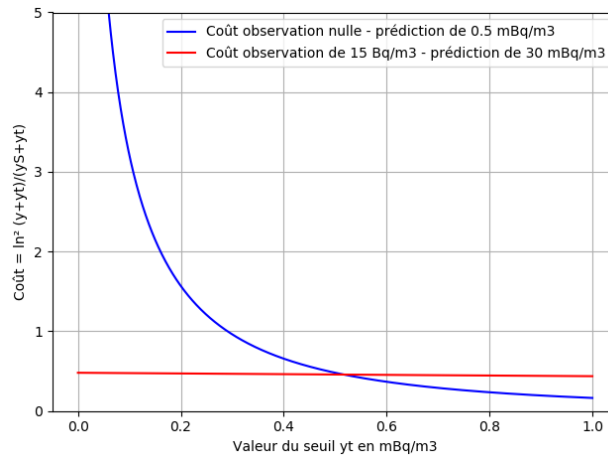


Figure 3.2 – Coût associé à une loi log-normale pour deux couples observation-prédiction selon la vraisemblance. La courbe bleue décrit le coût de l'erreur entre une observation nulle et une prédiction associée égale à $0.5 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$. La courbe orange décrit le coût de l'erreur entre une observation égale à $15 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$ et une prédiction associée égale à $30 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$.

La figure 3.2 compare le coût entre deux différences, i.e., compare l'importance donnée à l'erreur entre une observation nulle y_i et sa prédiction associée $y_{S,i}$ égale à $0.5 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$, avec l'erreur entre une observation y_j égale à $15 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$ et sa prédiction associée $y_{S,j}$ égale à $30 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$. La fonction de coût utilisée ici correspond à

$$\mathcal{J}_{y_i, y_t}(y_{S,i}) = \ln^2 \left(\frac{y_i + y_t}{(\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t} \right). \quad (3.10)$$

La raison pour laquelle nous comparons ces deux couples repose sur notre intuition que les deux erreurs $\ln^2 \left(\frac{y_i + y_t}{(\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t} \right)$ et $\ln^2 \left(\frac{y_j + y_t}{(\mathbf{H}\mathbf{x})_j + y_t} \right)$ devraient fondamentalement affecter la reconstruction de la distribution a posteriori avec une force proche, c'est-à-dire que les différences entre les couples $(y_i, y_{S,i} = (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)$ et $(y_j, y_{S,j} = (\mathbf{H}\mathbf{x})_j)$ devraient être pénalisées dans le même ordre de grandeur.

Sur la figure 3.2, on observe que le coût correspondant au couple $(y_j, y_{S,j}) = (15, 30)\text{mBq.m}^{-3}$ est constant et égal à 0.5, ce qui est cohérent avec la définition de ξ_t qui dépend du seuil seulement pour les petites concentrations. Le coût correspondant au couple $(y_i, y_{S,i}) = (0, 0.5)\text{mBq.m}^{-3}$ suit une trajectoire exponentielle décroissante. On peut observer que les deux courbes se croisent pour une valeur de seuil approximativement de 0.5 Bq.m^{-3} . Pour des valeurs plus petites que 0.1 Bq.m^{-3} , le coût du couple $(y_i, y_{S,i})$ est largement supérieur au coût du couple $(y_j, y_{S,j})$. En pratique, pour des valeurs de seuil entre 0.1 Bq.m^{-3} et 0.5 Bq.m^{-3} , les différences dans l'évaluation de la source sont très petites. Plutôt que de fixer le seuil à l'avance, une autre solution serait d'inclure son estimation dans le cadre bayésien, comme un hyperparamètre.

Le sujet du choix du seuil est discuté plus en détails dans le chapitre 5 à la section 5.1.

3.2.3 Définitions des priors

Pour rappel, un prior est une distribution de probabilité modélisant l'information indépendante du vecteur des observation que l'on souhaite intégrer au problème bayésien. Les priors présentés ci-dessous sur les différentes variables sont considérés comme indépendants les uns des autres. Ainsi, par exemple, le préjugé que l'on a de la position de la source d'un rejet est indépendant du préjugé que l'on a de la forme de la fonction temporelle du rejet.

3.2.3.1 Prior sur les coordonnées

Les coordonnées d'un rejet de radionucléides sont des variables d'intérêt quand l'origine du rejet est inconnue. Dans ce cas, il semble logique d'avoir un premier préjugé sur la délimitation d'un domaine en dehors duquel le rejet n'a aucune chance d'être issu. Puis, il y a un choix à faire parmi deux possibilités :

- le prior sur les coordonnées doit refléter notre impartialité et ne faire aucune hypothèse sur l'origine du rejet. Il semble donc raisonnable d'utiliser une distribution uniforme dans le domaine défini pour décrire notre préjugé initial :

$$x_1, x_2 \sim \mathcal{U}(x_{1,\min}, x_{1,\max}) \times \mathcal{U}(x_{2,\min}, x_{2,\max}) \quad (3.11)$$

avec \mathcal{U} la distribution uniforme, et $(x_{1,\min}, x_{1,\max})$ les longitudes min/max (ouest/est) du domaine, et $(x_{2,\min}, x_{2,\max})$ les latitudes min/max (sud/nord) du domaine. Cela donne alors :

$$p(x_1) = \begin{cases} \frac{1}{x_{1,\max} - x_{1,\min}}, & \text{si } x_{1,\min} < x_1 < x_{1,\max}; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.12)$$

De même :

$$p(x_2) = \begin{cases} \frac{1}{x_{2,\max} - x_{2,\min}}, & \text{si } x_{2,\min} < x_2 < x_{2,\max}; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.13)$$

- le prior sur les coordonnées doit refléter notre connaissance des installations nucléaires dans le domaine considéré. Un rejet important a en effet une probabilité très forte de provenir d'une installation nucléaire connue. Ce serait néanmoins un prior très erroné en cas d'activité nucléaire non déclarée ou confidentielle (militaire).

3.2.3.2 Prior sur le vecteur des débits de rejet

L'a priori sur le rejet est un a priori sur un vecteur de N_{imp} impulsions. Comme discuté par Tichý et al. 2016, les impulsions sont souvent dépendantes les unes des autres, mais nous les considérerons comme des variables aléatoires indépendantes, afin de simplifier le problème. C'est une hypothèse très classique en modélisation inverse du terme source (Winiarek et al. 2014 ; Rajaona et al. 2015 ; Y. Liu et al. 2017).

Le prior sur le vecteur des débits de rejet agit comme un prior de régularisation qui résorbe les problèmes d'estimation de sources mal définis. Ce choix est en fait équivalent au problème du choix du terme de régularisation évoqué dans le chapitre 2 et expliqué dans la section 3.2.3.3.

Plusieurs distributions peuvent être considérées afin de régulariser le problème telles que la distribution gaussienne tronquée (Winiarek et al. 2012 ; Tichý et al. 2016) ou des statistiques log-normales (Y. Liu et al. 2017) qui sont utilisées pour forcer la positivité du terme source.

Pour éviter des problèmes de symétrie, abordés dans la section 3.3.2, les variables considérées ne sont pas les débits de rejet eux-mêmes mais les logarithmes des débits de rejet. Par conséquent, on souhaite imposer un prior comme une loi normale sur les logarithmes des débits de rejet, i.e.,

$$\ln \mathbf{q} \sim \mathcal{N}(\ln \mathbf{q}_0, \mathbf{B}), \quad (3.14)$$

avec \mathbf{B} la matrice de covariance des erreurs d'ébauche de la loi normale associée à la loi log-normale et $\ln \mathbf{q}_0$ le paramètre de position.

Puisque l'on suppose que les impulsions sont à deux à deux indépendantes, on peut utiliser un prior gaussien sur chacun des débits de rejet indépendamment des autres. Le prior résultant est alors le produit de ces a priori :

$$\begin{aligned} p(\ln \mathbf{q}) &= \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} p\left(\ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}}\right) \\ &= \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{(2b\pi)^{1/2}} \left(e^{-\frac{1}{2b} \left(\ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}} - \ln \frac{q_0}{q_{\text{ref}}} \right)^2} \right) \\ &= \frac{1}{(2b\pi)^{N_{\text{imp}}/2}} \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(e^{-\frac{1}{2b} \left(\ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}} - \ln \frac{q_0}{q_{\text{ref}}} \right)^2} \right) \end{aligned} \quad (3.15)$$

en supposant que la matrice \mathbf{B} est une matrice diagonale représentée avec un seul coefficient b .

Ce qui donne, si on suppose que le logarithme de notre ébauche est nul, i.e., $\ln \frac{q_0}{q_{\text{ref}}} = 0$:

$$p(\ln \mathbf{q}) = \frac{1}{(2b\pi)^{N_{\text{imp}}/2}} e^{-\sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{2b} \left(\ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}} \right)^2}. \quad (3.16)$$

Si on applique l'opposé du logarithme à l'équation (3.16), cela conduit à un autre type de formulation qui sera introduit en section 3.2.4 :

$$-\ln(p(\ln \mathbf{q})) = \frac{1}{2b} \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}} \right)^2 + \frac{N_{\text{imp}}}{2} \ln(b) \quad (3.17)$$

où l'on a omis les constantes de normalisation.

On peut aussi souhaiter définir le prior sur les logarithmes des débits de rejet comme une loi gaussienne repliée (Tsagris et al. 2014).

Dans notre cas, et sur la base de considérations expliquées en section 4.1.3.1, nous avons besoin d'un prior qui renforce significativement la contrainte sur les rejets très importants, i.e., qui diminue significativement la probabilité de rejets très importants.

À cette fin, la distribution gamma est très appropriée. Elle s'écrit, dans notre cas comme :

$$p\left(\frac{q_i}{q_{\text{ref}}}; k, \theta\right) = \frac{\left(\frac{q_i}{q_{\text{ref}}}\right)^{k-1} e^{-\frac{q_i}{q_{\text{ref}}}\theta}}{\theta^k \Gamma(k)}, \quad (3.18)$$

où $q_{\text{ref}} = 1 \text{ Bq.s}^{-1}$. k est le caractère dit de forme (shape), et θ est le caractère dit d'échelle (scale) (Winiarek et al. 2011).

Le prior devrait être défini de sorte que le rejet total ne puisse dépasser 10^{18} Bq pour des accidents mineurs. À fin de comparaison, le rejet total de ^{137}Cs rejeté pendant l'accident de Fukushima-Daiichi est évalué à 10^{16} Bq et le total d'iode ^{131}I à 10^{17} Bq . Supposons que nous travaillons avec des impulsions journalières, la limite en amplitude d'un accident mineur devrait être $10^{18}/86400 \approx e^{30} \text{ Bq.s}^{-1}$.

Dans la loi gamma, θ est le paramètre de contrôle qui nous intéresse particulièrement. θ correspond au paramètre de diffusion de la distribution. Il doit être fixé à $e^{30} \text{ Bq.s}^{-1}$ (pour des accident mineurs).

Comme nous considérons les logarithmes des débits de rejet en tant que variables d'intérêt, nous devons définir notre prior sur $\ln \mathbf{q}$. Si $X \sim \Gamma(k, \theta)$ alors :

$$f_X(x; k, \theta) = \frac{x^{k-1} e^{-x/\theta}}{\theta^k \Gamma(k)} \mathbf{I}_{[0, +\infty[}(x). \quad (3.19)$$

Si $Y = g(X) = \ln(X)$ alors nous avons, avec le jacobien associé $\frac{dX}{dY} = e^Y$:

$$\begin{aligned} f_Y(y; k, \theta) &= f_X(g^{-1}(y)) \left| \frac{dx}{dy} \right| \\ &= \frac{e^{yk} e^{-e^y/\theta}}{\theta^k \Gamma(k)}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Ce nouveau prior est parfois défini comme une distribution log-gamma. En ce qui concerne le paramètre de forme k , fixer $k > 0$ est équivalent à réduire la probabilité de rejets mineurs comme montré sur la figure 3.3 ce qui n'est pas quelque chose que nous désirons. Nous devons par conséquent définir $k \ll 1$ car, afin que la fonction de coût associée soit définie pour de faibles débits de rejet, le paramètre de forme k ne pouvant être nul (ni négatif).

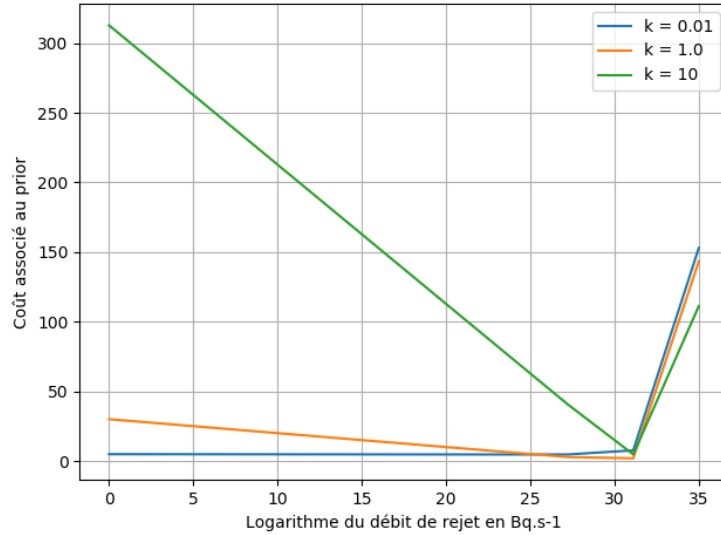


Figure 3.3 – Coût du prior sur les logarithmes des débits de rejet pour $k = 0.01$, $k = 1$ ou $k = 10$.

Ainsi :

$$\begin{aligned}
 f_{\ln(\mathbf{q})} \left(\ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}}; k, \theta \right) &= \frac{e^{k \ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}}} e^{-e^{\ln \frac{q_i}{q_{\text{ref}}}/\theta}}}{\theta^k \Gamma(k)} \\
 &= \frac{\left(\frac{q_i}{q_{\text{ref}}} \right)^k e^{-\frac{q_i}{q_{\text{ref}}}/\theta}}{\theta^k \Gamma(k)}.
 \end{aligned}
 \tag{3.21}$$

Les deux distributions gamma et log-gamma sont fondamentalement les mêmes, mais diffèrent sur la valeur des paramètres qui les définissent. Nous devons fixer

$$\theta = \ln(\theta_{\text{Gamma}}) = \ln(e^{30}) = 30.
 \tag{3.22}$$

À titre de comparaison, un prior log-gamma avec des paramètres $k, \ln \theta$ sur le vecteur des logarithmes des débits de rejets est équivalent à un prior gamma de paramètres $k - 1, \theta$ sur le vecteur des débits de rejet.

On peut noter qu'imposer notre ignorance sur les logarithmes des débits de rejet plutôt que sur les débits de rejet est équivalent à admettre que nous ignorons l'ordre de grandeur des rejets. Si nous avons un prior uniforme sur les débits de rejet eux-mêmes, nous donnerions une probabilité beaucoup plus importante à des rejets importants qu'à de faibles rejets.

3.2.3.3 Prior sur la matrice de covariance d'erreur d'observation

Comme précisé précédemment, nous considérons \mathbf{R} comme une variable à échantillonner. Par conséquent, nous devons définir un prior sur les différentes variables qui composent cette matrice. Avant de définir ce prior, nous devons modéliser la matrice \mathbf{R} . Notons tout d'abord que la matrice \mathbf{R} prend en compte les trois sources traditionnelles d'erreurs (e.g., Rajaona et al. 2015) :

- l'erreur de mesure, qui prend son origine dans les biais ou le bruit inhérent à la construction des capteurs ;
- l'erreur de modélisation : la matrice \mathbf{H} qui résout l'équation de transport, ou opérateur d'observation, est calculée à partir des champs météorologiques et du modèle de dispersion atmosphérique qui sont sources d'incertitudes parfois importantes ;
- l'erreur de représentation, due à l'interpolation temporelle inhérente à la représentation du rejet par une fonction en escalier et à la représentation spatiale des observations dans la maille qui les contient.

Jusqu'au chapitre 5, nous modéliserons \mathbf{R} comme $r\mathbf{I}$ avec r un réel positif. \mathbf{I} est définie ici comme la matrice identité, une matrice carrée de taille $N_{\text{obs}} \times N_{\text{obs}}$. La pertinence d'un tel choix est étudiée puis des alternatives sont proposées dans le chapitre 5 à la section 5.2. Dans cette partie, et pour des raisons de simplicité, nous utilisons cette approximation.

Nous pouvons maintenant définir notre a priori sur l'hyperparamètre r . Nous l'échantillonons au sein d'un cadre hiérarchique bayésien :

$$p(\mathbf{x}_S, r | \mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{x}_S, r)p(\mathbf{x}_S, r)}{p(\mathbf{y})} = \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{x}_S, r)p(\mathbf{x}_S | r)p(r)}{p(\mathbf{y})} = \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{x}_S, r)p(\mathbf{x}_S)p(r)}{p(\mathbf{y})}, \quad (3.23)$$

avec $\mathbf{x}_S = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q})$.

Nous avons choisi d'exprimer notre ignorance sur les variances plutôt que sur les écarts type (voir section 3.1.4.2), car ce sont les quantités que l'on manipule effectivement dans les équations de cette thèse.

Le prior sur la variance r peut simplement être défini comme une distribution uniforme sur \mathbb{R}_+^* (dans les faits, on considérera plutôt une distribution uniforme sur un intervalle défini entre 0 et une valeur très élevée, afin de rendre notre prior normalisable). Cela donne :

$$p(r) = \begin{cases} \frac{1}{r_{\max}}, & \text{if } 0 < r < r_{\max}; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.24)$$

Un prior de Jeffrey peut sembler plus approprié, car il possède la propriété d'invariance. Un tel a priori a été proposé par Y. Liu et al. 2017.

Dans le cas d'une variance, il est défini comme

$$\begin{cases} \sqrt{\frac{1}{r}}, & \text{if } r > 0; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.25)$$

Ainsi, un tel prior favorise les variances plus petites. Nous verrons dans le chapitre 5 que nous sous-estimons grandement la variance de vraisemblance r . Utiliser ce prior réduirait une valeur déjà sous-estimée, et donc nous ne pouvons utiliser ce prior sans dégrader encore la qualité de notre distribution a posteriori.

3.2.4 Équivalences entre formulations variationnelles et bayésiennes

Maintenant que nous avons défini les variables d'intérêt, les priors associés, et la fonction de vraisemblance, et avant de présenter la méthode d'échantillonnage que nous utiliserons, nous proposons dans cette partie de comparer les formulations variationnelles décrites dans le chapitre 2 et bayésiennes décrites dans ce chapitre.

Nous avons défini la distribution de vraisemblance et les priors ce qui nous permet d'accéder à la distribution a posteriori : la distribution jointe de

$$\mathbf{x} = \left(x_1, x_2, \ln \frac{q_1}{q_{\text{ref}}}, \dots, \ln \frac{q_{N_{\text{imp}}}}{q_{\text{ref}}}, r \right) \quad (3.26)$$

dépendante de \mathbf{y} . Nous montrons dans cette sous-section que les formulations variationnelles et probabilistes sont en fait équivalentes, et sont simplement inférées à partir d'un paradigme différent (en fait, un paradigme variationnel moins rigoureux). Autrement dit, les formulations du problème en fonctions de probabilité ou en fonctions de coût sont équivalentes.

Pour montrer cette équivalence, nous redéfinissons la fonction de coût J introduite dans le chapitre 2 comme

$$\begin{aligned} \mathcal{J} : \mathbf{x} &\rightarrow \mathcal{J}(\mathbf{x}) = -\ln p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ &= -\ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})p(\mathbf{y}) \\ &= -\ln p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) - \ln p(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.27)$$

qui correspond à la partie variable en \mathbf{x} de la distribution a posteriori $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. On notera dans la suite $\mathcal{J}(\mathbf{x})$ le coût d'une source \mathbf{x} .

Supposons maintenant que nous décrivons la vraisemblance à partir de statistiques gaussiennes, que nous imposons un prior gaussien sur les débits de rejet, et uniforme sur les coordonnées et la variance de la fonction de vraisemblance. Dans ce paragraphe, le vecteur source est ainsi défini comme :

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \mathbf{q}, r). \quad (3.28)$$

Dans ce cas, la distribution a posteriori s'écrit

$$\begin{aligned}
 p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto & \frac{e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x})}}{\sqrt{(2\pi)^{N_{\text{obs}}}} |\mathbf{R}|^{1/2}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\mathbf{q}^\top \mathbf{B}^{-1}\mathbf{q}}}{|\mathbf{B}|^{1/2} (\sqrt{2\pi})^{N_{\text{imp}}}} \frac{1}{r_{\text{max}}} \mathbf{1}_{r>0} \\
 & \times \frac{1}{x_{1,\text{max}} - x_{1,\text{min}}} \mathbf{1}_{x_1 \in [x_{1,\text{min}}, x_{1,\text{max}}]} \frac{1}{x_{2,\text{max}} - x_{2,\text{min}}} \mathbf{1}_{x_2 \in [x_{2,\text{min}}, x_{2,\text{max}}]}.
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

Le coût d'une source étant calculé à partir du logarithme de sa probabilité, il n'est défini que pour des probabilités non nulles. On ne dérive donc pas le coût associé aux fonctions indicatrices. Nous expliquons pourquoi ça ne pose pas de problèmes en section 3.3.2.1. La fonction de coût associée s'écrit alors

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}(\mathbf{x}) = & \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln(2\pi) + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}| \\
 & + \frac{1}{2}\mathbf{q}^\top \mathbf{B}^{-1}\mathbf{q} + \frac{N_{\text{imp}}}{2} \ln(2\pi) + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{B}| \\
 & + \ln(r_{\text{max}}) + \ln(x_{1,\text{max}} - x_{1,\text{min}}) + \ln(x_{2,\text{max}} - x_{2,\text{min}}).
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

Les coûts de sources \mathbf{x} seront uniquement calculés dans le cadre d'une comparaison avec les coûts d'autres sources. On peut donc retirer de la formule tous les paramètres indépendants de \mathbf{x} qui sont dans le cadre des probabilités des constantes de normalisation. Cela donne, en multipliant par deux la fonction de coût :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \ln |\mathbf{R}| + \mathbf{q}^\top \mathbf{B}^{-1}\mathbf{q} + \ln |\mathbf{B}|. \tag{3.31}$$

En considérant \mathbf{R} constant, i.e., $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \mathbf{q})$, $\ln |\mathbf{R}|$ devient une constante de normalisation et donc :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \mathbf{q}^\top \mathbf{B}^{-1}\mathbf{q}, \tag{3.32}$$

ce qui est exactement la formulation variationnelle par les moindres carrés avec régularisation de Tikhonov présentée dans le chapitre 2.

Si nous définissons maintenant la vraisemblance avec des statistiques log-normales et un seuil y_t , et le prior sur les logarithmes des débits de rejet comme une distribution log-Gamma, la distribution a posteriori s'écrit

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto \frac{e^{-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)}}{\sqrt{(2\pi)^{N_{\text{obs}}}} |\mathbf{R}|^{1/2} \prod_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \frac{y_i}{c_{\text{ref}}}} \prod_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{\left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right)^k e^{-\left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right) / \theta}}{\theta^k \Gamma(k)} \tag{3.33}$$

où nous n'avons cette fois pas dérivé les coûts associés aux priors sur les coordonnées ou la variance de l'erreur d'observation par souci de simplicité. La partie de la fonction de coût

associée au prior s'écrit

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_{\text{prior}}(\ln \mathbf{q}) &= -\ln \prod_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{\left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}}\right)^k e^{-\left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}}\right)/\theta}}{\theta^k \Gamma(k)} \\ &= \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \left(-k \ln \left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right) + \left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right) / \theta + k \ln(\theta) + \ln \Gamma(k) \right),\end{aligned}\tag{3.34}$$

tandis que le coût associé à la vraisemblance s'écrit

$$\mathcal{J}_{\text{likelihood}}(\mathbf{x}) = -\ln \frac{e^{-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)}}{\sqrt{(2\pi)^{N_{\text{obs}}} |\mathbf{R}|^{1/2} \prod_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \left(\frac{y_i + y_t}{c_{\text{ref}}} \right)}},\tag{3.35}$$

c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_{\text{likelihood}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right) + \frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln(2\pi) \\ &\quad + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}| + \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \ln \left(\frac{y_i + y_t}{c_{\text{ref}}} \right).\end{aligned}\tag{3.36}$$

Les hyperparamètres θ , k , N_{obs} et l'ensemble des observations \mathbf{y} sont tous définis antérieurement à la reconstruction bayésienne de la source. En retirant toutes les parties de normalisation, c'est-à-dire celles non-connexes à \mathbf{x} on obtient

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, \mathbf{R}) &= \mathcal{J}_{\text{likelihood}}(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r) + \mathcal{J}_{\text{prior}}(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r) \\ &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right) \\ &\quad + \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \left(-k \ln \left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right) + \left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right) / \theta \right) + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}|.\end{aligned}\tag{3.37}$$

Si de plus, on modélise \mathbf{R} par $r\mathbf{I}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, \mathbf{R}) &= \frac{1}{2r} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right) \\ &\quad + \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \left(-k \ln \left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right) + \left(\frac{q_j}{q_{\text{ref}}} \right) / \theta \right) + \frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln(r)\end{aligned}\tag{3.38}$$

qui est la fonction de coût utilisée en section 3.4 et dans le chapitre 4.

Pour terminer, nous dérivons le coût d'un prior gaussien sur les logarithmes des débits de rejet qui est utilisé plus tard dans le chapitre 6.

$$p(\ln \mathbf{q}) = \frac{e^{-\frac{1}{2} \ln \mathbf{q}^\top \mathbf{B}^{-1} \ln \mathbf{q}}}{|\mathbf{B}|^{1/2} (2\pi)^{N_{\text{imp}}/2}},\tag{3.39}$$

où N_{imp} est le nombre d'impulsions, défini comme le nombre de débits de rejet indépendants du temps, c'est-à-dire, la taille du vecteur \mathbf{q} . Le coût correspondant s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_{\text{prior}}(\ln \mathbf{q}) &= \frac{1}{2} \ln \mathbf{q}^\top \mathbf{B}^{-1} \ln \mathbf{q} + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{B}| \\ &= \frac{1}{2b} \ln \mathbf{q}^\top \ln \mathbf{q} + \frac{N_{\text{imp}}}{2} \ln |b|,\end{aligned}\tag{3.40}$$

avec $\mathbf{B} = b\mathbf{I}$.

Maintenant que le problème bayésien est totalement défini, c'est-à-dire que la distribution conditionnelle $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ est défini, nous nous intéressons à la manière dont nous allons reconstruire cette distribution. Dans la prochaine partie, on s'intéresse à l'échantillonnage par méthodes MCMC.

3.3 Méthodes de Monte-Carlo par Chaînes de Markov

Dans cette section, nous présentons les méthodes de Monte Carlo par Chaînes de Markov (MCMC). Les méthodes MCMC sont une classe de méthodes d'échantillonnage (e.g., Gilks et al. 1995) reposant sur le parcours de chaînes de Markov ayant pour loi stationnaire une distribution que l'on désire échantillonner.

Une chaîne de Markov $(Q_t)_{t \in T}$ est un modèle stochastique décrivant une suite d'évènements possibles (ou de variables aléatoires) où la probabilité de chaque évènement dépend uniquement de l'état lié à l'évènement précédent. Plus précisément :

$$P(Q_{t+1}|Q_{1:t}) = P(Q_{t+1}|Q_t). \quad (3.41)$$

Les chaînes de Markov, construites d'une certaine manière, peuvent converger vers une distribution cible. Le principe des méthodes MCMC est de construire une chaîne de Markov qui converge vers la distribution a posteriori désirée $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. De ce fait, par succession de marches aléatoires, une telle chaîne de Markov va échantillonner la distribution invariante. Un nombre suffisant d'échantillons suffit alors à décrire $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$.

3.3.1 L'algorithme Metropolis-Hastings

L'algorithme de Metropolis-Hastings (MH) est une méthode MCMC particulièrement populaire (Hastings 1970). L'algorithme repose sur la théorie des processus de Markov qui établit deux conditions nécessaires à l'existence et l'unicité d'une distribution stationnaire vers laquelle la chaîne de Markov convergerait :

- l'ergodicité du processus Markovien, afin d'assurer l'unicité de la distribution invariante ;
- la balance détaillée, condition suffisante, mais non nécessaire, qui assure l'existence de la distribution stationnaire.

L'algorithme de Metropolis-Hastings repose sur l'idée de construire le processus Markovien à partir de la condition de la balance détaillée. Appelons $P_{\mathbf{y}} : \mathbf{x} \rightarrow p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ la distribution cible, et \mathbf{x}' un ensemble de variables engendré à partir d'un autre ensemble de variables \mathbf{x} , la balance détaillée s'écrit :

$$P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x})P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) = P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{x}')P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'). \quad (3.42)$$

On peut décomposer la probabilité $P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x})$ d'engendrer \mathbf{x}' à partir de \mathbf{x} comme le produit de deux composants :

$$P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}'|\mathbf{x})A_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x}), \quad (3.43)$$

avec g la probabilité que le vecteur \mathbf{x}' soit proposé par notre processus Markovien étant donné l'état actuel \mathbf{x} , et $A_{\mathbf{y}}$ la probabilité que le vecteur \mathbf{x}' soit accepté étant donné l'état

courant \mathbf{x} . On a alors :

$$\frac{A_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x})}{A_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{x}')} = \frac{P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}')g(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x})g(\mathbf{x}'|\mathbf{x})}. \quad (3.44)$$

Pour respecter la condition de la balance détaillée, il faut donc que la probabilité d'acceptation $A_{\mathbf{y}}$ soit définie de manière à satisfaire l'égalité de l'équation (3.44). Un choix classique est

$$A_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) = \min \left(1, \frac{P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}')g(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x})g(\mathbf{x}'|\mathbf{x})} \right) = \min \left(1, \frac{p(\mathbf{x}'|\mathbf{y})g(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{p(\mathbf{x}|\mathbf{y})g(\mathbf{x}'|\mathbf{x})} \right). \quad (3.45)$$

On peut dériver l'algorithme de Metropolis-Hastings à partir de cette définition. La chaîne de Markov est initialisée avec un ensemble de variables initial \mathbf{x} et on itère suivant trois étapes :

- engendrer un nouveau candidat \mathbf{x}' à partir de l'état précédent \mathbf{x}_i et en fonction de la probabilité de transition (prédéfinie) $g : \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'$;
- calculer le taux d'acceptation correspondant $\alpha_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x}_i)$ dérivé de l'équation (3.44) :

$$\alpha_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x}_i) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}')p(\mathbf{x}')g(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}')}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i)p(\mathbf{x}_i)g(\mathbf{x}'|\mathbf{x}_i)}, \quad (3.46)$$

où l'on peut noter que la connaissance de $p(\mathbf{y})$ n'est pas nécessaire car s'annulant dans la définition du taux d'acceptation ;

- accepter ou rejeter le candidat :
 - engendrer $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$;
 - si $u \leq \alpha_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x}_i)$: accepter et fixer $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}'$;
 - si $u > \alpha_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}'|\mathbf{x}_i)$: rejeter et fixer alors $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i$.

Les échantillons représentant la distribution à échantillonner sont alors les états successifs x_i de la chaîne de Markov engendrés puis acceptés tout au long de la procédure. Dans la suite, on choisira systématiquement des probabilités de transition g symétriques afin de simplifier les équations.

L'algorithme de Metropolis-Hastings peut aisément être transposé dans le cadre variationnel, si l'on note que la condition d'acceptation associée est définie comme

$$\ln(u) \leq \ln(\alpha) = \mathcal{J}(\mathbf{x}) - \mathcal{J}(\mathbf{x}'), \quad (3.47)$$

si l'on utilise des probabilités de transition réversibles, c'est-à-dire :

$$\forall \mathbf{x}_i, \mathbf{x}', g(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}') = g(\mathbf{x}'|\mathbf{x}_i). \quad (3.48)$$

Puisque $\ln(u) \leq 0$, on peut par exemple noter qu'un candidat est toujours accepté dans le cas où son coût est inférieur au coût de l'état précédent.

Finalement, il doit être noté que dans la procédure MCMC d'échantillonnage, les premiers échantillons ne sont en général pas utilisés. Ces premiers échantillons représentent le "burn-in", c'est-à-dire qu'ils sont "brûlés" afin de laisser le temps aux chaînes de Markov d'entrer dans une région à forte probabilité, un endroit où les états de la chaîne de Markov sont plus représentatifs de la distribution invariante.

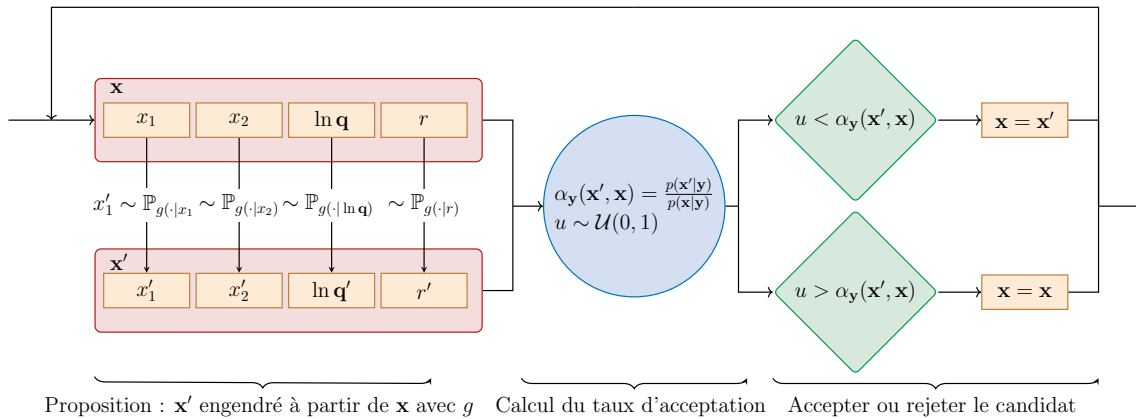


Figure 3.4 – Algorithme de Metropolis-Hastings pour un état $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r)$.

3.3.2 Définition des probabilités de transition

Il est nécessaire de définir les probabilités de transition utilisées dans la stratégie d'échantillonnage. On peut noter que, sous réserve de la bonne application de l'algorithme, le choix des distributions de probabilité de transition n'a pas d'impact sur la nature de la distribution invariante échantillonnée. Cependant, l'efficacité, à savoir, la rapidité de l'algorithme à converger puis à tirer suffisamment d'échantillons, repose en grande partie sur le choix des probabilités de transition.

La réversibilité des probabilités de transition, $g(\mathbf{x}|\mathbf{x}') = g(\mathbf{x}'|\mathbf{x})$, est un atout dans cette recherche d'efficacité. Un grand nombre de distributions partagent cette propriété. Nous utilisons la loi normale repliée ou la loi gaussienne pour définir nos propres transitions. La densité de probabilité de la loi normale repliée est :

$$f(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(x+\mu)^2}{2\sigma^2}} \right) \mathbf{1}_{\{x \geq 0\}}, \quad (3.49)$$

avec μ la moyenne de la distribution et σ^2 la variance de la loi normale associée. La distribution normale repliée basique est repliée en 0, mais on peut tout à fait définir une distribution similaire repliée sur un autre point.

Le raisonnement qui sous-tend l'utilisation de cette distribution est le suivant : supposons que nous échantillonnons à partir d'une variable positive x , ce qui signifie que nous avons

fixé une probabilité a priori au préalable sur x telle que $p(x \leq 0) = 0$. Avec un tel prior, une étape MH faisant une proposition x' négative serait systématiquement une étape perdue puisque la proposition serait systématiquement rejetée. Ce serait donc une perte de temps. En fixant une distribution normale repliée comme probabilité de transition de x , on s'assure que la proposition x' ne sera jamais négative. Par conséquent, du temps de calcul est épargné.

On note que les probabilités de transition suivantes sont définies indépendamment pour chaque composante du vecteur source \mathbf{x} de sorte que pour deux variables w et v décrivant la source \mathbf{x} , on a :

$$g((w', v')|(w, v)) = g(w'|w)g(v'|v). \quad (3.50)$$

3.3.2.1 Probabilité de transition des coordonnées

Lorsque l'emplacement de la source est inconnu, la probabilité de transition sur la coordonnée longitude x_1 ou la coordonnée latitude x_2 peut être décrite comme une distribution gaussienne repliée avec un écart-type σ_{x_1} ou σ_{x_2} et de telle sorte que les coordonnées soient limitées dans le domaine où nous supposons que la source est possiblement située. Cela veut dire que nous procédons à deux pliages de la loi normale. Ces limites dépendent nécessairement du cas étudié. En pratique, on utilisera $\sigma_{x_1} = \sigma_{x_2}$.

Puisque nous sommes sur un domaine fini, et que la loi normale repliée est une distribution définie sur un domaine infini, la distribution de transition que nous utilisons n'est pas exactement une distribution normale repliée. En pratique, puisque notre domaine de définition des coordonnées est bien plus grand que nos variances de transition, cela n'a aucune conséquence.

3.3.2.2 Probabilité de transition des logarithmes des débits de rejets

En ce qui concerne la probabilité de transition du terme source, supposons tout d'abord que nous utilisons le vecteur des débits de rejets \mathbf{q} comme variable. En raison de la large gamme de valeurs que les rejets peuvent avoir, les statistiques log-normales sont très pratiques. Elles ont en outre l'avantage d'assurer la positivité des rejets. Par conséquent, on peut utiliser une distribution log-normale à plusieurs variables :

$$\mathbf{q}'|\mathbf{q}_i \sim \log - \mathcal{N}(\ln(\mathbf{q}_i), \Sigma_{\mathbf{q}}), \quad (3.51)$$

avec \mathbf{q}' la proposition tirée à partir de \mathbf{q}_i , et $\Sigma_{\mathbf{q}}$ la matrice de covariance associée. Dans ce cas, nous avons :

$$g(\mathbf{q}_{i+1}|\mathbf{q}_i) = \frac{e^{-\frac{1}{2} \ln\left(\frac{\mathbf{q}_{i+1}}{\mathbf{q}_i}\right)^\top \Sigma_{\mathbf{q}}^{-1} \ln\left(\frac{\mathbf{q}_{i+1}}{\mathbf{q}_i}\right)}}{(2\pi)^{\frac{N_{\text{imp}}}{2}} |\Sigma_{\mathbf{q}}|^{1/2} \prod_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{q_{i+1}^j}{q_{\text{ref}}}}, \quad (3.52)$$

avec $\Sigma_{\mathbf{q}}$ qui peut être considérée comme diagonale, puisque l'on suppose que les rejets sont deux à deux indépendants, et égal à $\sigma_q \mathbf{I}$. En conséquence, chaque impulsion dépend uniquement de sa valeur précédente. Cela entraîne

$$\frac{g(\mathbf{q}_{i+1}|\mathbf{q}_i)}{g(\mathbf{q}_i|\mathbf{q}_{i+1})} = \frac{\prod_{j=1}^{N_{\text{imp}}} q_i^j}{\prod_{j=1}^{N_{\text{imp}}} q_{i+1}^j}, \quad (3.53)$$

qui fait apparaître une dissymétrie qui doit être prise en compte dans la définition du taux d'acceptation de l'algorithme MH, et qui en pratique ralentit l'algorithme. Cette dissymétrie explique pourquoi nous avons choisi d'utiliser les logarithmes des débits de rejet plutôt que les débits de rejet eux-mêmes comme variables. Il est aussi plus aisé de travailler sur les débits de rejet en ordre de grandeur.

On utilisera une probabilité de transition gaussienne de variance unique et commune $\sigma_{\ln \mathbf{q}}$ pour chaque logarithme d'un débit de rejet.

Le choix d'une distribution Gamma pourrait aussi être considéré :

$$\mathbf{q}_{i+1}|\mathbf{q}_i \sim \Gamma\left(\frac{\mathbf{q}_i}{\sigma_q}, \Sigma_{\mathbf{q}}\right), \quad (3.54)$$

avec $\Sigma_{\mathbf{q}} = \sigma_q \mathbf{I}$ et ainsi $E[\mathbf{q}_{i+1}|\mathbf{q}_i] = \frac{\mathbf{q}_i}{\sigma_q} \sigma_q = \mathbf{q}_i$.

3.3.2.3 Probabilité de transition de la variance des erreurs d'observation

Dans le cas où nous modélisons \mathbf{R} comme une matrice proportionnelle à la matrice identité $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$, la probabilité de transition de l'hyperparamètre r doit assurer sa positivité. Les statistiques log-normales sont là encore bien adaptées mais, contrairement aux rejets, la plage de valeurs au sein de laquelle l'hyperparamètre r évolue est très restreinte. En effet, \mathbf{R} est la matrice de covariance d'une distribution log-normale et, en tant que telle, r est un paramètre sans dimension représentant la variance des erreurs entre les observations et les prédictions. De fait, l'ordre de grandeur de r reste globalement le même. Nous avons choisi d'utiliser une distribution normale repliée définie dans les sections précédentes.

3.3.2.4 Définition des variances des probabilités de transition

Il reste à définir les variances de nos différentes probabilités de transition, à savoir choisir σ_{x_1} , σ_{x_2} , $\sigma_{\ln \mathbf{q}}$, σ_r . Pour définir ces variances, une façon classique de procéder est de les choisir de telle sorte que le taux d'acceptation converge vers une valeur proche de 0.234, qui est le taux d'acceptation optimal pour accélérer la convergence sous certaines hypothèses (Roberts et al. 1997).

L'idée est donc de suivre le principe de Boucles d'or : les variances doivent être définies ni trop grandes, sinon le taux d'acceptation serait trop bas, ni trop hautes, sinon le taux d'acceptation serait trop élevé.

On peut noter que le choix de ces variances n'affecte que la vitesse de convergence des chaînes de Markov, et non la forme des distributions invariantes reconstruites.

3.4 Application à l'évènement de détection de ruthénium 106 en Europe en 2017

Dans cette partie, nous allons appliquer les méthodes de modélisations inverses bayésiennes du terme source introduites dans ce chapitre afin de reconstruire les distributions a posteriori des variables décrivant la source d'un rejet d'origine inconnue de ruthénium 106, ou ^{106}Ru , en Europe en automne 2017.

3.4.1 Description du rejet de ^{106}Ru d'origine inconnue

Nous introduisons ici l'évènement qui constituera notre cas d'application dans les chapitres 3, 4, et dans la majeure partie du chapitre 5.

3.4.1.1 Contexte

Au cours des mois de septembre et octobre 2017, de petites quantités de ^{106}Ru ont été détectées en Europe par plusieurs réseaux impliqués dans la surveillance de la contamination radioactive atmosphérique. Bien que les niveaux de concentration de quelques milliBecquerels par mètre cube d'air aient été trop faibles pour poser un problème sanitaire ou environnemental, la détection à une échelle continentale a suggéré que le terme source devait être assez élevé.

L'emplacement de la source n'étant pas confirmé, des recherches ont été effectuées pour retrouver la zone de rejet, estimer la quantité de ^{106}Ru rejetée, ainsi que l'heure et la durée du rejet. Plusieurs autorités de sûreté nucléaire dont l'IRSN soupçonnent le complexe nucléaire de Maïak, située en Fédération de Russie, d'être la source du rayonnement (Saunier et al. 2019).

3.4.1.2 Travaux

Plusieurs méthodes ont été utilisées pour estimer la source du ^{106}Ru :

- I. Kovalets et Romanenko 2017 et I. V. Kovalets et al. 2020 proposent de retrouver l'emplacement de la source en se basant sur des méthodes par corrélations entre les observations et l'ensemble de prédictions correspondantes produites par le modèle ;
- Sørensen 2018 applique des techniques de modélisation inverse pour retrouver la source et le moment du rejet ;
- la source est reconstituée dans les travaux de Shershakov et al. 2019 en simulant la transition inversée dans le temps des traceurs à partir de sources virtuelles situées sur les sites de mesure : l'emplacement le plus probable est évalué dans le sud ou le centre de l'Oural ;

- Saunier et al. 2019 appliquent des méthodes de modélisation inverse pour reconstruire la source de ^{106}Ru en utilisant des techniques variationnelles, et identifient le sud de l'Oural comme étant le lieu géographique le plus probable de l'accident pour un rejet total de 250 TBq;
- la localisation, le terme source et les erreurs sont également reconstruites par Dumont Le Brazidec et al. 2020, Tichý et al. 2020 et Western et al. 2020 en utilisant des méthodes bayésiennes.

3.4.1.3 Jeu de données

L'ensemble complet des données d'observation (> 1000 mesures de concentration atmosphérique de ^{106}Ru en septembre et octobre 2017) est décrit dans le travail de Masson et al. 2019. Le ^{106}Ru a été observé à des niveaux de concentration allant de quelques microBecquerels par mètre cube d'air à plus de 170 miliBecquerels par mètre cube d'air en Roumanie. Seules les stations situées les plus à l'ouest en Europe (Portugal, Espagne et Irlande) n'ont pas détecté de ^{106}Ru . Au total, 31 pays du continent européen ont reporté des concentrations de ^{106}Ru positives (Masson et al. 2019; Saunier et al. 2019).

La période d'échantillonnage de l'air n'est pas systématiquement la même dans les différents pays. Elle varie entre 11 heures (en Roumanie) et 3 mois (en Russie). Il y a également une grande variabilité dans la limite de détection des capteurs, i.e., le seuil de concentration en dessous duquel un capteur ne mesure rien comme expliqué en section 2.1.2 du chapitre 2. Elle est très faible en France (moins de $1 \mu\text{Bq.m}^{-3}$), mais plus élevée en Allemagne ou en Roumanie. La limite de détection d'un capteur est très corrélée à sa période de prélèvement. Les périodes de prélèvement en Roumanie sont courtes et les limites de détection sont ainsi élevées. C'est le contraire en France où la période de prélèvement peut atteindre une semaine.

La figure 3.5 reporte les valeurs maximales de concentration atmosphérique observées en Europe (Masson et al. 2019). Notez qu'outre les observations de concentration atmosphérique, des mesures de dépôt ont été recueillies par plusieurs pays européens. Néanmoins, étant donné le nombre limité d'observations de dépôt par rapport au nombre d'observations de concentration atmosphérique, nous ne prendrons pas en compte les mesures de dépôts dans cette étude. L'ensemble des données d'observation utilisé est décrit en détail et est disponible publiquement dans les travaux de Masson et al. (2019).

3.4.1.4 Modélisation de l'opérateur d'observation H

La dispersion atmosphérique du panache de ^{106}Ru est simulée à l'aide du modèle eulérien IdX décrit dans le chapitre 1. Les principaux paramètres physiques du transport sont établis sur la base de travaux antérieurs (Saunier et al. 2019). Ils sont décrits pour la plupart en section 1.3.2 du chapitre 1 et sont rappelés dans le tableau 3.1. Pour réaliser les simulations

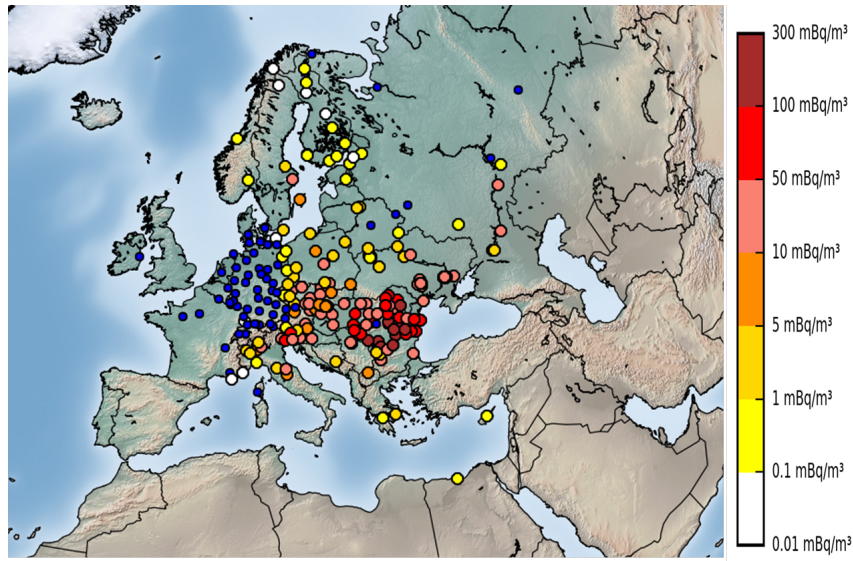


Figure 3.5 – Concentrations atmosphériques maximales de ^{106}Ru en $\text{mBq}\cdot\text{m}^{-3}$ observées en Europe en automne 2017. Les points bleus correspondent à des concentrations inférieures à la limite de détection.

de cette section, de la partie 4.1.3 du chapitre 4 et de la section 5.4 du chapitre 5, nous utilisons des données météorologiques provenant de deux sources :

- données Météo-France de réanalyse calculées à partir du modèle numérique ARPEGE (Pailleux et al. 2000). Ces données sont celles utilisées par défaut en opérationnel à l'IRSN ;
- données CEPMMT (Centre européen pour les prévisions météorologiques à moyen terme) ou ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts), de réanalyse ERA5 HRES (Vitart et al. 2019). Les données ECMWF sont en général décrites sur des maillages plus fins.

L'un des derniers ensembles de données météorologiques publiés par ECMWF est l'ensemble de données ERA5 produit par assimilation de données 4D-Var et EDA (Ensemble Data Assimilation) à l'aide du système intégré de prévision (IFS) de ECMWF, avec 137 niveaux hybrides sigma/pression dans la verticale. Les données consistent principalement en des analyses et des prévisions de 18 heures initialisées à 06 et 18 UTC. Les champs sont obtenus en utilisant le système de requête MARS de ECMWF. L'ensemble de données ERA5 est composé

- d'une réalisation haute résolution (HRES) ;
- d'un ensemble de dix membres à résolution réduite provenant de l'EDA. La prévision d'ensembles est une méthode de prévision numérique que l'on utilise pour engendrer un échantillon représentatif d'un système dynamique.

L'ensemble de dix membres sera exploité dans le chapitre 5 en section 5.4. Dans cette section, qui est une introduction aux résultats qui seront présentés en section 4.1.3 du chapitre 4, nous n'utilisons que les données Météo-France.

	ARPEGE Météo-France	ECMWF ERA5
Domaine de calcul	[6°W ; 70°E] et [34°N ; 68°N]	
Résolution horizontale	0.5° × 0.5°	0.28125° × 0.28125°
Résolution verticale	11 couches de 0 à 4400m	15 couches de 0 à 8000m
Résolution temporelle	3 heures	1 heure
Mélange vertical	Paramétrisation de Louis (K-diffusion) (Louis 1979)	
Mélange horizontal	Coefficient de diffusion des tourbillons horizontaux nul	
Lessivage	$\lambda = \Lambda_0 p_0$, où $\Lambda_0 = 5 \cdot 10^{-5} \text{h} \cdot (\text{mm} \cdot \text{s})^{-1}$ et p_0 est l'intensité des précipitations (Baklanov et Sørensen 2001)	
Dépôt sec	Vitesse de dépôt sec $v_d = 2 \cdot 10^{-3} \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	

Table 3.1 – Principales caractéristiques de configuration des simulations pour l'évènement de détection du ^{106}Ru . L'étendue du domaine et les paramètres relatifs à la dispersion du modèle sont les mêmes pour les deux sources de données météorologiques.

Les simulations du modèle commencent le 22 septembre 2017 à 00.00 UTC et se terminent le 13 octobre 2017 (heure de la dernière observation). Nous supposons que le rejet s'est produit au niveau du sol entre 0 et 120 mètres. Le domaine sera limité à un rectangle en coordonnées latitude-longitude s'étendant de l'ouest de l'Europe à l'est du Kazakhstan. Ceci fait suite à des travaux précédents (Saunier et al. 2019), qui excluaient la possibilité que la source soit située ailleurs à partir de la répartition des mesures.

Comme précisé antérieurement, on suppose que tous les paramètres décrivant la source (composition des radionucléides, hauteur du rejet, etc.) sont connus, à l'exception du terme source \mathbf{q} et des coordonnées x_1, x_2 de la source. De même, si on a montré que l'opérateur d'observation calculé \mathbf{H} s'échelonne linéairement avec le vecteur des rejets ($\mathbf{H}(x_1, x_2, \mathbf{q})\mathbf{1}_q = \mathbf{H}(x_1, x_2, \mathbf{1}_q)\mathbf{q}$) et, de cette façon, peut être calculé indépendamment de \mathbf{q} , il n'existe pas de relation particulière entre les opérateurs d'observation de deux lieux de coordonnées différentes. Par conséquent, pour gagner du temps de calcul, le domaine spatial est subdivisé en mailles régulières de résolution $2^\circ \times 2^\circ$, où un ensemble d'opérateurs d'observation $\{\mathbf{H}_k\}$ seront calculés aux nœuds, qui correspondent aux points bleus de la figure 3.6. De cette façon, l'opérateur d'observation $\mathbf{H}(x_1, x_2, \mathbf{1})$ du produit $\mathbf{H}(x_1, x_2, \mathbf{1})\mathbf{q}$ sera déterminé comme une interpolation bilinéaire de ces \mathbf{H}_k pré-calculés.

Le vecteur des débits de rejet \mathbf{q} est défini comme un vecteur de sept débits de rejet quotidiens uniformes allant du 22 au 28 septembre 2017. En effet, Saunier et al. 2019 estiment que le ^{106}Ru a principalement été rejeté le jour du 26 septembre, ce qui motive

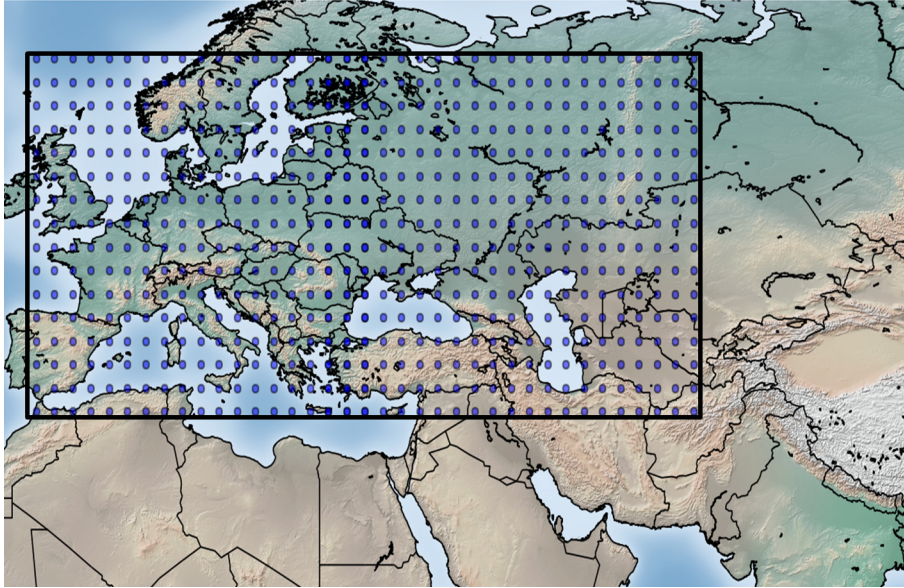


Figure 3.6 – La boîte noire correspond au domaine de recherche de la source du ^{106}Ru . Pour chaque point bleu de coordonnées (x_1, x_2) , un opérateur d’observation correspondant $\mathbf{H}(x_1, x_2, \mathbf{1})$ est calculé.

donc notre choix. Nous reconstituons ainsi sept composantes indépendantes temporellement (q_{22}, \dots, q_{28}), chaque composante correspondant à une émission uniforme. Les sept variables de débits de rejet sont initialisées aléatoirement dans $[0 \text{ Bq.s}^{-1}, 10^{10} \text{ Bq.s}^{-1}]$.

Les autres variables sont initialisées aléatoirement dans l’espace des états possibles : plus précisément, les coordonnées sont initialisées aléatoirement dans le domaine $[[6^\circ\text{W}; 70^\circ\text{E}]; [34^\circ\text{N}; 68^\circ\text{N}]]$, qui correspond au domaine où les données météorologiques sont définies. La variance unique r de la matrice de covariance des erreurs d’observations \mathbf{R} est initialisée aléatoirement dans l’intervalle $[1, 20]$.

Nous avons choisi $\sigma_x = 0.3$, $\sigma_{\ln q} = 0.05$ et $\sigma_r = 0.03$. Puisque chaque variance a un effet levier sur le taux d’acceptation final, de nombreuses combinaisons de $(\sigma_x, \sigma_q, \sigma_r)$ satisfont ce taux d’acceptation optimal. Ce choix spécifique a été fait à partir d’expérimentations pour accélérer la convergence (de sorte à se rapprocher du taux d’acceptation théorique optimal évalué à 0.234).

La chaîne de Markov procède pendant 5×10^5 itérations, ou marches aléatoires.

3.4.2 Résultats

L'algorithme de Metropolis-Hastings est appliqué pour retrouver la source du ^{106}Ru . Nous présentons ci-dessous les résultats de cette première application.

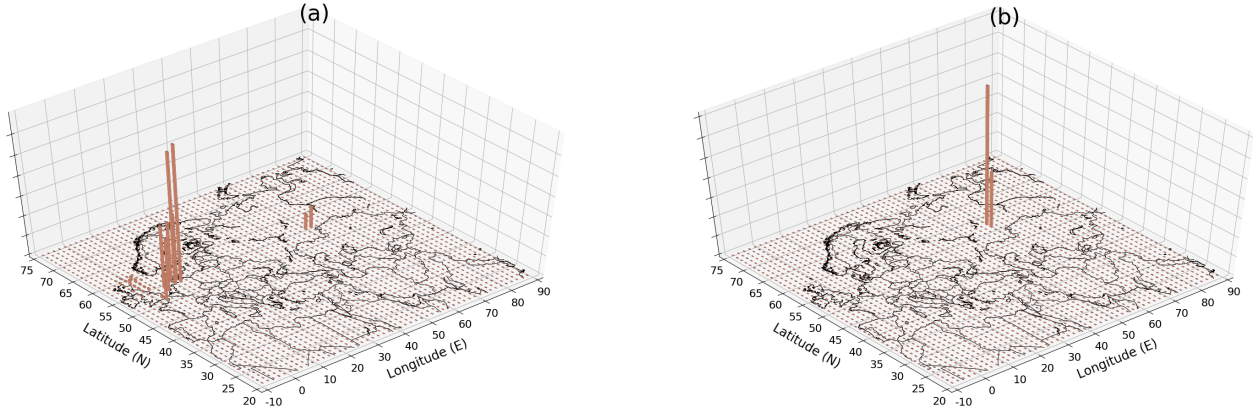


Figure 3.7 – Distribution jointe des variables de coordonnées échantillonnées à l'aide d'un algorithme MH avec initialisation en Angleterre des variables de coordonnées (a) et initialisation aléatoire des variables de coordonnées (b).

Les deux histogrammes des deux figures 3.7 sont construits en utilisant l'algorithme MH pour deux initialisations différentes. La figure 3.7.a est construite à partir d'une initialisation en Angleterre, tandis que la figure 3.7.b est construite à partir d'une initialisation aléatoire.

On observe que les histogrammes reconstruits sont très différents. Autrement dit, les échantillons récupérés avec nos chaînes de Markov sont fortement influencés par leur initialisation, même après plusieurs centaines de milliers d'itérations. Ils apparaissent en fait être capturés dans des bassins de minima locaux, indépendamment de la taille des pas des sauts, i.e., des variances de probabilité de transition choisies. L'apparition des minima locaux liée à la prise en compte des variables coordonnées est souvent due à un manque d'information. Ici, ce manque d'information vient d'une mauvaise répartition des observations. À cause de ces minima locaux, notre distribution invariante $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ ne peut pas être échantillonnée correctement en temps opérationnel, nous devons accélérer la convergence de l'algorithme MH.

L'accélération de la convergence de l'algorithme d'échantillonnage est le sujet du prochain chapitre, où nous allons étudier deux méthodes :

- l'algorithme MCMC du parallel tempering, adapté à partir de l'algorithme de Metropolis-Hastings,
- puis la méthode de la descente de Stein à gradient variable.

4 Méthodes d'accélération de l'échantillonnage

Sommaire

4.1	Le parallel tempering	84
4.1.1	Etat de l'art sur l'accélération de la convergence des MCMC . . .	84
4.1.2	L'algorithme du parallel tempering	85
4.1.3	Application au cas ^{106}Ru	95
4.2	Descente de Stein à gradient variable	103
4.2.1	Description de la méthode	103
4.2.2	Dérivation du noyau et du gradient du logarithme de la distribution a posteriori	105
4.2.3	Application à l'accident du ^{106}Ru	110

Dans ce chapitre, nous étudions et appliquons plusieurs méthodes pour résoudre les problèmes de minima locaux rencontrés dans le chapitre précédent. Plus précisément :

- nous utilisons d'abord un algorithme MCMC basé sur l'algorithme de Metropolis-Hastings et le principe de température : le parallel tempering ;
- ensuite, dans une seconde partie, nous étudions une nouvelle méthode d'échantillonnage : la descente de Stein à gradient variable.

4.1 Le parallel tempering

4.1.1 Etat de l'art sur l'accélération de la convergence des MCMC

Les méthodes de Monte-Carlo par chaînes de Markov sont souvent exposées à des problèmes de convergence qui peuvent être dues à :

- des minima locaux, comme discuté dans le chapitre 3 en section 3.4.2 ;
- des variables dont l'ordre de grandeur change. Si la variance de la probabilité de transition d'une variable est constante, alors elle peut être inadaptée à un changement en ordre de grandeur de cette variable ;
- un domaine de définition des variables à échantillonner trop grand par rapport au domaine qui sera effectivement échantillonné. Si le domaine d (où la probabilité a posteriori $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ est élevée) est beaucoup plus petit en ordre de grandeur que le domaine complet D (où est évalué la source), alors :
 - la variance de transition peut être trop grande pour échantillonner finement dans d ;
 - la variance de transition peut être trop petite pour explorer rapidement D .

Dans la suite, nous décrivons plusieurs catégories de méthodes pour résoudre ces problèmes (Robert et al. 2018) :

- les algorithmes Multiple try MCMC, qui constituent un ensemble d'approches reposant sur la proposition de multiples candidats à chaque étape du MCMC pour améliorer la sélection du prochain état de la chaîne (Martino et al. 2016) :
 - par exemple, la stratégie de Delaying rejection, qui est basée sur l'algorithme de Metropolis-Hastings, propose à chaque transition de tirer un candidat issu d'une succession de propositions aléatoires plutôt que d'une seule et unique proposition ;
 - Jacob et al. (2011) et Haario et al. (2006), ou Martino et al. (2016) proposent des méthodes basées sur l'utilisation de chaînes multiples avec des points de départ multiples interagissant entre elles ;
- les chaînes MCMC adaptatives, qui sont des chaînes où les covariances des distributions de transition ne sont pas constantes, et sont donc amenées à évoluer au cours de l'échantillonnage. Plus précisément, la covariance est généralement recalculée à partir des échantillons précédents. Ces méthodes sont explorées dans Haario et al. (2001) et Roberts et Rosenthal (2009). Craiu et al. (2009) utilisent plusieurs chaînes (presque) indépendantes pour échantillonner, et mettent à jour la matrice de covariance commune empirique à partir des échantillons de ces différentes chaînes ;

- les méthodes basées sur le principe du tempering. Ce principe repose sur l'idée d'aplatir la densité de probabilité de la distribution a posteriori. Une chaîne de Markov explorant un territoire aplati se déplace plus facilement, et la probabilité qu'elle reste coincée dans un minimum local diminue de facto.

On peut noter qu'une chaîne de Markov qui se déplace sur un tel territoire échantillonne la distribution de probabilité a posteriori tempérée $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^{\frac{1}{T}}$, aplatie grâce à un terme T dit de température, plutôt que la distribution de probabilité a posteriori $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$.

Le choix de la valeur de T a une grande influence sur l'efficacité de l'échantillonnage : plus T est élevé, plus les minima locaux sont plats et larges. Par conséquent, plus la valeur de T est élevée, plus l'échantillonneur a de chances de passer d'un minimum local à un autre. Des méthodes utilisant le principe du tempering sont décrites dans Gilks et al. (1995) ou Craiu et al. (2009) qui mettent à jour le terme de température de leur système en utilisant un critère pour évaluer le degré de convergence de la chaîne.

On pourrait aussi citer beaucoup d'autres méthodes, la littérature sur le sujet étant vaste, comme le Monte-Carlo Hamiltonien où la corrélation entre les états échantillonnés successifs est réduite. Craiu et al. (2009) proposent des méthodes pour améliorer l'initialisation des chaînes. Par exemple, l'utilisation de méthodes déterministes comme des descentes de gradients peuvent inférer la position des espaces de haute probabilité à explorer.

Dans la prochaine partie, nous proposons un algorithme se servant de l'idée de tempering. Nous basons cette décision sur notre observation que les chaînes MH du chapitre 3 étaient plongées dans de profonds minima locaux, et que des algorithmes comme les Multiple Try MCMC ne seraient pas suffisants.

4.1.2 L'algorithme du parallel tempering

Dans ce qui suit, nous présentons l'algorithme du parallel tempering (PT) introduit à l'origine par Swendsen et J.-S. Wang (1986), également appelé dans la littérature méthodes de Monte Carlo par Chaînes de Markov Metropolis-Couplés (MCMCMC) ou échange de température (temperature swapping) (Earl et Deem 2005 ; Baragatti 2011 ; Atchadé et al. 2011).

Le parallel tempering est un algorithme basé sur l'utilisation d'un terme de température T , qui est défini comme un terme servant à aplatir la distribution a posteriori. Plus précisément, ce terme T est ajouté au posterior qui devient $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^{\frac{1}{T}}$ plutôt que $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. L'algorithme du parallel tempering repose sur le principe de combiner différentes chaînes MCMC à différentes températures. Les températures élevées $T > 1$ aplatissent la distribution cible,

permettant ainsi aux chaînes correspondantes d'explorer plus efficacement l'intégralité de l'espace des états possibles et d'éviter les minima locaux.

La méthode a déjà été utilisée par Yee 2008 qui décrit une stratégie utilisant le *parallel tempering* pour la modélisation inverse dans le cas de plusieurs sources radioactives. C'est un algorithme populaire dans d'autres domaines comme, par exemple, celui de l'inférence phylogénétique (Altekar et al. 2004). Nous décrivons le processus en détail ci-dessous.

Nous définissons tout d'abord la distribution cible $\pi : \mathbf{x} \rightarrow \pi(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. Une chaîne à la température T , que nous allons aussi appeler une chaîne T -tempérée, est une chaîne qui a pour distribution cible :

$$\pi^{\frac{1}{T}} : \mathbf{x} \rightarrow \pi(\mathbf{x})^{\frac{1}{T}} \left(\int \pi(\mathbf{x})^{\frac{1}{T}} d\mathbf{x} \right)^{-1}, \quad (4.1)$$

avec $T \geq 1$. Selon cette définition, les chaînes tempérées échantillonnent à partir d'une distribution a posteriori aplatie : plus la température est élevée, plus il est facile pour la chaîne tempérée de surmonter le problème des minima locaux et donc d'échantillonner rapidement à partir de sa distribution cible. On peut noter, en particulier, qu'une chaîne non-tempérée, c'est-à-dire une chaîne dont la température est égale à 1, est une chaîne qui échantillonne la distribution a posteriori qui nous intéresse $\pi(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$.

Définissons maintenant $T_0 = 1 < T_1 < T_2 < \dots < T_{N_T}$ une liste de températures et les $N_T + 1$ chaînes de Markov correspondantes, c'est-à-dire, les chaînes qui vont échantillonner les distributions invariantes notées $\pi, \pi^{\frac{1}{T_1}}, \pi^{\frac{1}{T_2}}, \dots, \pi^{\frac{1}{T_{N_T}}}$, respectivement.

Dans l'algorithme du *parallel tempering*, chaque chaîne fonctionne en parallèle avec les autres en suivant un algorithme de Metropolis-Hastings. Des mouvements d'échanges entre les chaînes à des niveaux de températures adjacents sont autorisés selon un certain rapport d'acceptation calculé de la même manière que dans l'algorithme de Metropolis-Hastings, et donc satisfaisant également le critère de la balance détaillée. Le principe de l'algorithme du *parallel tempering* repose alors sur la connexion de chaînes de Markov à haute température à mélange plus ou moins rapide, avec une chaîne de Markov à basse température à mélange lent (Robert et al. 2018). Par mélange, nous entendons, exploration de l'espace des états.

Plus précisément, le *parallel tempering* fait la navette entre deux dynamiques décrites sur la figure 4.1 :

- *Single-temperature move* : sur certaines itérations, les vecteurs source \mathbf{x} de chacune des $N_T + 1$ chaînes sont mis à jour avec un processus d'acceptation MCMC traditionnel tel que l'algorithme Metropolis-Hastings ;
- *Temperature swap (de deux chaînes à des températures adjacentes)* : sur certaines itérations, des échanges des vecteurs sources \mathbf{x} de chaînes à températures adjacentes sont proposés. Les probabilités de tels échanges sont calculées selon la théorie de Metropolis-Hastings pour satisfaire la balance détaillée. Tout se passe comme si cette étape d'échange n'était qu'une étape MH supplémentaire.

Déterminons alors le taux d'acceptation qui correspond à l'échange des variables des chaînes T_j et T_k en le dérivant de la balance détaillée. Nous appelons \mathbf{x}_j les variables de la chaîne T_j avant l'échange, et \mathbf{x}_k les variables de la chaîne T_k . Pour la chaîne T_j , la probabilité de transition définie dans le ratio d'acceptation de la théorie MH est $\pi^{\frac{1}{T_k}}$. En effet, la probabilité qu'un vecteur de variables \mathbf{x} soit proposé à la chaîne de température T_j depuis la chaîne de température T_k est simplement la probabilité $\pi^{\frac{1}{T_k}}(\mathbf{x})$ de la chaîne à la température T_k d'échantillonner le vecteur de variables \mathbf{x} . Le taux d'acceptation MH de la chaîne à la température T_j pour effectuer la transition vers \mathbf{x}_k étant donné \mathbf{x}_j est donc (Baragatti 2011 ; Atchadé et al. 2011) :

$$\alpha_{\mathbf{y}}^{T_j, T_k}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) = \min \left(1, \frac{\pi^{\frac{1}{T_j}}(\mathbf{x}_k) \pi^{\frac{1}{T_k}}(\mathbf{x}_j)}{\pi^{\frac{1}{T_j}}(\mathbf{x}_j) \pi^{\frac{1}{T_k}}(\mathbf{x}_k)} \right). \quad (4.2)$$

De fait, pour la chaîne T_0 -tempérée (où $T_0=1$), toute proposition d'échange avec la chaîne T_1 -tempérée est équivalente à une marche Metropolis-Hastings réversible. C'est ce qui assure à notre chaîne de température T_0 de converger vers $\pi(\mathbf{x})$.

Le parallel tempering, de cette manière, peut être vu comme un algorithme de Metropolis-Hastings où la qualité des marches aléatoires proposées a été grandement améliorée.

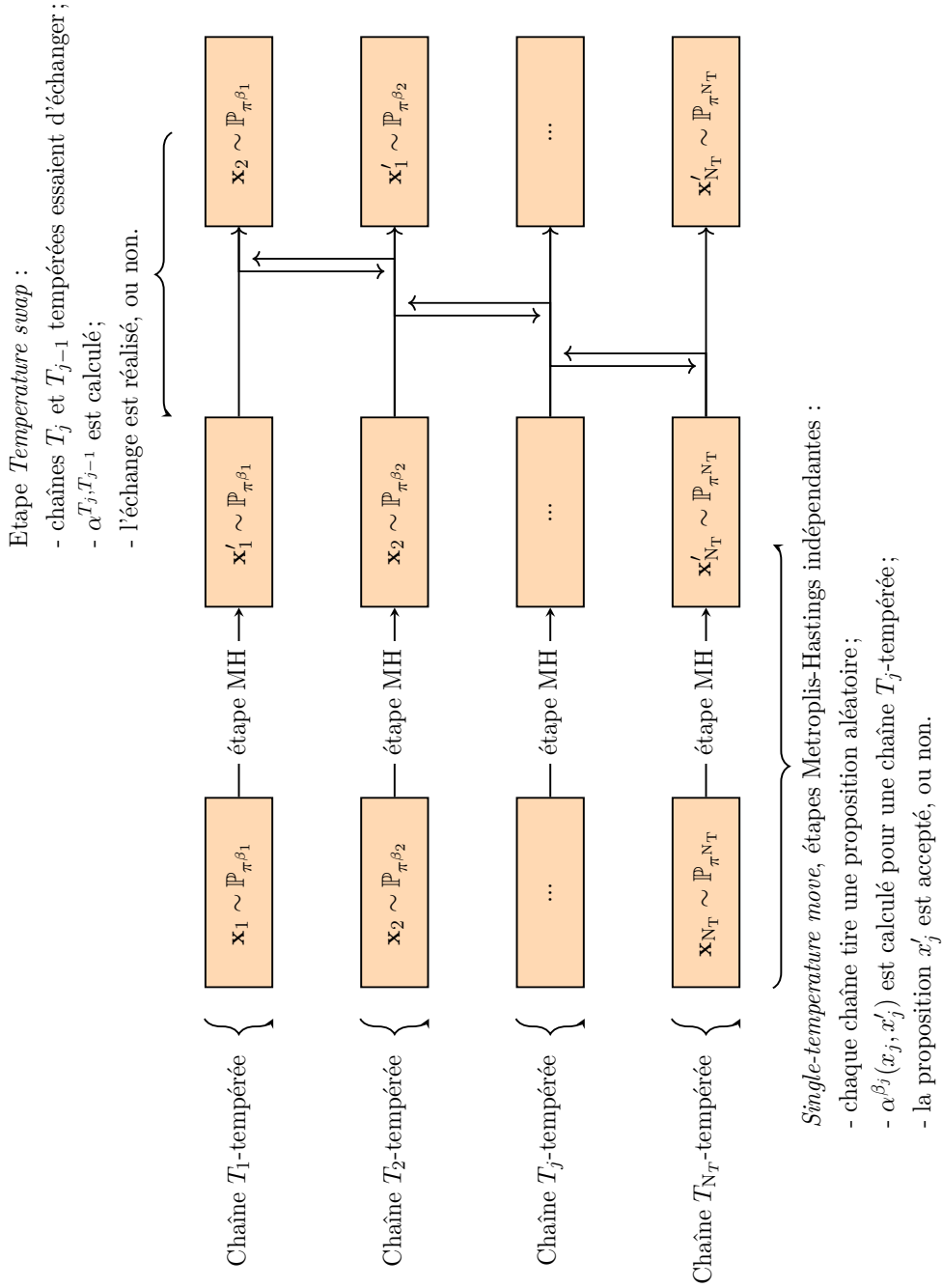


Figure 4.1 — Une étape de l'algorithme du parallel tempering.

Dans ce qui suit, par souci de lisibilité, nous définissons et utilisons $\beta_j = \frac{1}{T_j}$.

4.1.2.1 Single-temperature move

Cette étape correspond à une marche aléatoire classique d'un algorithme MH, à la différence que N_T chaînes de Markov réalisent cette marche aléatoire indépendamment des autres, convergeant ainsi vers une distribution invariante différente.

Nous supposons que les probabilités de transition (à la même température) entre deux ensembles de variables tels que définis précédemment sont symétriques (ce sera effectivement le cas lors des applications). Le rapport d'acceptation $\alpha_{\mathbf{y}}^{T_j}(\mathbf{x}'_j|\mathbf{x}_j) = \alpha_{\mathbf{y}}^{\beta_j}(\mathbf{x}'_j|\mathbf{x}_j)$ correspondant à l'acceptation de la proposition \mathbf{x}'_j donnée depuis \mathbf{x}_j pour la chaîne à température inverse β_j est :

$$\alpha_{\mathbf{y}}^{\beta_j}(\mathbf{x}'_j|\mathbf{x}_j) = \frac{\pi^{\beta_j}(\mathbf{x}'_j)}{\pi^{\beta_j}(\mathbf{x}_j)} = \frac{\pi(\mathbf{x}'_j)^{\beta_j}}{\pi(\mathbf{x}_j)^{\beta_j}} = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}'_j)^{\beta_j} p(\mathbf{x}'_j)^{\beta_j}}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)^{\beta_j} p(\mathbf{x}_j)^{\beta_j}}, \quad (4.3)$$

qui ne dépend pas des constantes de normalisation de π^{β_j} . D'autre part :

$$\begin{aligned} \ln \left(\alpha_{\mathbf{y}}^{T_j}(\mathbf{x}'_j|\mathbf{x}_j) \right) &= \beta_j \left(\ln \left(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}'_j)p(\mathbf{x}'_j) \right) - \ln \left(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)p(\mathbf{x}_j) \right) \right) \\ &= \beta_j \left(\mathcal{J}(\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}(\mathbf{x}'_j) \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

4.1.2.2 Temperature swap

Dans cette partie, nous décrivons plus en détails l'étape *temperature swap*. Nous essayons de permuter les états \mathbf{x}_j et \mathbf{x}_k des chaînes de températures inverses β_j et β_k , respectivement.

Le taux d'acceptation correspondant $\alpha_{\mathbf{y}}^{T_j, T_k} = \alpha_{\mathbf{y}}^{\beta_j, \beta_k}$ est calculé exactement comme pour le déplacement *single-temperature move* :

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{y}}^{\beta_j, \beta_k}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) &= \min \left(1, \frac{\pi^{\beta_j}(\mathbf{x}_k)\pi^{\beta_k}(\mathbf{x}_j)}{\pi^{\beta_j}(\mathbf{x}_j)\pi^{\beta_k}(\mathbf{x}_k)} \right) \\ &= \min \left(1, \frac{\pi(\mathbf{x}_k)^{\beta_j} \pi(\mathbf{x}_j)^{\beta_k}}{\pi(\mathbf{x}_j)^{\beta_j} \pi(\mathbf{x}_k)^{\beta_k}} \right) \\ &= \min \left(1, \frac{(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_k)p(\mathbf{x}_k))^{\beta_j} (p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)p(\mathbf{x}_j))^{\beta_k}}{(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)p(\mathbf{x}_j))^{\beta_j} (p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_k)p(\mathbf{x}_k))^{\beta_k}} \right). \end{aligned} \quad (4.5)$$

En prenant le logarithme de ce taux d'acceptation, on obtient une quantité commensurable à une fonction de coût :

$$\begin{aligned} \ln \alpha_{\mathbf{y}}^{\beta_j, \beta_k}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) &= \min \left(0, \ln \frac{(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_k)p(\mathbf{x}_k))^{\beta_j} (p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)p(\mathbf{x}_j))^{\beta_k}}{(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)p(\mathbf{x}_j))^{\beta_j} (p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_k)p(\mathbf{x}_k))^{\beta_k}} \right) \\ &= \min \left(0, \beta_j \ln \left(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_k)p(\mathbf{x}_k) \right) + \beta_k \ln \left(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)p(\mathbf{x}_j) \right) \right. \\ &\quad \left. - \beta_j \ln \left(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)p(\mathbf{x}_j) \right) - \beta_k \ln \left(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_k)p(\mathbf{x}_k) \right) \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Cela donne par conséquent :

$$\begin{aligned}
 \ln \alpha_{\mathbf{y}}^{T_j, T_k}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) &= \min(0, -\beta_j \mathcal{J}(\mathbf{x}_k) - \beta_k \mathcal{J}(\mathbf{x}_j) + \beta_j \mathcal{J}(\mathbf{x}_j) + \beta_k \mathcal{J}(\mathbf{x}_k)) \\
 &= \min(0, (\beta_k - \beta_j) \mathcal{J}(\mathbf{x}_k) + (\beta_j - \beta_k) \mathcal{J}(\mathbf{x}_j)) \\
 &= \min(0, (\beta_k - \beta_j)(\mathcal{J}(\mathbf{x}_k) - \mathcal{J}(\mathbf{x}_j))).
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

En substance, voyons ce que cette formule implique pour les échanges de température. Nous voulons calculer la probabilité d'échange entre le vecteur source \mathbf{x}_{k-1} d'une chaîne à température T_{k-1} avec le vecteur source \mathbf{x}_k d'une chaîne à température T_k pour $T_{k-1} < T_k$.

En suivant la procédure de Metropolis-Hastings, un nombre aléatoire $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ est engendré et l'échange est accepté si :

$$\begin{aligned}
 \ln u &\leq \ln \alpha_{\mathbf{y}}^{T_{k-1}, T_k}(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{x}_k) \\
 &\leq (\beta_{k-1} - \beta_k)(\mathcal{J}(\mathbf{x}_{k-1}) - \mathcal{J}(\mathbf{x}_k)).
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Puisque $T_{k-1} < T_k$ alors $\beta_{k-1} > \beta_k$ et ainsi l'échange est automatiquement accepté si $\mathcal{J}(\mathbf{x}_k) \leq \mathcal{J}(\mathbf{x}_{k-1})$. Si les variables de la chaîne à température élevée sont meilleures (c'est-à-dire si leur coût est moindre), les deux chaînes échangeront leurs variables. Toutefois, l'échange peut également être accepté si $\mathcal{J}(\mathbf{x}_{k-1}) \leq \mathcal{J}(\mathbf{x}_k)$ et la différence est du même ordre de grandeur que

$$\frac{\ln \mathcal{U}(0, 1)}{\beta_{k-1} - \beta_k}. \tag{4.9}$$

Algorithmiquement, on peut noter qu'échanger les variables est équivalent à échanger les températures excepté au niveau du temps de calcul. L'échange de deux températures sera toujours équivalent à l'échange de deux nombres réels alors que le nombre de variables peut être important.

Dans la figure 4.2, nous résumons la procédure du parallel tempering comme une sorte de filtre.

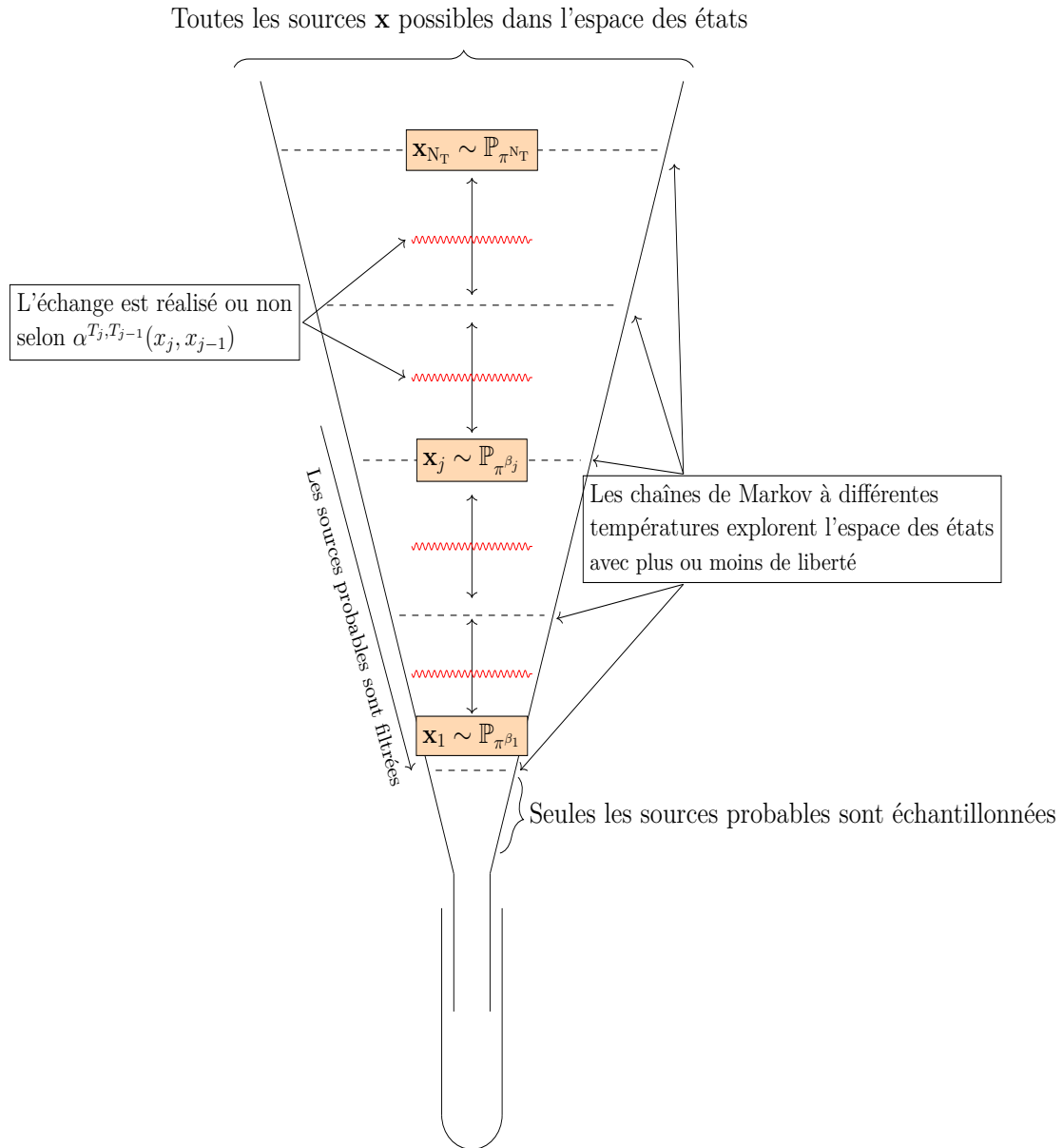


Figure 4.2 – L'algorithme du parallel tempering, un principe de filtre.

4.1.2.3 Cas des variables hyperparamètres

On suppose que l'on utilise une vraisemblance gaussienne, que l'on ne prend pas en compte les priors, ni la probabilité d'évidence $p(\mathbf{y})$ pour simplifier les calculs suivants. On suppose aussi que le vecteur source est seulement le vecteur des débits de rejet \mathbf{q} et de l'hyperparamètre r :

$$\mathbf{x} = (\mathbf{q}, r) \quad (4.10)$$

c'est-à-dire que l'on suppose la localisation connue. Pour β une température inverse, on peut écrire la distribution invariante tempérée :

$$\begin{aligned} p^\beta(\mathbf{x}|\mathbf{y}) &= \frac{p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^\beta}{\int p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^\beta d\mathbf{x}} \\ &= \frac{\frac{1}{(2\pi r)^{\beta/2}} e^{-\beta \frac{(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{q})^2}{2r}}}{\int p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^\beta d\mathbf{x}} \\ &= \frac{\frac{\beta^{-1/2}}{(2\pi r)^{(\beta-1)/2}} \frac{1}{(2\pi \frac{r}{\beta})^{1/2}} e^{-\frac{(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{q})^2}{2r/\beta}}}{\int p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^\beta d\mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Or, nous avons

$$\int \frac{1}{(2\pi \frac{r}{\beta})^{1/2}} e^{-\frac{(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{q})^2}{2r/\beta}} d\mathbf{q} = C \quad (4.12)$$

une constante dépendant de \mathbf{H} , donc

$$\begin{aligned} \int p^\beta(\mathbf{x}|\mathbf{y}) d\mathbf{x} = 1 &\Leftrightarrow \int \frac{\beta^{-1/2}}{(2\pi r)^{(\beta-1)/2}} \left(\int \frac{1}{(2\pi \frac{r}{\beta})^{1/2}} e^{-\frac{(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{q})^2}{2r/\beta}} d\mathbf{q} \right) dr = 1 \\ &\Leftrightarrow C \int \frac{\beta^{-1/2}}{(2\pi r)^{(\beta-1)/2}} dr = 1, \end{aligned} \quad (4.13)$$

et ainsi, $\int p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^\beta d\mathbf{x}$ dépend de la définition de r . Or nous avons considéré que $\int p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^\beta d\mathbf{x}$ était une constante de normalisation dans les calculs précédents, ce qui est faux si elle dépend de la définition d'une variable. Nous avons choisi d'imposer un r commun aux chaînes de températures différentes de sorte que r ne soit plus une variable dans l'étape *temperature swap* de l'algorithme.

4.1.2.4 Optimisation de l'algorithme

Avant tout calcul, il faut choisir la manière dont les différentes chaînes vont interagir entre elles et leurs caractéristiques. En particulier, nous devons définir le nombre de chaînes, leurs températures caractéristiques respectives et le moment où deux chaînes vont échanger leurs états entre elles. Nous avons précédemment décidé de n'autoriser que les échanges entre chaînes à des températures adjacentes comme dans (Robert et al. 2018). Il est possible

néanmoins d'adopter d'autres approches comme Baragatti (2011) qui décrit un processus aléatoire.

Le choix du nombre de températures et de l'espacement entre elles est crucial. Si l'écart entre deux niveaux de température est trop important, le taux d'acceptation des échanges sera trop faible, i.e., les échanges seront rarement acceptés, ce qui retardera le moment de la convergence de l'ensemble du processus. Néanmoins, si l'écart entre deux niveaux de température est trop faible, il est possible que le mélange ne soit amélioré qu'à partir de l'utilisation d'un très grand nombre de chaînes intermédiaires, ce qui requerrait une trop grande puissance de calcul. De plus, un très grand nombre de chaînes intermédiaires peut ralentir le processus si les informations provenant des états chauds tardent à avoir une influence sur les chaînes froides. Ce choix de l'écart entre les températures est un autre "principe de Boucles d'or" : il faut qu'il ne soit ni trop grand, ni trop petit (Robert et al. 2018).

Baragatti (2011) suggère d'initialiser les températures en réglant la température la plus élevée et la température la plus basse. La plus basse doit bien sûr être fixée à $T_0 = 1$, et la plus haute doit être choisie suffisamment élevée pour que la chaîne correspondante converge rapidement vers sa distribution cible $\pi^{\frac{1}{T_{N_T}}}$. En d'autres termes, la température T_{N_T} la plus élevée doit être fixée de manière que la chaîne correspondante explore très rapidement tout l'espace des états possibles en s'assurant qu'aucun mode n'est oublié.

Une fois que la température la plus élevée est choisie, il existe plusieurs stratégies pour inférer les autres températures :

- comme présentée dans Robert et al. (2018), la littérature historique suggère d'utiliser un espacement géométrique entre les températures, ce qui correspond à dériver une constante c de telle sorte que $T_{N_T} = c^{N_T}$. Ensuite, chaque température T_i est alors égale à c^i ;
- une deuxième stratégie consiste à utiliser un espacement logarithmique entre les températures, en dérivant cet espacement toujours à partir d'une constante c .

Globalement, les paramètres c et N_T doivent être choisis de manière que le taux d'acceptation des $N_T - 1$ échanges converge vers une valeur comprise entre 0.1 et 0.3. En effet, Atchadé et al. (2011) ou Roberts et Rosenthal (2014) prouvent que, dans certaines conditions, le taux d'acceptation d'échange optimal entre deux niveaux de température devrait converger précisément vers 0.234.

Pour y parvenir, une troisième stratégie consiste à utiliser un espacement variable et appliquer la procédure suivante :

- choisir T_{N_T} suffisamment élevée pour que la chaîne correspondante converge rapidement vers sa distribution cible correspondante ;

- dériver T_{N_T-1} de manière que le taux d'acceptation des échanges entre la chaîne T_{N_T} et la chaîne T_{N_T-1} converge vers 0.234. Ensuite T_{N_T-2} peut être déterminé de manière que le taux d'acceptation des échanges entre la chaîne T_{N_T-1} et la chaîne T_{N_T-2} converge vers 0.234 et ainsi de suite ;
- la dernière température doit être fixée à 1.

Toutefois, ce taux d'acceptation optimal des échanges, et les conditions associées supposées dans (Atchadé et al. 2011 ; Roberts et Rosenthal 2014) demeurent un sujet de discussion ouvert et il convient donc de les utiliser avec prudence. Dans notre cas, nous avons décidé de fixer un espacement géométrique pour plus de simplicité.

En règle générale, il faut que la distribution de probabilité des chaînes à haute température soit proche d'une distribution uniforme sur l'ensemble de l'espace des états possibles. Comme nous utilisons des algorithmes MCMC pour échantillonner à partir de ces distributions, nous utilisons des marches aléatoires avec des variances de probabilité de transitions spécifiques. Ces variances sont définies de manière à améliorer le mélange de la chaîne froide (à température $T = 1$) et sont donc généralement trop faibles pour permettre aux chaînes à température élevée d'explorer rapidement l'ensemble de l'espace des états. Pour résoudre ce problème, les variances de nos probabilités de transition sont modifiées : si on note σ la variance de probabilité de transition de la chaîne froide notée ($T = 1$), la variance de probabilité de transition de la chaîne à la température T est choisie telle que

$$\sigma_T = \sigma\sqrt{T}. \tag{4.14}$$

4.1.3 Application au cas ^{106}Ru

L'algorithme du parallel tempering (PT) est appliqué pour retrouver la source liée à la détection de ^{106}Ru . Cet évènement est introduit en section 3.4 du chapitre 3. Sept chaînes parallèles à des températures différentes sont initialisées avec un espacement géométrique (avec un taux géométrique c de 3). Le taux d'espacement et le nombre de températures ont été choisis de manière à optimiser le taux de convergence selon la théorie du MCMC, c'est-à-dire, faire converger les taux d'acceptation des échanges vers des valeurs d'environ 0.2. Les deux sources de données météorologiques, ARPEGE Météo-France et ERA5 ECMWF, sont utilisés indépendamment. Les paramétrisations sont identiques à celles définies pour l'application de l'algorithme Metropolis-Hastings en section 3.4.1 du chapitre 3.

Chaque chaîne, comme pour l'algorithme de Metropolis-Hastings, échantillonne un vecteur source composé de la longitude, de la latitude, des logarithmes de sept débits de rejet allant du 22 au 28 septembre, et de la variance de vraisemblance r . Les variances des probabilités de transition sont modifiées comme décrit précédemment. L'algorithme du parallel tempering procède pendant 5×10^5 itérations. Le temps de calcul sur une machine de 12 coeurs est faible (< 15 minutes).

4.1.3.1 Problème de régularisation à haute température

Avant de présenter les résultats de l'application du parallel tempering, dans cette section, nous présentons la justification du choix d'une distribution a priori log-gamma sur les logarithmes des débits de rejet présenté en section 3.2.3.2 du chapitre 2. Pour cela, nous appliquons deux fois l'algorithme de Metropolis-Hastings pour reconstruire la distribution a posteriori suivante :

$$\pi_{\mathbf{y}}^{\frac{1}{T}} : \mathbf{x} \rightarrow p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^{\frac{1}{T}} \left(\int p(\mathbf{x}|\mathbf{y})^{\frac{1}{T}} d\mathbf{x} \right)^{-1}, \quad (4.15)$$

avec $T = 3^6 = 729$ (ce qui est une température très élevée et, par conséquent, une distribution a posteriori concomitante très aplatie). Dans les deux cas, on utilise la même vraisemblance mais des distributions a priori différentes :

- dans le premier cas, on suppose θ l'hyperparamètre d'échelle de la distribution log-gamma a priori égal à 30,
- et dans le second cas, $\theta = \infty$.

On fait fonctionner les deux chaînes MH pendant 10^4 itérations. En effet, on s'attend à ce que la convergence de l'algorithme MH soit très rapide, puisque les distributions cibles sont censées être très plates.

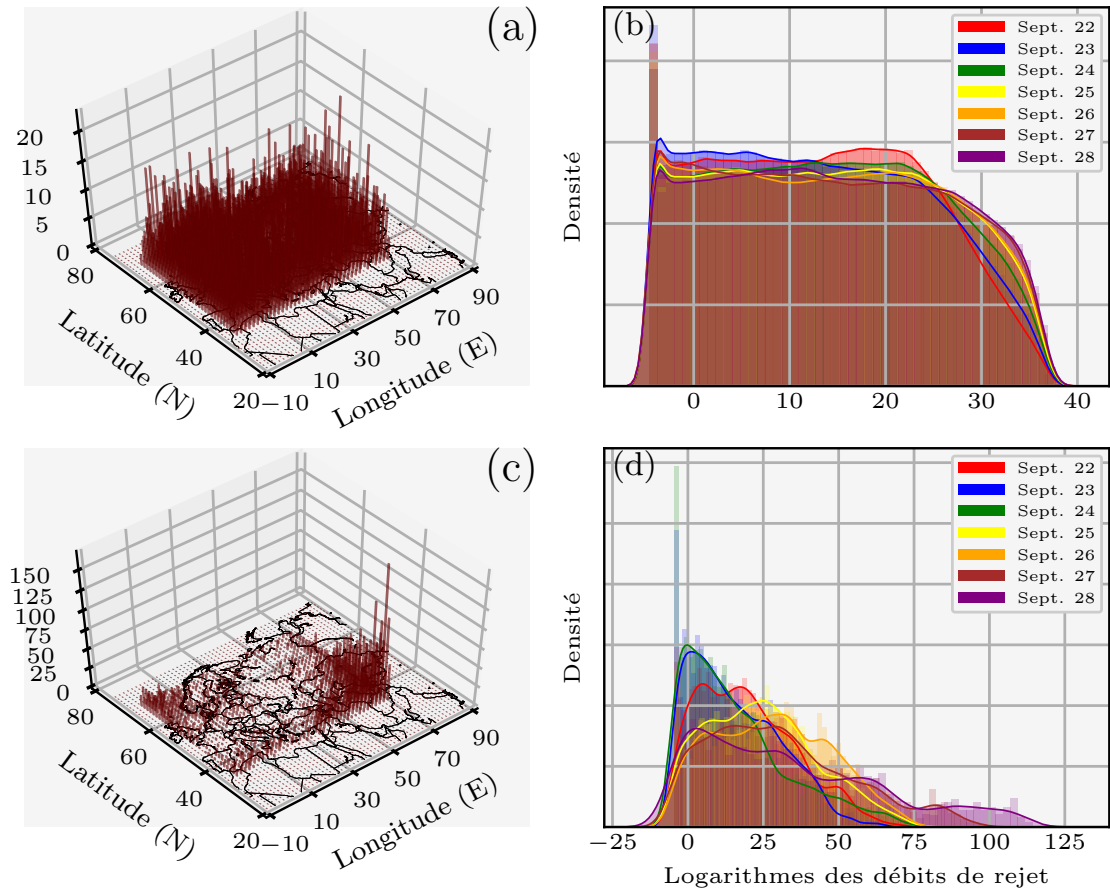


Figure 4.3 – Les figures (a) et (b) représentent la distribution conjointe des coordonnées, et la distribution des logarithmes des débits de rejet, respectivement, retrouvées en utilisant un algorithme MH pour une distribution a priori choisie comme log-gamma avec hyperparamètre $\theta = 30$. Les figures (c) et (d) représentent les distributions reconstruites dans le cas d'un a priori log-gamma avec hyperparamètre $\theta = \infty$. On observe un bon mélange sur les deux figures du haut, et un mauvais mélange sur les deux figures du bas.

Nous obtenons en figure 4.3 des résultats différents dans les deux situations :

- dans le cas $\theta = 30$ (figures 4.3a et 4.3b), les distributions échantillonnées sont construites comme on pouvait s'y attendre : la distribution jointe des coordonnées et les distributions des logarithmes des débits de rejet sont très plates ;
- cependant, dans le second cas, avec $\theta = \infty$, la figure 4.3c indique que les chaînes échantillonnent principalement les variables des coordonnées dans une zone située autour de $[70^\circ\text{E}, 34^\circ\text{N}]$. De plus, la figure 4.3d montre que les logarithmes des débits de rejet atteignent des valeurs très élevées (jusqu'à un terme source 10^{34} fois plus grand que celui de l'ampleur totale de l'accident de Fukushima-Daiichi ce qui est

évidemment totalement absurde).

Dans le cas $\theta = 30$ (figures 4.3a et 4.3b), l'a priori pour les logarithmes des débits de rejet (même aplatis) est très contraignant : le terme source est empêché d'atteindre des valeurs excessivement élevées. Dans l'autre cas (figures 4.3c et 4.3d), les rejets très élevés ne sont contraints que par les observations.

La différence entre les deux configurations est le résultat d'un manque de contrainte. Le domaine de recherche n'est pas entièrement couvert par les observations : il existe des zones spatiales où des débits de rejet très élevés provenant de ces positions n'impliqueront pas de prédictions très élevées. Autrement dit, il existe des zones spatiales dont les rejets ne sont pas contraints par les observations.

On remarque en effet que, lorsque la chaîne de Markov échantillonne le vecteur source avec des débits de rejet élevés \mathbf{q} , elle converge alors nécessairement vers certaines zones spatiales (ici un domaine s'étendant de la Turquie au Pakistan) où des rejets n'auraient pas activé les réseaux de surveillance. Dans le cas où nous choisissons de ne pas imposer de prior contraignant sur les débits de rejet, alors les débits de rejet ne peuvent être contraints que par les observations. Si ceux-ci ne sont pas contraints par les observations, alors ils ne sont pas contraints.

Par conséquent, une chaîne à haute température peut rester figée dans des minima locaux de coordonnées. Comme la convergence de notre chaîne d'intérêt (à $T = 1$) est conditionnée par la convergence des chaînes à haute température, c'est un problème. La fixation d'une contrainte élevée en utilisant la distribution log-gamma avec θ adapté résout ce problème.

4.1.3.2 Reconstruction de la source

Le processus d'échantillonnage a été réalisé en deux étapes : dans un premier temps, l'algorithme PT a été appliqué sur le domaine spatial de recherche défini dans le tableau 3.1.

Les figures 4.4.a et 4.4.b décrivent la reconstruction de la longitude et de la latitude de la source à l'aide des données de Météo-France ARPEGE et de ECMWF ERA5. Il montre que les régions situées entre la Volga et le sud de l'Oural sont les zones les plus fiables de rejet. Cependant, la densité de la longitude reconstruite à partir des données ERA5 est significativement différente de celle reconstruite à partir des données Météo-France (la différence des moyennes des deux densités approche $8^\circ \sim 800$ km).

Pour améliorer la précision de la reconstruction de la source, et pour montrer que cet écart est dû à une erreur de représentativité liée à l'interpolation spatiale de la position (décrite en section 1.4.2.2), un sous-domaine d de dimensions $[47^\circ\text{E}; 62^\circ\text{E}]$ et $[53^\circ\text{N}; 58^\circ\text{N}]$ a été extrait et divisé en mailles de $0.5^\circ \times 0.5^\circ$. Un opérateur d'observation fixe \mathbf{H}_i a ensuite

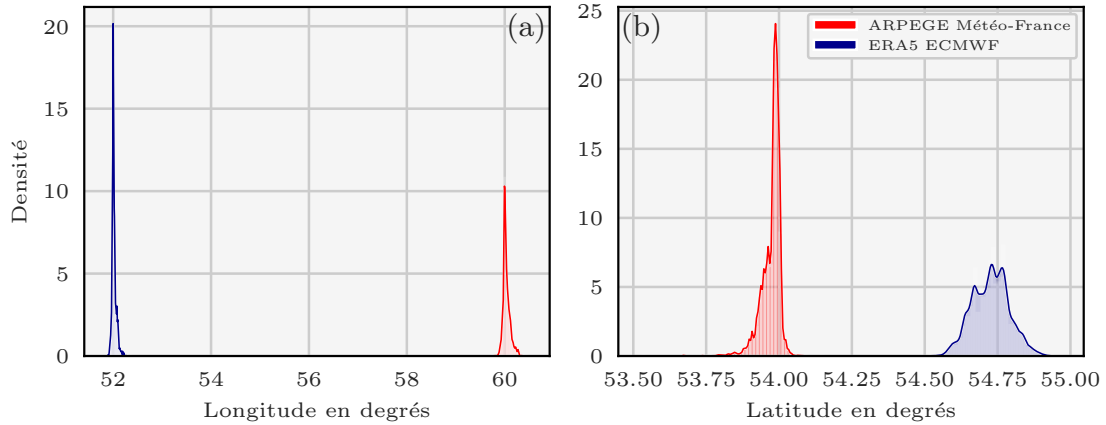


Figure 4.4 – Densités de probabilité des variables de coordonnées décrivant la source de ^{106}Ru échantillonnée à l'aide de l'algorithme du parallel tempering appliqué sur le domaine défini dans le tableau 3.1 : longitude (a), latitude (b).

été calculé sur chaque maille. La résolution de la grille où sont calculés les opérateurs d'observation sur ce sous-domaine d est donc de $0.5^\circ \times 0.5^\circ$, au lieu de $2^\circ \times 2^\circ$.

Tous les résultats présentés ci-après sont réalisés sur le domaine complet défini dans le tableau 3.1, à la différence que la simulation de la dispersion d'une source située dans d est calculée par interpolation bilinéaire sur les \mathbf{H}_i au lieu des \mathbf{H}_k introduit dans la section 3.4.1.4.

	Moyenne	Médiane	MAP	Écart type
Longitude (ARPEGE)	58.968°E	58.934°E	58.915°E	0.150°
Longitude (ERA5)	58.614°E	58.614°E	58.625°E	0.050°
Latitude (ARPEGE)	55.721°N	55.728°N	55.724°N	0.153°
Latitude (ERA5)	56.325°N	56.324°N	56.292°N	0.039°
Log. du débit de rejet, 26 Sept. (ARPEGE)	21.407	21.414	21.434	0.071
Log. du débit de rejet, 26 Sept. (ERA5)	21.098	21.097	21.093	0.046
Variance obs. error (ARPEGE)	0.459	0.458	0.451	0.017
Variance obs. error (ERA5)	0.403	0.402	0.387	0.014

Table 4.1 – Paramètres statistiques des distributions des variables d'intérêt échantillonnées à l'aide des données ARPEGE Météo-France ou ECMWF ERA5. La dispersion dans le domaine d est calculée par interpolation bilinéaire des \mathbf{H}_i au lieu des \mathbf{H}_k .

Les figures 4.5.a et 4.5.b décrivent les distributions de probabilité de la longitude et de la latitude de la source en utilisant les deux sources de données météorologiques. Les

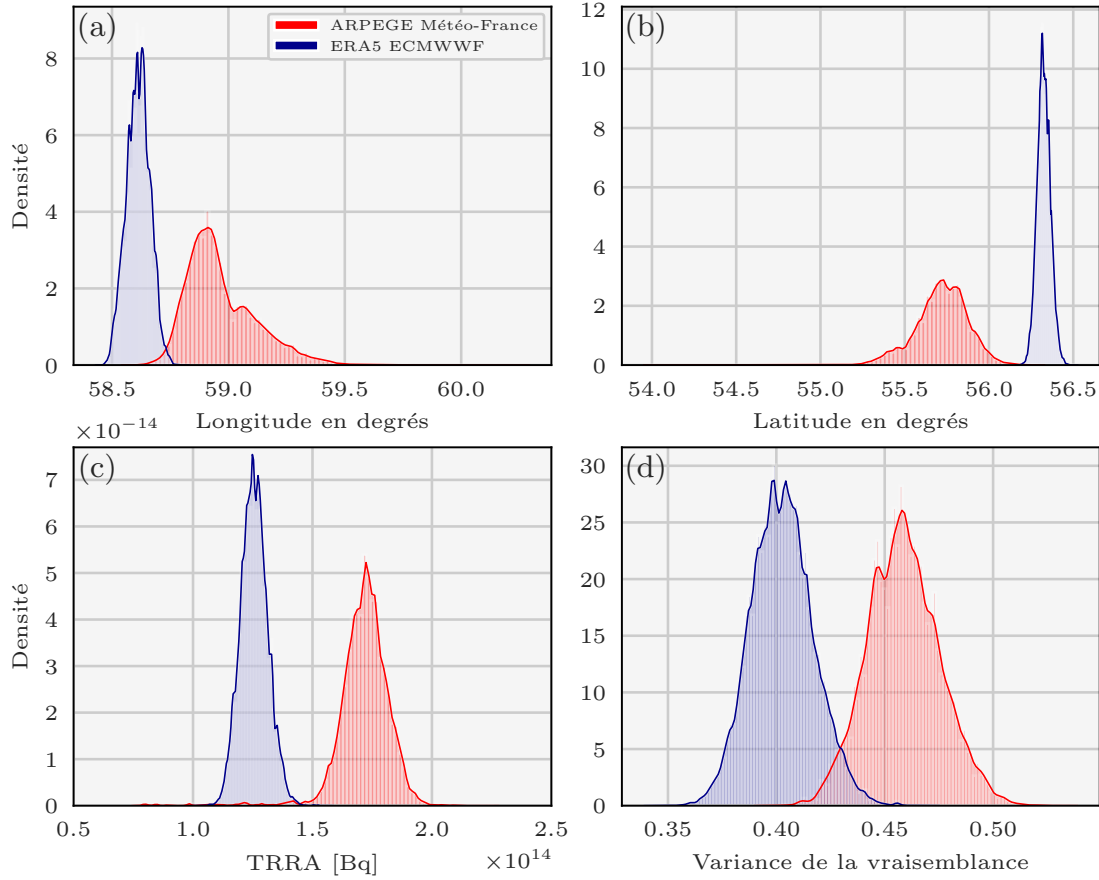


Figure 4.5 – Densité de probabilité des variables décrivant la source de ^{106}Ru échantillonnée à l’aide de l’algorithme du parallel tempering : longitude (a), latitude (b), TRRA sur le 26 septembre (c), et la variance de vraisemblance r (d). La dispersion sur le domaine d est calculée par interpolation bilinéaire sur les \mathbf{H}_i au lieu des \mathbf{H}_k .

paramètres décrivant les distributions sont décrits dans le tableau 4.1. Avec les données ECMWF ERA5, la moyenne de la distribution des coordonnées de la source est $[58.614^\circ\text{E}; 56.325^\circ\text{N}]$, alors qu’avec les données de Météo-France, la moyenne est donnée par $[58.9685^\circ\text{E}; 55.72^\circ\text{N}]$. La localisation de la source estimée dans les travaux de Saunier et al. (2019) donne également une estimation similaire.

La différence en longitude entre les deux résultats est de 0.354° , et en latitude de 0.605° . C’est une petite différence par rapport à la résolution spatiale des champs météorologiques ARPEGE ($0.5^\circ \times 0.5^\circ$). Les deux distributions indiquent que la source est vraisemblablement située dans le sud de l’Oural. De plus, la forme des densités indique que la probabilité que la source soit située ailleurs en Europe est très faible.

Les écarts-types des distributions de longitude et de latitude présentés dans le tableau 4.1 correspondant aux champs ARPEGE sont plus de trois fois supérieurs à ceux correspondant aux champs ERA5. Les distributions reconstruites correspondant aux champs ERA5 sont presque gaussiennes, tout comme la distribution de la latitude utilisant les champs ARPEGE. Cependant, la distribution de la longitude utilisant les champs ARPEGE a une forme log-normale.

La figure 4.5.c décrit les densités du rejet total sur le 26 septembre, puisque la majeure partie du ^{106}Ru a été libérée ce jour-là selon les échantillons. Les deux densités ont une forme gaussienne. En utilisant la météorologie ERA5, la moyenne de la distribution du TRRA (Total Retrieved Released Activity) sur le 26 septembre est de 125 TBq et le TRRA est compris entre 113 TBq et 139 TBq. En utilisant la météorologie ARPEGE, la moyenne de la distribution du TRRA sur le 26 septembre est de 171 TBq et le TRRA est compris entre 140 TBq et 207 TBq. L'écart-type de la distribution correspondante à ARPEGE est à nouveau supérieur à son homologue reconstruite en utilisant les données provenant du centre européen, mais les valeurs de la distribution retrouvées sont très similaires.

Ces résultats sont cohérents avec les estimations réalisées par l'IRSN en utilisant des approches variationnelles (Saunier et al. 2019). Ils sont aussi cohérents avec les résultats de Western et al. 2020 ou Tichý et al. 2020 qui utilisent des méthodes bayésiennes.

La figure 4.5.d montre les densités de probabilité des variances de l'erreur d'observation r en utilisant les deux météorologies. Les deux distributions ont des formes gaussiennes et une moyenne de 0.403 et 0.459 pour les données ECMWF ERA5 et de Météo-France ARPEGE, respectivement. La variance d'erreur d'observation liée aux champs météorologiques ERA5 est plus petite que la variance d'erreur ARPEGE. Ceci est cohérent étant donné que les résolutions spatiales et temporelles des champs HRES ERA5 sont plus fines que les champs ARPEGE de Météo-France. Les deux écarts-types pour les deux météorologies sont très faibles et très similaires. Les incertitudes sont faibles et indiquent une solide confiance dans nos résultats. Néanmoins, il est difficile d'interpréter ces valeurs de variance : ce sont en effet des quantités adimensionnelles.

La figure 4.6.a décrit les histogrammes des logarithmes des débits de rejet à l'aide des données ERA5, et explique pourquoi nous nous concentrons sur les distributions du rejet du 26 septembre. En effet, on estime que le rejet du 26 septembre est plus de 10 fois supérieur à celui du 28 septembre, et de tous les autres jours.

La figure 4.6.b décrit l'évolution de la moyenne de la distribution du TRRA du 22 au 28 septembre, en utilisant les deux sources de données météorologiques.

On peut noter que l'utilisation d'un prior de régularisation sur les rejets moyens tel qu'un prior gaussien (Tichý et al. 2016) diminuera de facto l'importance des rejets quotidiens

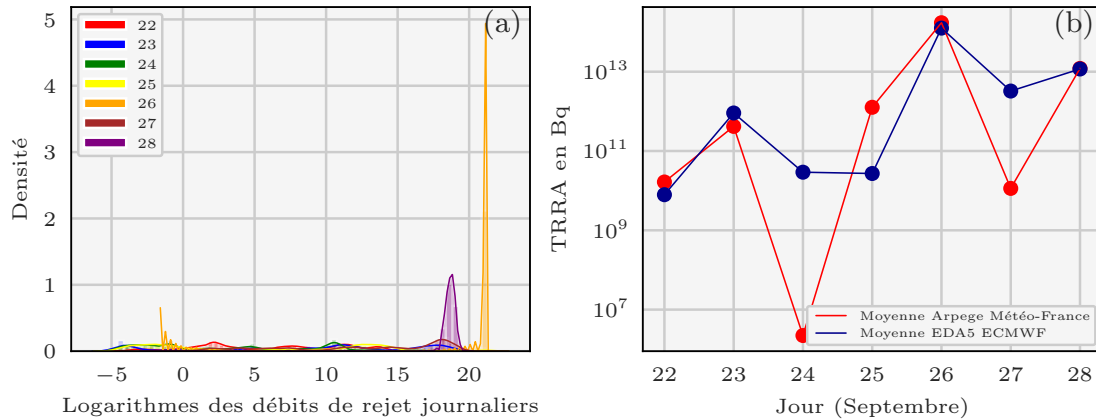


Figure 4.6 – La figure (a) montre les histogrammes des logarithmes du TRRA pour les différentes dates, échantillonnées à l’aide de l’algorithme du parallel tempering, et des données météorologiques ECMWF ERA5. La figure (b) montre l’évolution de la moyenne de la distribution reconstituée du TRRA.

obtenus.

On peut également noter qu’en utilisant les champs météorologiques ARPEGE, il apparaît une probabilité non nulle (mais très faible) que le rejet se soit produit principalement sur le 25 septembre au lieu du 26 septembre. Ces échantillons ne sont pas visibles dans les figures ci-dessous (car de trop faible importance).

4.1.3.3 Quelques conclusions

Pour échantillonner les distributions de probabilité de ces variables, deux méthodes MCMC ont été utilisées. Tout d’abord, une approche MCMC traditionnelle, l’algorithme MH, a été testée en section 3.4 du chapitre 3. Puis, devant des problèmes de minima locaux qui empêchaient l’algorithme de converger en temps opérationnel, nous avons appliqué un nouvel algorithme MCMC : le parallel tempering.

L’échantillonnage des distributions des coordonnées décrit une zone située dans le sud de l’Oural. Parmi les installations nucléaires connues dans cette région qui sont susceptibles de rejeter de grandes quantités de ^{106}Ru , le site de Mayak est le plus pertinent. Plus précisément, le maximum de la distribution des coordonnées est atteint en $[58.6^\circ\text{E}; 56.3^\circ\text{N}]$ pour les données ERA5 et $[58.9^\circ\text{E}; 55.7^\circ\text{N}]$ pour les données ARPEGE. De plus, la forme des densités indique que la probabilité que la source soit située ailleurs en Europe est très faible.

Les résultats montrent que le ^{106}Ru a été principalement rejeté le 26 septembre avec des quantités comprises entre 100 et 200 TBq. La variance liée à l’erreur d’observation est

estimée entre 0.40 et 0.45 en utilisant des statistiques log-normales.

Néanmoins, les distributions présentées ci-dessus ne sont pas totalement satisfaisantes. En effet, les coordonnées [60.8°E ; 55.7°N] du site de Mayak ne sont pas incluses dans les densités de probabilité de la longitude et de la latitude. Or, c'est l'installation nucléaire de la région désignée par nos densités de probabilité la plus pertinente. En d'autres termes, il est probable que les incertitudes ne soient pas bien quantifiées : les distributions semblent ne pas avoir la bonne variance.

Puisque tout l'enjeu de la méthode bayésienne est de bien agréger les incertitudes du problème, ce sujet est central. Dans le prochain chapitre, nous développons et proposons des méthodes pour améliorer la quantification des incertitudes dans le cadre des MCMC lors de la reconstruction de la source d'un accident nucléaire.

4.2 Descente de Stein à gradient variable

Dans la seconde partie de ce quatrième chapitre, nous décrivons et appliquons un algorithme récent d'échantillonnage : la descente de Stein à gradient variable, notamment décrit par Q. Liu et D. Wang 2016.

Nous avons décidé de développer et d'appliquer cet algorithme dans l'espoir de disposer d'une méthode d'échantillonnage plus efficace (plus rapide) que les méthodes MCMC développées dans les autres chapitres de cette thèse, à savoir les chapitres 3, 4, 5, et 6.

Dans cette partie, après avoir introduit et formalisé l'algorithme dans notre cadre bayésien en sections 4.2.1 et 4.2.2, nous appliquerons cette méthode au cas des rejets de ^{106}Ru . La qualité des distributions reconstruites et de l'algorithme sont évaluées en comparaison avec les résultats obtenus avec l'algorithme du parallel tempering en section 4.1.3.2.

4.2.1 Description de la méthode

Dans cette section, nous décrivons les principes de la méthode d'échantillonnage par descente de Stein à gradient variable.

La descente de gradient de Stein est une descente de gradient d'un ensemble de particules. Un algorithme de descente de gradient classique permet de minimiser une fonction de coût, et ainsi d'en trouver le minimum. Pour une fonction de coût, ce minimum équivaut au maximum de la distribution de probabilité associée (quand elle existe).

Chaque particule dans l'algorithme par descente de Stein à gradient variable tente donc de minimiser une fonction de coût. Or, le but est de retrouver une distribution, et non pas le minimum de la fonction. C'est pour cette raison qu'une quantité de répulsion est ajoutée. Plus précisément, lors de la descente de gradient des particules et du fait de l'ajout de cette quantité, celles-ci se repoussent mutuellement de telle sorte qu'elles échantillonnent la distribution invariante.

La méthode ainsi que les démonstrations mathématiques qui assurent la convergence rigoureuse des particules sont décrites par Q. Liu et D. Wang 2016. Nous présentons maintenant en détail l'algorithme 4.1 d'échantillonnage de Stein.

L'algorithme est initialisé avec un ensemble de particules de taille N_p :

$$\{\mathbf{x}_i^0\}_{i=1}^{N_p}, \quad (4.16)$$

qui est amené à évoluer. Chaque particule \mathbf{x}_i de cet ensemble est un vecteur de variables décrivant la source, par exemple :

$$\mathbf{x}_i = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r)_i. \quad (4.17)$$

Chaque particule \mathbf{x}_i est mise à jour à l'aide de la fonction $\hat{\phi}$. Cette fonction dépend de deux quantités :

Algorithme 4.1 : Descente de Stein à gradient variable

Input : Une distribution invariante $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ et un ensemble initial de particules $\{\mathbf{x}_i^0\}_{i=1}^{N_p}$ de taille N_p où \mathbf{x}_i^0 est une particule de dimension le nombre de variables du problème.

Output : Un ensemble de particules $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{N_p}$ qui estiment la distribution invariante $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$.

```

1 for  $l = 1 : N_{\text{iter}}$  do
2   |  $\mathbf{x}_i^{l+1} \leftarrow \mathbf{x}_i^l + \epsilon_l \hat{\phi}(\mathbf{x}_i^l)$  où  $\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} [k(\mathbf{x}_k^l, \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}_k^l} \ln p(\mathbf{x}_k^l | \mathbf{y}) + \nabla_{\mathbf{x}_k^l} k(\mathbf{x}_k^l, \mathbf{x})]$ 
3 end
4 return  $\{\mathbf{x}_i^{N_{\text{iter}}}\}_{i=1}^{N_p}$ 

```

- la première quantité

$$k(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}_k} \ln p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}) \quad (4.18)$$

est fondamentalement un terme de descente de gradient liant les différentes particules ;

- la seconde quantité

$$\nabla_{\mathbf{x}_k} k(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}) \quad (4.19)$$

est la quantité de répulsion qui empêche les particules d'être trop proches les unes des autres et qui permet d'échantillonner correctement la distribution invariante.

L'ensemble des particules sont ainsi progressivement mises à jour et convergent vers la distribution $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. Dans cet algorithme, plusieurs termes doivent être définis, plus particulièrement :

- la fonction noyau $k(\bullet, \bullet)$ qui évalue la similitude entre deux particules est étudiée en section 4.2.2.1 ;
- ϵ_l la valeur qui définit l'amplitude de la correction apportée à chaque itération. Cette quantité est définie en section 4.2.3.1 lors de l'application de nos méthodes au cas du ^{106}Ru ;
- le nombre d'itérations N_{iter} , le nombre de particules N_p qui dépendent du cas d'étude sont aussi définies en section 4.2.3.1.

De plus, le terme $\nabla_{\mathbf{x}} \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$, c'est-à-dire le gradient de notre distribution conditionnelle doit être calculé. Plus précisément, les dérivées partielles associées doivent être calculées pour chacune des variables. Le vecteur source que nous considérons dans cette section est

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r) \quad (4.20)$$

avec $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$. Nous allons donc calculer le gradient $\nabla_{\mathbf{x}} \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ pour \mathbf{x} rassemblant les variables de longitude, de latitude, de logarithme de débit de rejet, et de variance d'erreur d'observation.

Les prochaines parties décrivent les calculs des différentes quantités à évaluer.

4.2.2 Dérivation du noyau et du gradient du logarithme de la distribution a posteriori

Dans les prochaines sous-sections, nous décrivons :

- le choix et le calcul des termes liés au noyau en section 4.2.2.1 ;
- en section 4.2.2.3, la dérivée partielle des opérateurs d'observation \mathbf{H}_{x_1, x_2} par rapport aux variables de longitude et de latitude. Ce calcul est utile pour évaluer la dérivée partielle de $\ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ en fonction des coordonnées en section 4.2.2.4 ;
- la dérivée partielle de $\ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ en fonction des logarithmes des débits de rejet en section 4.2.2.5 ;
- la dérivée partielle de $\ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ en fonction du coefficient diagonal de la matrice de covariance de l'erreur d'observation en section 4.2.2.6.

4.2.2.1 Choix de la fonction du noyau

Nous avons choisi d'utiliser un noyau RBF (Radial Basis Function) en nous basant sur le choix de Q. Liu et D. Wang 2016. Pour deux vecteurs $\mathbf{x} = (x_j)_{j \in [1, n]}$ et $\mathbf{x}' = (x'_j)_{j \in [1, n]}$, le noyau RBF s'écrit :

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{1}{h} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|_2^2\right) = \exp\left(-\frac{1}{h} \sum_{j=1}^n (x_j - x'_j)^2\right). \quad (4.21)$$

Ce noyau a pour dérivées partielles :

$$\frac{\partial k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{\partial x_j} = -\frac{2}{h} (x_j - x'_j) k(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \quad (4.22)$$

Une nouvelle valeur h doit être définie : une proposition est faite en section 4.2.3.1.

4.2.2.2 Calcul du gradient

Dans cette section, nous calculons les composantes du gradient de $\ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ pour $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r)$:

$$\nabla_{\mathbf{x}} \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial x_2} \\ \dots \\ \frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial \ln q_t} \\ \dots \\ \frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial r} \end{array} \right\}. \quad (4.23)$$

Pour cela, nous devons définir la distribution a posteriori $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. Celle-ci dépend, d'après la formule de Bayes, de la vraisemblance ainsi que des priors. La vraisemblance est ici définie comme dans la section 4.1.3.2 comme une loi log-normale de seuil y_t . Les priors sont supposés uniformes. Nous n'avons en effet pas besoin de définir de prior log-gamma sur les logarithmes des débits de rejet dans ce cas, car nous n'utilisons pas de MCMC.

La distribution a posteriori dépend alors de la vraisemblance :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto \frac{e^{-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)}}{\sqrt{(2\pi)^{N_{\text{obs}}} |\mathbf{R}|^{1/2} \prod_{i=1}^{N_{\text{obs}}} (y_i + y_t)}}. \quad (4.24)$$

Cela donne, avec $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$ et en omettant les constantes de régularisation :

$$\ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = -\frac{1}{2r} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right) - \frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln(r). \quad (4.25)$$

En effet, les constantes de normalisation peuvent être supprimées puisque la quantité d'intérêt est la dérivée de cette distribution de probabilité et non la distribution elle-même.

Pour calculer les dérivées partielles de cette quantité, nous avons besoin de calculer les dérivées partielles de l'opérateur d'observation interpolé en espace, ce qui est le sujet de la prochaine section.

4.2.2.3 Dérivée partielle des opérateurs d'observation

Comme décrit dans le chapitre 1, nos opérateurs d'observation effectifs sont des interpolations de matrices calculées sur chaque maille d'une grille. Plus précisément, l'opérateur d'observation aux coordonnées (x_1, x_2) est interpolé sur la grille de l'ensemble des opérateurs d'observation précalculés et cette interpolation dans le cadre général s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{H}(x_1, x_2)\mathbf{q} &= \sum_{u_1=x_{1,m}}^{x_{1,M}} \sum_{u_2=x_{2,m}}^{x_{2,M}} \mathbf{H}_{u_1, u_2} w_{u_1, u_2}(x_1, x_2)\mathbf{q} \\ &= \sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} \mathbf{H}_j w_j(x_1, x_2)\mathbf{q} \end{aligned} \quad (4.26)$$

où

- N_{int} correspond au nombre d'opérateurs d'observation utilisés pour l'interpolation de $\mathbf{H}(x_1, x_2)$;
- $x_{1,m}$ et $x_{1,M}$ correspondent à la longitude minimum et maximum de l'ensemble des opérateurs d'observation utilisés pour l'interpolation de $\mathbf{H}(x_1, x_2)$;
- $x_{2,m}$ et $x_{2,M}$ correspondent à la latitude minimum et maximum de l'ensemble des opérateurs d'observation utilisés pour l'interpolation de $\mathbf{H}(x_1, x_2)$.

Dans le cas d'une interpolation bilinéaire, pour par exemple $x_1 = 10.5^\circ\text{E}$, $x_2 = 5.5^\circ\text{N}$, et une distance entre deux opérateurs d'observation précalculés de 1° , nous avons :

- $N_{\text{int}} = 4$;
- $x_{1,m} = 10^\circ\text{E}$ et $x_{1,M} = 11^\circ\text{E}$;
- $x_{2,m} = 5^\circ\text{N}$ et $x_{2,M} = 6^\circ\text{N}$.

Bien que nous continuions ici de travailler avec des interpolations bilinéaires, nous avons décrit l'équation générale (4.26) car nous souhaitons montrer que tous les opérateurs d'observation interpolés peuvent être décrits par la même formule analytique, à partir de la grille d'opérateurs d'observation précalculée. De cette façon, $\mathbf{H}(x_1, x_2)$ est une fonction qui dépend d'un certain nombre (constant) de matrices constantes.

Pour les calculs ultérieurs, nous utilisons une interpolation bilinéaire. Pour une certaine position (x_1, x_2) , nous pouvons définir les quatre matrices constantes de la grille d'opérateurs d'observation qui entourent spatialement l'opérateur d'observation $\mathbf{H}(x_1, x_2)$ associé :

$$\mathbf{H}_{\text{NW}}, \mathbf{H}_{\text{NE}}, \mathbf{H}_{\text{SW}}, \mathbf{H}_{\text{SE}} \quad (4.27)$$

comme décrit sur la figure 4.7. L'interpolation de $\mathbf{H}(x_1, x_2)$ est réalisée à partir de ces matrices :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(x_1, x_2) = & w_{nw}(x_1, x_2)\mathbf{H}_{\text{NW}} + w_{ne}(x_1, x_2)\mathbf{H}_{\text{NE}} \\ & + w_{sw}(x_1, x_2)\mathbf{H}_{\text{SW}} + w_{se}(x_1, x_2)\mathbf{H}_{\text{SE}}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Rigoureusement, $\mathbf{H}(x_1, x_2)$ pourrait être défini comme une somme sur tous les opérateurs d'observation de la grille précalculée. Chaque poids serait alors nul à l'exception de ceux des quatre matrices autour comme le montre l'équation (4.26). Le problème est donc correctement défini. Puisque cela ne change rien aux calculs, nous utiliserons cependant la définition de l'équation (4.28) pour ne pas complexifier le problème.

Pour les prochains calculs, nous avons besoin de définir les longitudes $(x_{1,w}, x_{1,e})$ et les latitudes $(x_{2,s}, x_{2,n})$ qui définissent le carré représenté sur la figure 4.7 à quatre coins de coordonnées

$$(x_{1,w}, x_{2,s}), (x_{1,w}, x_{2,n}), (x_{1,e}, x_{2,s}), (x_{1,e}, x_{2,n}). \quad (4.29)$$

Les coordonnées (x_1, x_2) où l'opérateur d'observation $\mathbf{H}(x_1, x_2)$ est calculé sont comprises dans ce carré. De plus, nous introduisons p le pas de la grille des opérateurs précalculés :

$$p = x_{2,n} - x_{2,s} = x_{1,e} - x_{1,w}. \quad (4.30)$$

Dans le cas d'une interpolation bilinéaire, les poids sont des fonctions linéaires des coordonnées. À partir des informations précédentes, nous pouvons calculer les poids, ce qui

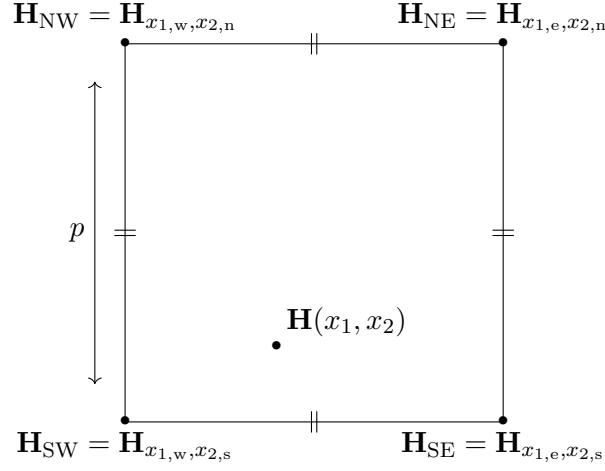


Figure 4.7 – Position de l'opérateur d'observation \mathbf{H}_{x_1, x_2} et des quatre opérateurs d'observation utilisés pour son interpolation.

donne :

$$\begin{aligned}
 p^2 \mathbf{H}(x_1, x_2) &= (x_{1,w} + p - x_1)(x_2 - x_{2,s}) \mathbf{H}_{NW} + (x_1 - x_{1,w})(x_2 - x_{2,s}) \mathbf{H}_{NE} \\
 &\quad + (x_{1,w} + p - x_1)(x_{2,s} + p - x_2) \mathbf{H}_{SW} + (x_1 - x_{1,w})(x_{2,s} + p - x_2) \mathbf{H}_{SE}.
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

L'opérateur d'observation, fonction linéaire de x_1 et x_2 par interpolation, peut maintenant être dérivé :

$$\frac{\partial \mathbf{H}(x_1, x_2)}{\partial x_1} = \frac{1}{p^2} (x_2 - x_{2,s}) (\mathbf{H}_{NE} - \mathbf{H}_{NW} + \mathbf{H}_{SW} - \mathbf{H}_{SE}) + \frac{1}{p} (\mathbf{H}_{SE} - \mathbf{H}_{SW}) \tag{4.32}$$

et

$$\frac{\partial \mathbf{H}(x_1, x_2)}{\partial x_2} = \frac{1}{p^2} (x_1 - x_{1,w}) (\mathbf{H}_{NE} - \mathbf{H}_{NW} + \mathbf{H}_{SW} - \mathbf{H}_{SE}) + \frac{1}{p} (\mathbf{H}_{NW} - \mathbf{H}_{SW}). \tag{4.33}$$

4.2.2.4 Dérivée partielle en fonction des variables de longitude et de latitude

Maintenant que nous disposons de la dérivée partielle d'un opérateur d'observation en fonction des coordonnées, nous pouvons calculer la dérivée partielle du logarithme de la distribution a posteriori en fonction des coordonnées. Pour simplifier la notation, nous considérons dans ce qui suit que $\ln y = \ln \frac{y}{c_{\text{ref}}}$ et nous rappelons que :

$$\ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right) = \left\{ \begin{array}{l} \ln(y_1 + y_t) - \ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_1 + y_t) \\ \dots \\ \dots \\ \ln(y_{N_{\text{obs}}} + y_t) - \ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_{N_{\text{obs}}} + y_t) \end{array} \right\} \tag{4.34}$$

où $(\mathbf{H}\mathbf{x})_i$ est le coefficient i du vecteur $\mathbf{H}\mathbf{x}$. On peut développer, d'abord avec la formule générale 4.26 :

$$\begin{aligned} & \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right) \\ &= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \left((\ln(y_i + y_t))^2 + \left(\ln \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} (\mathbf{H}_j \mathbf{q})_i w_j(x_1, x_2) + y_t \right) \right)^2 \right. \\ & \quad \left. - 2 \ln(y_i + y_t) \ln \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} (\mathbf{H}_j \mathbf{q})_i w_j(x_1, x_2) + y_t \right) \right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

On peut ensuite dériver selon la longitude, les étapes de calcul n'étant pas écrites, mais reposant sur les résultats de la section 4.2.2.3 :

$$\frac{\partial \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)}{\partial x_1} = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} L_i \frac{\partial \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} (\mathbf{H}_j \mathbf{q})_i w_j(x_1, x_2) + y_t \right)}{\partial x_1} \quad (4.36)$$

avec

$$L_i = L_i(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}) = 2 \frac{-\ln(y_i + y_t) + \ln \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} (\mathbf{H}_j \mathbf{q})_i w_j(x_1, x_2) + y_t \right)}{\sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} (\mathbf{H}_j \mathbf{q})_i w_j(x_1, x_2) + y_t}. \quad (4.37)$$

Par la suite, en utilisant l'égalité

$$\frac{\partial \ln(F(x))^2}{\partial x} = \frac{2 \frac{\partial F(x)}{\partial x}}{F(x)} \ln(F(x)), \quad (4.38)$$

et la formule particulière 4.28, nous pouvons dériver après quelques étapes de calculs :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial x_1} &= -\frac{1}{2r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} L_i \left(\frac{1}{p^2} (x_2 - x_{2,s}) ((\mathbf{H}_{\text{NE}} - \mathbf{H}_{\text{NW}} + \mathbf{H}_{\text{SW}} - \mathbf{H}_{\text{SE}}) \mathbf{q})_i \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{p} ((\mathbf{H}_{\text{SE}} - \mathbf{H}_{\text{SW}}) \mathbf{q})_i \right). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Le même cheminement peut être utilisé pour calculer la dérivée du logarithme de la distribution a posteriori compte tenue de la latitude :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial x_2} &= -\frac{1}{2r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} L_i \left(\frac{1}{p^2} (x_1 - x_{1,w}) ((\mathbf{H}_{\text{NE}} - \mathbf{H}_{\text{NW}} + \mathbf{H}_{\text{SW}} - \mathbf{H}_{\text{SE}}) \mathbf{q})_i \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{p} ((\mathbf{H}_{\text{NW}} - \mathbf{H}_{\text{SW}}) \mathbf{q})_i \right). \end{aligned} \quad (4.40)$$

4.2.2.5 Dérivée partielle en fonction des logarithmes des débits de rejet

Nous décrivons maintenant la dérivée partielle de la distribution a posteriori en fonction des logarithmes des débits de rejet. Nous commençons par dériver la distribution a posteriori en fonction d'un débit de rejet q_t associé à l'impulsion t . Comme pour la section 4.2.2.4 précédente, les étapes de calculs sont omises. Nous avons

$$\frac{\partial \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)}{\partial q_t} = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} L_i(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}) \sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} h_{j,i}^t w_j(x_1, x_2) \quad (4.41)$$

où \mathbf{H}_j désigne une des matrices de la grille précalculée d'opérateurs d'observation, et où $h_{j,i}^t$ correspond au coefficient d'indice (i, t) de \mathbf{H}_j . Nous rappelons que \mathbf{H}_j est une matrice de dimensions $N_{\text{obs}} \times N_{\text{imp}}$ et \mathbf{q} un vecteur de dimension N_{imp} . Cela donne

$$\frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial q_t} = -\frac{1}{2r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} L_i(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}) \sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} h_{j,i}^t w_j(x_1, x_2). \quad (4.42)$$

Nous en déduisons maintenant par rapport au logarithme du débit de rejet :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)}{\partial \ln q_t} &= \frac{\partial \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \mathbf{R}^{-1} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)}{\partial q_t} \frac{\partial q_t}{\partial \ln q_t} \\ &= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} L_i(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}) \sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} h_{j,i}^t w_j(x_1, x_2) q_t, \end{aligned} \quad (4.43)$$

et donc

$$\frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial \ln q_t} = -\frac{1}{2r} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} L_i(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}) \sum_{j=1}^{N_{\text{int}}} h_{j,i}^t w_j(x_1, x_2) q_t. \quad (4.44)$$

4.2.2.6 Dérivée partielle en fonction du coefficient diagonal de la matrice de covariance de l'erreur d'observation

Finalement, nous décrivons la dernière dérivée partielle de la distribution a posteriori qui dépend du coefficient diagonal de la matrice de covariance de l'erreur d'observation. Nous avons simplement :

$$\frac{\partial \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{\partial r} = \frac{1}{2r^2} \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right)^\top \ln \left(\frac{\mathbf{y} + \mathbf{y}_t}{\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t} \right) - \frac{N_{\text{obs}}}{2} \frac{1}{r}. \quad (4.45)$$

4.2.3 Application à l'accident du ¹⁰⁶Ru

Dans cette section, maintenant que les quantités liées au noyau et à la pdf conditionnelle ont été calculées, nous appliquons la méthode de descente de Stein à gradient variable

à la reconstruction de la source de ^{106}Ru . L'objectif est d'évaluer la pertinence de cette méthode d'échantillonnage.

Nous utilisons la même paramétrisation physique que dans la section 4.1.3, c'est-à-dire lors de l'application de l'algorithme du parallel tempering. Le jeu de données utilisé est lui légèrement modifié : les observations mesurées à des stations proches de l'installation nucléaire de Mayak dans le sud de l'Oural sont retirées. En effet, les distributions reconstruites dans la section 4.1.3 montrent que les sources considérées comme probables se situent dans cette zone. Or, ldX est un modèle de transport à longue distance et les prédictions d'un tel modèle ne sont pertinentes qu'à partir d'une certaine distance de la source considérée. Plus précisément, le modèle n'est valide qu'à partir d'une distance du point de rejet correspondant à environ 5 mailles. Ceci est principalement dû à l'effet de dilution dans la première maille liée au modèle eulérien.

La modification du vecteur d'observations a pour effet d'augmenter les variances des distributions de la longitude et de la latitude. Cela n'affecte pas les conclusions de la section 4.1.3.3.

D'autre part, le domaine spatial étudié est le sous-domaine d décrit en section 4.1.3.2. Ce domaine est de dimensions $[47^\circ\text{E}; 62^\circ\text{E}]$ et $[53^\circ\text{N}; 58^\circ\text{N}]$ et un opérateur d'observation y est calculé tous les 0.5° .

Les données météorologiques utilisées sont les données ERA5 de ECMWF. Comme précisé dans la section 4.2.2.2 :

- la vraisemblance est définie comme dans la section 4.1.3.2 comme une loi log-normale de seuil $y_t = 1\text{mBq.m}^{-3}$;
- les priors sont supposés uniformes.

4.2.3.1 Paramétrisation de l'algorithme

Afin d'accélérer la convergence des particules, nous avons décidé de paramétriser l'algorithme de la manière suivante :

- le taux d'apprentissage initial ϵ est choisi égal à 0.1. Ce taux est adapté à chaque variable de chaque particule tout au long de l'algorithme d'échantillonnage de Stein à l'aide de l'algorithme Adagrad (Duchi et al. 2011). Cette méthode permet de choisir automatiquement un taux d'apprentissage adapté à la variable tout au long de la progression des particules.

Pour décrire en détail cet adaptation du taux d'apprentissage, nous avons besoin de définir la matrice des directions de descente de gradient, ou matrice des corrections, ϕ . On peut noter qu'à chaque itération de l'algorithme, nous modifions N_p vecteurs de taille N_{var} , où N_p correspond au nombre de particules et N_{var} au nombre de variables.

Autrement dit, à chaque itération, $N_p \times N_{\text{var}}$ paramètres de correction sont calculés, ces paramètres étant compris dans les vecteurs

$$\left[\hat{\phi}(x_1^l), \dots, \hat{\phi}(x_{N_p}^l) \right] \quad (4.46)$$

La matrice des directions de descente de gradient ϕ est définie à partir de ces paramètres. Plus précisément, la composante (i, j) de cette matrice correspond au paramètre qui met à jour la variable j de la particule i .

Nous décrivons maintenant comment le taux d'apprentissage est adapté à partir de cette matrice ϕ . À chaque itération de l'algorithme d'échantillonnage, une matrice G de taille $N_p \times N_{\text{var}}$ est mise à jour à l'aide de ϕ :

$$G_{i,j} = G_{i,j} + \phi_{i,j}^2 \quad (4.47)$$

pour tout i et tout j .

Cette matrice G met à jour à chaque itération le taux d'apprentissage initial de sorte que la correction apportée à l'itération l pour la variable j de la particule i notée $(x_i^l)_j$ soit :

$$\frac{\epsilon}{\sqrt{G_{i,j}}} \hat{\phi}(x_i^l)_j. \quad (4.48)$$

- Le réel h utilisé pour définir le noyau RBF est mis à jour tout au long du parcours des particules selon la proposition de Q. Liu et D. Wang 2016.
- Un bruit stochastique dépendant d'un terme de température T introduit par un mécanisme d'annealing est utilisé. Plus précisément, à chaque mise à jour des particules, celles-ci sont perturbées par le bruit

$$\epsilon = u\sqrt{2T\theta} \quad (4.49)$$

où u est un bruit gaussien : $u \sim \mathcal{N}(0, 1)$, et θ un réel constant égal à 10^{-3} . T la température est initialisée à 100 et sa valeur est réduite progressivement tout au long de l'algorithme pour atteindre 1 au bout de $3 \cdot 10^4$ itérations

- Nous utilisons un total de 100 particules et procédons pendant 10^5 itérations.

4.2.3.2 Application de la méthode

La méthode d'échantillonnage par gradient de Stein variable est appliquée dans cette partie au cas du ^{106}Ru . Les variables des particules sont initialisées indépendamment :

- les variables de longitude des particules sont initialisées à partir d'une distribution gaussienne de moyenne 55°E et d'écart-type 1.73° ;
- les variables de latitude sont initialisées comme échantillons d'une distribution gaussienne de moyenne 54°E et d'écart-type 1° . Ce choix d'une faible variance s'explique par la petite taille du domaine d selon la latitude ;

- les variables de logarithmes des débits de rejet des particules sont initialisées à partir d'une distribution gaussienne de moyenne 10 et de variance 5. Nous rappelons que le logarithme du débit de rejet sur le 25 ou le 26 septembre était estimé à des valeurs ~ 21 lors de l'application de l'algorithme du parallel tempering en section 4.1.3. Par conséquent, des valeurs en dessous de 15 peuvent être considérées comme négligeables ;
- enfin, les variables de variance d'erreur d'observation sont initialisées à l'aide d'une distribution gaussienne de moyenne 1 et de variance 0.05.

Nous reconstruisons les densités de probabilité de la longitude, de la latitude, et du TRRA. Ces densités de probabilité sont présentées dans la figure 4.8. Plusieurs choses

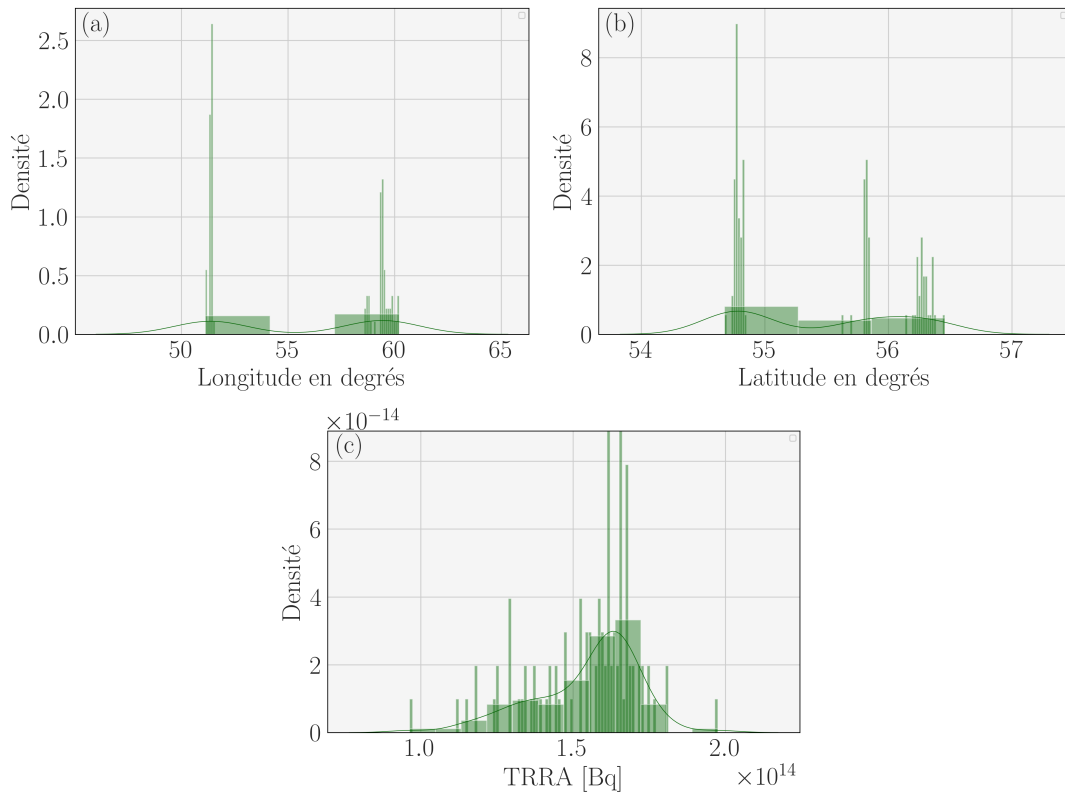


Figure 4.8 – Densité de probabilité des variables décrivant la source de ^{106}Ru échantillonnée à l'aide de la descente de Stein à gradient variable : longitude (a), latitude (b), TRRA (c).

peuvent être observées :

- le TRRA reconstruit sur le graphe 4.8.c est compris entre 100 et 200 TBq ce qui est cohérent avec les résultats obtenus avec le parallel tempering ;
- néanmoins, les densités de probabilité de la longitude et de la latitude montrent

clairement que l'algorithme n'a pas convergé et qu'à peu près la moitié des particules sont bloquées dans des minima locaux de coordonnées.

Ces problèmes de minima locaux ont été notés dès les premières expérimentations et l'ajout d'un bruit stochastique puis d'un terme de température avaient pour but explicite de les résoudre. Malgré cette modification de l'algorithme, les particules ne convergent pas vers la distribution invariante $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ (ce dont on peut se convaincre en étudiant la distribution du coût associé aux variables échantillonnées, non décrite ici).

Les problèmes de minima locaux semblent très liés à la recherche de la position de la source. En effet, dans l'expérimentation suivante, l'algorithme est appliqué à l'identique sauf que les variables de longitude des particules sont initialisées à partir d'une distribution gaussienne de moyenne 59°E et de variance 1° . Les densités de probabilité reconstruites de la longitude et de la latitude sont décrites dans la figure 4.9.

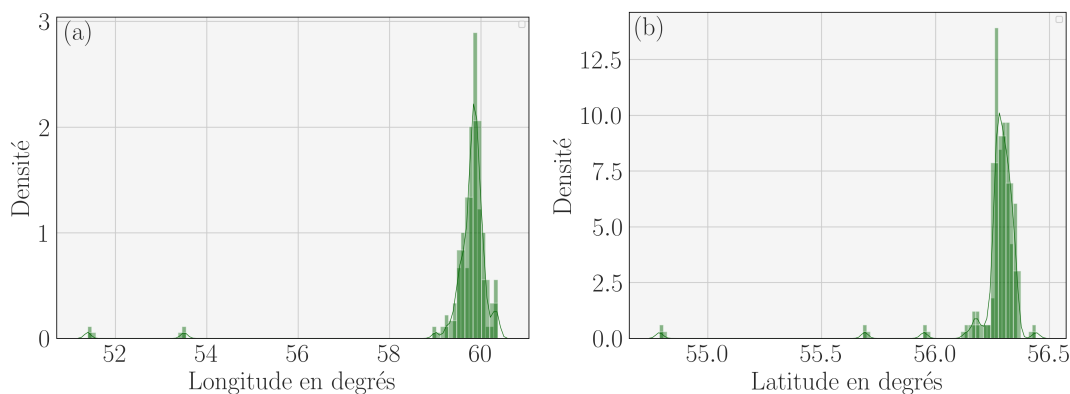


Figure 4.9 – Densités de probabilité des variables décrivant la source de ^{106}Ru échantillonnée à l'aide de la descente de Stein à gradient variable : longitude (a), latitude (b). Les longitudes des particules sont initialisées à l'aide d'une distribution gaussienne de moyenne 59°E et de variance 1° .

La densité de probabilité de la longitude et de la latitude jointe décrit maintenant une zone située dans le sud de l'Oural, cohérente avec les résultats de la section 4.1.3.2.

Plusieurs heures peuvent être nécessaires pour que toutes les particules convergent malgré l'utilisation de l'algorithme Adagrad. En comparaison, l'algorithme du parallel tempering ne nécessite qu'une dizaine de minutes pour reconstruire rigoureusement les distributions a posteriori.

Il peut toutefois être noté que le temps de convergence des particules vers la distribution invariante (éventuellement biaisée comme c'est le cas ici) est très dépendant du nombre de particules utilisé. Ainsi, le temps de convergence n'est que de quelques minutes pour une dizaine de particules.

En conclusion,

- les expérimentations révèlent que les particules peuvent rester indéfiniment coincées dans des minima locaux de coordonnées, à l'instar de nos chaînes de Markov lors de l'application de l'algorithme de Metropolis-Hastings en section 3.4.2 ;
- la convergence d'un grand nombre de particules, et donc l'exécution d'un échantillonnage rigoureux, requiert un temps bien plus important que la méthode MCMC du *parallel tempering*.

Pour ces deux raisons, les études avec cette méthode n'ont donc pas été poursuivies.

Dans le prochain chapitre, nous abordons le problème de la quantification d'incertitudes et proposons plusieurs méthodes pour améliorer leur estimation dans le cadre d'un échantillonnage par méthodes MCMC. Le chapitre 5 se lit comme une suite directe à la conclusion 4.1.3.3 de la première partie de ce chapitre.

5 Méthodes de quantification des incertitudes

Sommaire

5.1	Fonction de vraisemblance	121
5.1.1	Choix de la fonction de vraisemblance	121
5.1.2	Incertitudes dans le choix de la vraisemblance	122
5.1.3	Propositions de distributions de probabilité adaptées	123
5.2	Modélisation de la matrice de covariance	130
5.2.1	Limitations de la modélisation de \mathbf{R}	130
5.2.2	Proposition d'une méthode de tri en fonction de la pertinence	132
5.2.3	Tri général des observations	142
5.2.4	Classification spatiale des observations	143
5.3	Méthodes d'ensemble	144
5.3.1	Création de l'ensemble d'opérateurs d'observation	145
5.3.2	Évaluation de la qualité d'un ensemble	147
5.4	Application au cas du ^{106}Ru	152
5.4.1	Paramétrisation	152
5.4.2	Application des méthodes	157
5.5	Application au cas des feux de Tchernobyl en avril 2020	172
5.5.1	Description	172
5.5.2	Application des méthodes	176

Dans le chapitre précédent, nous avons développé une méthode bayésienne nous permettant de reconstruire les distributions de variables décrivant la source d'un rejet de radionucléides. Cette méthodologie bayésienne nous permet de quantifier :

- les incertitudes liées à une variable spécifique, c'est-à-dire les variances et formes de nos distributions ;
- et les incertitudes liées à la fonction de vraisemblance, plus globales. Ce sont les hyperparamètres de la matrice de covariance d'erreur d'observation définissant \mathbf{R} , que l'on modélise comme des variables réelles.

Les variances de nos distributions étant directement proportionnelles à la valeur de la matrice \mathbf{R} , ces deux types d'incertitudes sont très dépendantes. Par ailleurs, on peut

noter que la méthodologie bayésienne nous permet également de quantifier les incertitudes des incertitudes, puisque nous pouvons reconstruire les distributions des paramètres de la matrice de covariance d'erreur d'observation, qui quantifient les incertitudes de ces coefficients.

Dans l'application décrite dans la section 4.1.3 du chapitre 4, nous évoquions le fait que les incertitudes liées aux distributions des variables décrivant la source étaient mal quantifiées. Cette faible valeur de confiance que nous accordions à nos distributions reconstruites était estimée à partir de notre observation que le complexe nucléaire de Mayak n'était pas inclus dans la distribution des coordonnées. Cette valeur de confiance accordée est liée à un autre type d'incertitudes.

En fait, deux concepts indépendants correspondant à des incertitudes peuvent être introduits :

- les incertitudes reconstruites dans le cadre de notre formalisme bayésien ;
- les incertitudes qui correspondent à notre intuition, que l'on ne peut objectiver. Cette intuition peut être basée
 - sur une donnée qui est bien assimilée dans le cadre bayésien, mais d'une façon qui ne nous convient pas ;
 - sur une donnée qui n'est pas assimilée dans le cadre bayésien (parce que l'on ne l'aura pas intégré). On peut par exemple penser à l'incertitude liée au modèle de transport : nous utilisons au sein du cadre bayésien un unique modèle de transport, et de fait, un unique opérateur d'observation \mathbf{H} qui est assimilé comme la vérité.

La valeur de confiance que nous accordions à nos distributions reconstruites correspond à ce deuxième type d'incertitudes, tandis que les incertitudes mal reconstruites étaient évoquées au sens de la variance de nos distributions.

L'objectif de ce chapitre est de

- réduire les incertitudes du problème, dans le sens d'augmenter notre confiance en nos distributions ;
- ou de mieux quantifier les incertitudes, cette fois-ci dans le sens de mieux évaluer la forme et la variance de nos distributions ;

les deux étant équivalents. Le cœur du problème se situe dans notre choix de quantifier les incertitudes (dans le sens de la matrice \mathbf{R}) dans le cadre bayésien, plutôt que de les quantifier à l'extérieur de celui-ci. Si l'on souhaite que les incertitudes soient bien quantifiées, il faut donner au formalisme bayésien la capacité de les assimiler.

Pour cela, nous allons chercher dans ce chapitre à mieux intégrer différentes sources d'incertitudes dans le cadre de reconstruction bayésien, et à veiller à ce qu'elles soient bien

assimilées par celui-ci.

Au préalable, il nous faut déterminer où se trouvent nos différentes sources d'incertitudes. L'équation (3.2) peut être développée comme suit :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto p_{\text{likelihood}}(\mathbf{y}|\mathbf{H}_{x_1,x_2}(m)\mathbf{q}, \mathbf{R})p_{\text{prior}}(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, \mathbf{R}, \dots) \quad (5.1)$$

où les incertitudes sont contenues dans

- le vecteur des observations \mathbf{y} ;
- la définition des modèles physiques : les données météorologiques m et le modèle de dispersion représenté par l'opérateur d'observation associé \mathbf{H} ;
- la définition de la vraisemblance : son choix et la conception de la matrice de covariance des erreurs associée \mathbf{R} ;
- les choix de :
 - la représentation de l'évolution temporelle du débit de rejet par un vecteur de débits de rejet \mathbf{q} ;
 - la représentation de l'opérateur d'observation \mathbf{H}_{x_1,x_2} , quand la position est inconnue, par interpolation bilinéaire ;
 - la représentation des observations. Les observations sont des mesures réalisées à des stations spécifiques. Ces stations sont contenues dans une maille, et nous calculons les prédictions correspondantes au centre de cette maille et non à la position exacte des stations.
- le choix des distributions a priori.

Ces différentes sources d'incertitudes sont décrites dans l'équation 5.1. Les incertitudes liées au modèle physique sont en vert. Celles liées à des choix de représentation, de modélisation mathématique, sont en bleu. Les incertitudes associées au choix des distributions de probabilité sont en rouge.

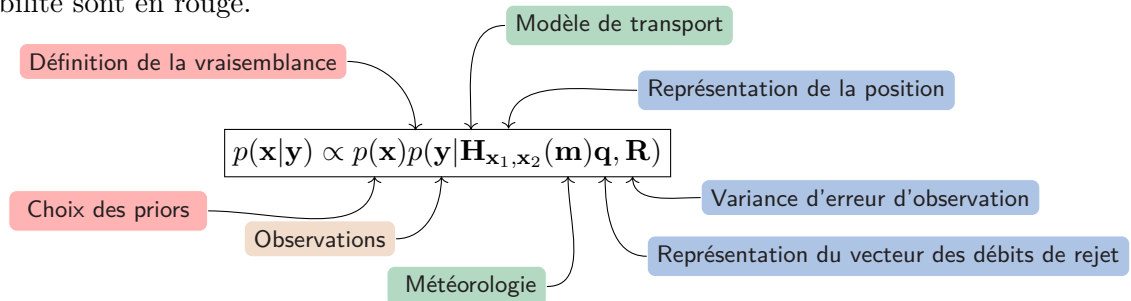


Figure 5.1 – Description des sources d'incertitudes dans la formule de Bayes appliquée au cas de la reconstruction de sources.

Dans ce chapitre, nous développons plusieurs méthodes pour mieux quantifier les incertitudes qui émanent des modèles physiques et de la définition de la distribution de la vraisemblance. Plus précisément, nous étudions :

- dans un premier temps, la définition de la vraisemblance comme distribution de probabilité en section 5.1 ;
- ensuite, en section 5.2 la définition de la matrice de covariance de la vraisemblance, i.e., la définition de la matrice \mathbf{R} ;
- enfin, la modélisation et l'intégration d'incertitudes météorologiques et du modèle de transport dans notre formalisme bayésien en section 5.3.

Puis nous appliquons ces méthodes en section 5.4 sur l'évènement du ^{106}Ru . Dans une dernière partie, en section 5.5, la méthode de reconstruction de source bayésienne est validée sur un autre cas d'application très récent : celui des émissions de radionucléides pendant l'épisode des feux de Tchernobyl en avril 2020.

Le travail théorique décrit dans ce chapitre accompagné de l'application des méthodes sur l'évènement du ^{106}Ru ont fait l'objet de l'article Dumont Le Brazidec et al. 2021.

5.1 Fonction de vraisemblance

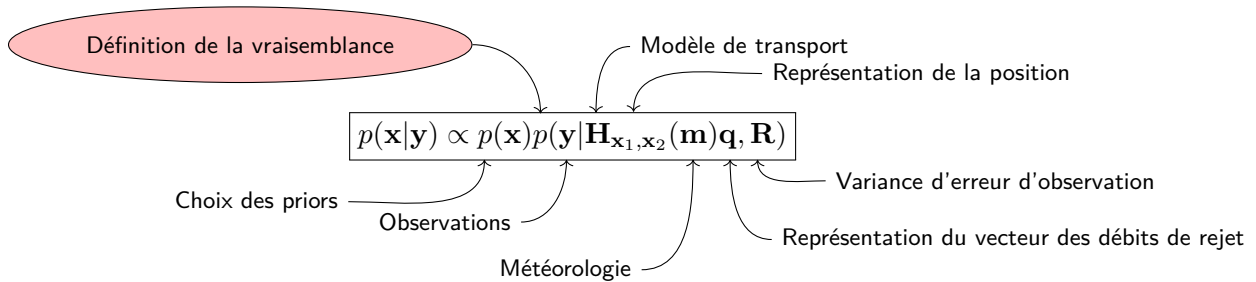


Figure 5.2 – Description des sources d’incertitudes dans la formule de Bayes appliquée au cas de la reconstruction de sources. On se concentre sur la définition de la vraisemblance $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$.

Dans cette première partie, nous nous concentrons sur les incertitudes provenant du choix de la fonction de vraisemblance comme décrit dans l’équation (5.2). C’est un choix qui, en effet, comporte de l’incertitude comme nous tentons de l’explicitier en sections 5.1.1 et 5.1.2. Le choix de la vraisemblance étant par ailleurs subjectif, nous définissons une liste de critères en section 5.1.3.1 afin de choisir de manière juste. Enfin, nous proposons plusieurs distributions de probabilité pour définir la vraisemblance dans la partie 5.1.3.2, en discutant leurs pertinences respectives.

5.1.1 Choix de la fonction de vraisemblance

La fonction de coût est la réponse à une question de jugement ; elle mesure le préjudice, ou coût, de la différence entre une observation et une prédiction.

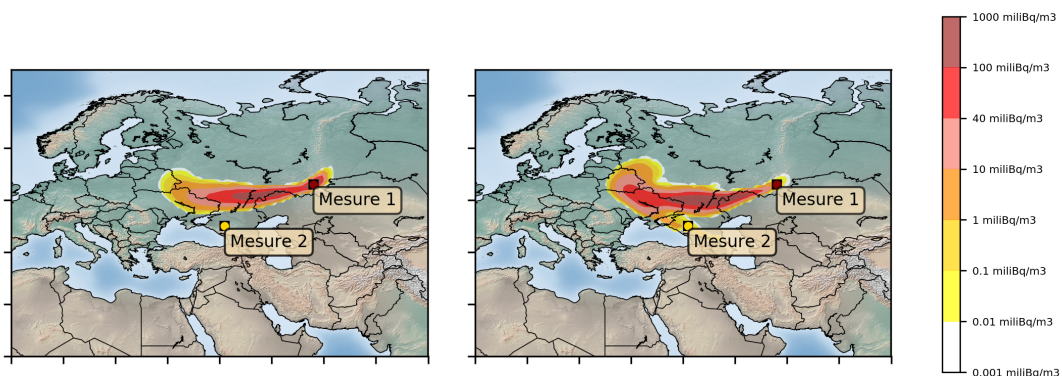


Figure 5.3 – Deux panaches (pour deux sources différentes \mathbf{x}) et deux observations. Chacun des panaches reproduit mieux une des deux mesures. Comment choisir le panache le plus approprié, et donc évaluer la meilleure source ?

Sur la figure 5.3, sont représentés :

- deux panaches correspondant au transport de radionucléides émanant de deux sources différentes ;
- deux observations : une en Roumanie et une en Russie.

Un des panaches permet de mieux reproduire la première observation, tandis que l'autre panache permet de mieux reproduire la deuxième observation.

De cette situation émerge la question suivante : quel est le meilleur des deux panaches ? Laquelle question engendre une nouvelle autre question : quelle est la meilleure source ? Abstraction faite des a priori, la meilleure source est celle qui correspond le mieux aux observations. Ceci entraîne alors une troisième question : comment définir à quel point une source correspond bien aux observations ?

La réponse à cette dernière question, ouverte, est donnée par le choix d'une fonction de coût ou d'une fonction de vraisemblance, les deux étant liées par les équivalences variationnelles et bayésiennes décrites en section 3.2.4 du chapitre 3. Ce choix arbitraire est nécessaire puisqu'il permet de disposer d'une fonction capable de prononcer un jugement sur la pertinence d'une source.

5.1.2 Incertitudes dans le choix de la vraisemblance

Le choix de la fonction de vraisemblance est donc un choix de modélisation, qui comporte de l'incertitude, comme toute modélisation. La décision d'utiliser, par exemple, une vraisemblance log-normale de seuil $y_t = 1\text{mBq.m}^{-3}$ a un impact décisif sur les distributions finales. Cette fonction de vraisemblance ne constitue pas nécessairement le meilleur choix. Il n'existe d'ailleurs pas de critères objectifs pour juger de la pertinence d'une fonction de vraisemblance. Intuitivement, il semble que l'on peut néanmoins juger de la justesse d'une fonction de vraisemblance à l'aide de deux critères :

- le premier étant que la distribution doit avoir autant que possible, selon les incertitudes du problème, un extremum à la vraie solution du problème (dans notre cas : la vraie source) ;
- le deuxième étant que la distribution des incertitudes doit être aussi proche du doute humain raisonnable et pertinent que possible.

C'est ce second critère qui est totalement subjectif et pour lequel il n'existe pas de définition claire.

On peut essayer de comprendre le problème du choix de la vraisemblance par une analogie. La fonction de coût (ou de vraisemblance) est un choix de répartition de l'information.

Supposons que nous recherchons un paramètre qui configure un certain modèle. Supposons aussi que trois précédents utilisateurs aient déjà utilisé ce modèle auparavant avec le bon paramètre, mais qu'ils aient tous les trois une certaine propension à ne pas dire la vérité, ou à se tromper. Nous pouvons affecter une valeur de vérité à chacun d'entre eux. Nous

disposons alors de trois valeurs du modèle pondérées par leurs valeurs de vérité, et nous pouvons donc inférer la distribution de probabilité de la valeur du paramètre à partir de ces données. Nous disposons d'incertitudes autour de la valeur du paramètre.

Mais il existe bien une seconde incertitude, celle relative à la répartition de la confiance, c'est-à-dire l'incertitude par rapport aux valeurs de vérité assignées aux utilisateurs. Nous pourrions évaluer cette incertitude à partir d'autres expériences, où nous pourrions estimer la valeur de vérité pertinente à accorder à chaque précédent utilisateur du modèle.

Dans le cas de reconstruction de sources d'accidents nucléaires, si l'on disposait d'un très grand nombre de cas réels dont on connaît la source, on pourrait étudier les performances de différents choix de vraisemblance. Ainsi, il semble qu'il existe bien des incertitudes réelles et quantifiables, ou en tout cas il existe bien une manière de juger de manière objective des performances d'une fonction de vraisemblance. Mais comme nous ne disposons pas d'un très grand nombre de cas réels¹, nous sommes obligés de nous fonder sur des critères subjectifs pour juger si la quantification des incertitudes liées au choix d'une vraisemblance est juste.

5.1.3 Propositions de distributions de probabilité adaptées

Dans le domaine de l'évaluation de sources de radionucléides, la plupart des vraisemblances sont définies comme étant :

- gaussiennes (Yee 2008 ; Winiarek et al. 2012 ; Saunier et al. 2013 ; Bardsley et al. 2014 ; Yee et al. 2014 ; Winiarek et al. 2014 ; Rajaona et al. 2015 ; Tichý et al. 2016),
- ou plus récemment log-normales (Delle Monache et al. 2008 ; Y. Liu et al. 2017 ; Saunier et al. 2019 ; Dumont Le Brazidec et al. 2020, 2021), ou similaires à une distribution log-normale (Senocak et al. 2008).

Nous nous intéressons dans un premier temps au choix gaussien classique. La densité de probabilité d'une loi gaussienne multivariée (pdf), de moyenne \mathbf{Hx} et de matrice de covariance \mathbf{R} , s'écrit

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{N_{\text{obs}}/2} |\mathbf{R}|^{1/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{Hx})^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{Hx})}{2}\right) \quad (5.2)$$

avec N_{obs} la taille du vecteur \mathbf{y} . On suppose dans un premier temps que la matrice de covariance \mathbf{R} est égale à $r\mathbf{I}$ avec r un coefficient diagonal positif et \mathbf{I} la matrice identité. La fonction de coût, c'est-à-dire l'opposé de la log-vraisemblance de la fonction de densité

1. Cependant, nous pourrions considérer une approche basée sur des cas synthétiques, qui peuvent être engendrés en grand nombre.

de probabilité gaussienne (pdf) s'écrit (en omettant les constantes de normalisation)

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = -\ln p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{N_{\text{obs}} \ln r}{2} + \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})}{2r}. \quad (5.3)$$

Ce choix accompagné de l'hypothèse classique $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$ équivaut à considérablement favoriser les valeurs élevées : par exemple, la valeur de la fonction de coût gaussienne d'un couple observation-prédiction $c_1 = (y = 100 \text{ mBq.m}^{-3}, y_S = 120 \text{ mBq.m}^{-3})$ est cent fois supérieure à celle de $c_2 = (y = 10 \text{ mBq.m}^{-3}, y_S = 12 \text{ mBq.m}^{-3})$.

En d'autres termes, réduire la différence entre l'observation et la prédiction du couple c_1 est un objectif cent fois plus important que pour le couple c_2 . Cela signifie que la modélisation inverse avec la loi gaussienne et $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$ est dominée par les mesures les plus élevées. Ainsi, toute mesure qui sera un ordre de grandeur plus petit que l'observation la plus élevée sera négligée dans la reconstruction de la source. Si l'on considère que toutes les observations doivent apporter de l'information, alors la fonction gaussienne ne paraît pas un choix judicieux de vraisemblance.

Ce problème de la loi gaussienne est dû au choix de modélisation de la matrice \mathbf{R} par une seule variable r . En pratique, \mathbf{R} sera très souvent modélisée par un nombre restreint de paramètres, et donc, l'évaluation des différences sera souvent biaisée par l'ordre de grandeur des observations.

Dans la prochaine section, plutôt que d'examiner chaque distribution de probabilité, nous définissons plusieurs critères qu'une vraisemblance bien fondée nous semble devoir satisfaire.

5.1.3.1 Définition de critères

Dans cette section, nous proposons une liste de critères objectifs pour juger de la pertinence d'une vraisemblance.

En effet, on ne peut définir de meilleure vraisemblance, mais on peut rendre ce choix moins arbitraire en considérant une liste de critères. Les critères évidents qu'une fonction de coût doit satisfaire sont les suivants :

- la fonction est de valeur nulle lorsque les observations et les prédictions sont égales,
- la valeur de cette fonction augmente lorsque la différence entre les valeurs observées et prédites augmentent.

Ces critères sont satisfaits par beaucoup de distributions de probabilité. Nous proposons donc d'y ajouter la liste suivante de critères plus précis et sélectifs :

- support positif : la vraisemblance doit être définie sur l'intervalle semi-infini $[0, +\infty[$, puisque les observations et les prédictions sont toutes positives par nature ;
- symétrie entre le vecteur de prédictions et le vecteur d'observations, c'est-à-dire,

$$p(\mathbf{y}; \mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{R}) = p(\mathbf{H}\mathbf{x}; \mathbf{y}, \mathbf{R}). \quad (5.4)$$

Le couple $(y = 20\text{mBq.m}^{-3}, y_S = 40\text{mBq.m}^{-3})$ doit avoir la même pénalité que $(y = 40\text{mBq.m}^{-3}, y_S = 20\text{mBq.m}^{-3})$. Autrement dit, on suppose que la surestimation des observations doit être à peu près autant pénalisée que leur sous-estimation ;

- relativité : le rapport du coût d'un couple $(20\text{mBq.m}^{-3}, 40\text{mBq.m}^{-3})$ avec le coût d'un couple $(200\text{mBq.m}^{-3}, 400\text{mBq.m}^{-3})$ doit être atténué et proche de 1 en règle générale. C'est ce critère qui rend la recherche de la source indépendante de l'ordre de grandeur des observations ;
- avec un paramètre de position (qui joue le rôle des prédictions modélisées) et une matrice de covariance. En statistique, le paramètre de position d'une distribution de probabilité est le paramètre qui détermine le "lieu" ou le déplacement de la distribution. Dans le cas de la loi gaussienne définie dans l'équation (5.3), par exemple, la variable y est localisée par rapport au terme de position $\mathbf{y}_S = \mathbf{H}\mathbf{x}$, le vecteur des prédictions.

5.1.3.2 Suggestions de fonctions de vraisemblance

Trois distributions de probabilité satisfaisant cette liste de critères ont été distinguées : la distribution log-normale déjà utilisée dans plusieurs études, et les distributions log-Laplace et log-Cauchy.

La densité de probabilité log-Laplace est définie telle que

$$p_{\text{log-Laplace}}(x; \mu, \sigma) = \begin{cases} \frac{1}{2\sigma x} e^{-\frac{|\ln x - \mu|}{\sigma}}, & \text{si } x > 0; \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases} \quad (5.5)$$

et la densité de probabilité log-Cauchy s'écrit

$$p_{\text{log-Cauchy}}(x; \mu, \sigma) = \begin{cases} \frac{1}{x\pi\sigma \left(1 + \left(\frac{\ln x - \mu}{\sigma}\right)^2\right)}, & \text{si } x > 0; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.6)$$

Nous écrivons ces densités de probabilité dans le cadre de la reconstruction de sources en remplaçant

- x par $y_i + y_t$,
- μ par $\ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t)$,
- σ par r_i dans le cas log-Laplace, et $\sqrt{r_i}$ dans le cas log-Cauchy,

avec

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & r_2 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & r_i & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & r_{N_{\text{obs}}-1} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & r_{N_{\text{obs}}} \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

Cela donne :

$$p_{\log\text{-Laplace}}(\mathbf{y}; \ln \mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{R}, y_t) = \prod_{i=1}^{\text{Nobs}} \frac{1}{2r_i(y_i + y_t)} e^{-\frac{|\ln(y_i + y_t) - \ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t)|}{r_i}}, \quad (5.8a)$$

$$p_{\log\text{-Cauchy}}(\mathbf{y}; \ln \mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{R}, y_t) = \prod_{i=1}^{\text{Nobs}} \frac{1}{(y_i + y_t)\pi\sqrt{r_i} \left(1 + \frac{(\ln(y_i + y_t) - \ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t))^2}{r_i}\right)}, \quad (5.8b)$$

où les quantités à l'intérieur des logarithmes ne sont pas adimensionnées pour raisons de lisibilité. Ces distributions conduisent, modulo une constante de normalisation, aux fonctions de coût suivantes :

$$\mathcal{J}_{\log\text{-normal}}(\mathbf{y}; \mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{R}, \mathbf{y}_t) = \frac{1}{2} \|\ln(\mathbf{y} + \mathbf{y}_t) - \ln(\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t)\|_{2, \mathbf{R}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}|, \quad (5.9a)$$

$$\mathcal{J}_{\log\text{-Laplace}}(\mathbf{y}; \mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{R}, \mathbf{y}_t) = \|\ln(\mathbf{y} + \mathbf{y}_t) - \ln(\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{y}_t)\|_{1, \mathbf{R}^{-1}} + \ln |\mathbf{R}|, \quad (5.9b)$$

$$\mathcal{J}_{\log\text{-Cauchy}}(\mathbf{y}; \mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{R}, \mathbf{y}_t) = \sum_{i=1}^{\text{Nobs}} \ln \left(r_i + (\ln(y_i + y_t) - \ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t))^2 \right) - \frac{1}{2} \ln(r_i), \quad (5.9c)$$

où \mathbf{y}_t est le vecteur de seuil positif utilisé pour garantir que la fonction logarithmique soit définie pour des observations nulles. Les normes l_2 et l_1 sont définies comme suit : $\|\mathbf{v}\|_2 = \sqrt{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}}$ et $\|\mathbf{v}\|_1 = \sum_i |v_i|$, respectivement.

Ces trois distributions sont des cas particuliers de la distribution Bêta Prime généralisé (ou GB2) (Satchell et Knight 2000 ; McDonald 2008). Elles partagent un point commun : toutes trois sont construites à partir de la soustraction du logarithme de l'observation par le logarithme de la prédiction. En raison de la propriété $\ln \frac{a}{b} = \ln(a) - \ln(b)$, plusieurs critères définis précédemment sont satisfaits :

- le coût est fonction du rapport entre l'observation et la prédiction ;
- un paramètre de position apparaît sous la forme $\ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t)$;
- à l'aide d'un carré ou d'une valeur absolue, une symétrie entre l'observation et la prédiction est garantie.

La différence entre les propositions log-normales, log-Laplace, et log-Cauchy réside dans le traitement de la quantité relative :

$$\ln(y_i + y_t) - \ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t). \quad (5.10)$$

Ainsi :

- construite avec la norme l_2 , la loi log-normale pénalise majoritairement les grandes différences (relatives), au détriment des petites différences ;

- construite avec la norme l_1 , la courbe log-Laplace de la différence relative est plus plate en comparaison avec la courbe log-normale. Cela signifie que la reconstruction de $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ ne sera pas sensible à un couple en particulier, même si la différence entre l'observation et la prévision de ce couple est très importante.

Une raison de choisir la distribution log-Laplace est donc d'éviter que des outliers ou valeurs aberrantes ne pilotent la recherche de la source. On définit ici un outlier, ou valeur aberrante, comme une observation très mal reproduite, qui contraste grandement avec les valeurs « normalement » mesurées ;

- la distribution log-Cauchy est celle qui présente le comportement le plus intéressant. Cette distribution mélange les natures log-normales et log-Laplace. La fonction logarithme quantifiant les écarts entre observations et prédictions atténue la pénalité des grandes différences, mais supprime également les pénalités des petites différences. L'utilisation de la distribution log-Cauchy permet donc d'éviter de trop pénaliser les écarts aux valeurs aberrantes, tout en négligeant les faibles différences.

Différence relative observation-prédiction	très grande	faible
Log-normal	coût très important	coût négligeable
Log-Laplace	coût important	coût non négligeable
Log-Cauchy	coût important	coût négligeable

Table 5.1 – Calcul du coût-pénalité d'une différence relative entre l'observation et la prédiction d'un même couple, selon le choix de la vraisemblance.

Le tableau 5.1 résume le traitement d'une différence relative entre une observation et une prédiction associée selon le choix de la vraisemblance retenue.

Quel que soit le choix de la vraisemblance, le choix de la valeur de y_t est crucial pour évaluer la pénalité d'un couple composé d'une observation ou d'une prédiction nulle. Ce choix indique comment le coût d'une observation nulle et d'une prédiction non nulle (ou le contraire) devrait se comparer à celui d'un couple strictement positif.

Pour faire ce choix, nous partons du principe que la pénalité sur un couple $(20, 0)\text{mBq.m}^{-3}$ doit être un important multiple de la pénalité sur un couple $(400, 100)\text{mBq.m}^{-3}$. C'est un jugement basé sur l'intuition qu'une observation élevée non reproduite devrait engendrer une pénalité bien plus importante qu'une observation très élevée mal reproduite.

En se référant au tableau 5.2, on peut en déduire pour la distribution log-normale qu'un seuil raisonnable, c'est-à-dire respectant la condition précédente, doit se situer entre 0.5 mBq.m^{-3} et 3 mBq.m^{-3} . Selon le même principe, les seuils acceptables pour les distributions log-Laplace ou log-Cauchy se situent entre 0.1 mBq.m^{-3} et 0.5 mBq.m^{-3} .

Il est important de noter que ce choix est dépendant du cas d'étude et des quantités

mesurées. Ici, nous avons considéré une situation où des concentrations de plusieurs centaines de mBq.m^{-3} avaient été mesurées.

Nous devons également considérer que la distribution log-Cauchy a besoin d'un second seuil j_t pour être correctement définie. En effet, si pour un couple, les deux observations y_i et la prédiction $(\mathbf{H}\mathbf{x})_i$ sont égales (ce qui arrive généralement quand toutes deux sont égales à zéro), alors la variance r associée tendra naturellement vers 0. Si r tend vers 0, le coût $\mathcal{J}_{\log\text{-Cauchy}}$ tend vers $-\infty$ comme on peut le voir dans l'équation (5.11) avec j_t égal à zéro.

Pour éviter cela, nous pouvons définir $j_t = 0.1 \text{ mBq.m}^{-3}$ et

$$\mathcal{J}_{\log\text{-Cauchy}}(\mathbf{y}; \mathbf{H}\mathbf{x}, r, y_t) = \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \ln \left(r + \frac{(\ln(y_i + y_t) - \ln((\mathbf{H}\mathbf{x})_i + y_t))^2}{r} + \frac{j_t}{c_{\text{ref}}} \right), \quad (5.11)$$

avec $c_{\text{ref}} = 1 \text{ mBq.m}^{-3}$.

Le choix de la vraisemblance a en pratique un impact significatif sur la forme de la distribution a posteriori, comme nous le verrons dans l'application sur l'évènement ^{106}Ru de ce chapitre. Pour mieux décrire les incertitudes du problème, l'approche proposée ici consiste à simplement utiliser et comparer les distributions obtenues avec ces trois vraisemblances.

y_t	$(y_t, (\mathbf{H}\mathbf{x})_t)$										
	(20,0)	(5,0)	(8,0.5)	(0.5,8)	(6,1)	(1,0)	(400,100)	(170,50)	(25,10)	(12,10)	(120,100)
Log-normal											
0.1	14.06	7.73	3.39	3.39	1.47	2.87	0.96	0.75	0.41	0.02	0.02
0.5	6.9	2.87	2.29	2.29	1.08	0.6	0.96	0.74	0.39	0.02	0.02
1	4.63	1.61	1.61	1.61	0.78	0.24	0.95	0.73	0.37	0.01	0.02
3	2.07	0.48	0.66	0.66	0.33	0.04	0.93	0.70	0.29	0.01	0.02
5	1.30	0.24	0.37	0.37	0.18	0.02	0.91	0.67	0.24	0.01	0.02
Log-Laplace											
0.1	5.30	3.93	2.6	2.6	1.71	2.4	1.39	1.22	0.91	0.18	0.18
0.5	3.71	2.40	2.14	2.14	1.47	1.1	1.38	1.22	0.89	0.17	0.18
1	3.04	1.79	1.79	1.79	1.25	0.69	1.38	1.21	0.86	0.17	0.18
3	2.04	0.98	1.15	1.15	0.81	0.29	1.36	1.18	0.77	0.14	0.18
5	1.61	0.69	0.86	0.86	0.61	0.18	1.35	1.16	0.69	0.13	0.17
Log-Cauchy											
0.1	3.37	2.80	2.05	2.05	1.37	1.91	1.07	0.91	0.6	0.03	0.03
0.5	2.69	1.91	1.72	1.72	1.15	0.79	1.07	0.91	0.58	0.03	0.03
1	2.33	1.44	1.44	1.44	0.94	0.39	1.07	0.9	0.55	0.03	0.03
3	1.64	0.67	0.84	0.84	0.51	0.08	1.05	0.88	0.46	0.02	0.03
5	1.28	0.39	0.55	0.55	0.31	0.03	1.04	0.85	0.39	0.02	0.03
Gaussien	200	12.5	28.12	28.12	12.5	0.5	inf	inf	112.5	2	200

Table 5.2 – Plusieurs vraisemblances et leur coût correspondant pour plusieurs couples observation-prédiction. Les valeurs des observations y_t , des prédictions $y_{S,t}$, et du seuil y_t sont exprimées dans la même unité (par exemple, en $\text{mBq}\cdot\text{m}^{-3}$). On utilise une variance adimensionnelle égale à 1 et les constantes de normalisation sont omises dans le calcul des quantités.

5.2 Modélisation de la matrice de covariance

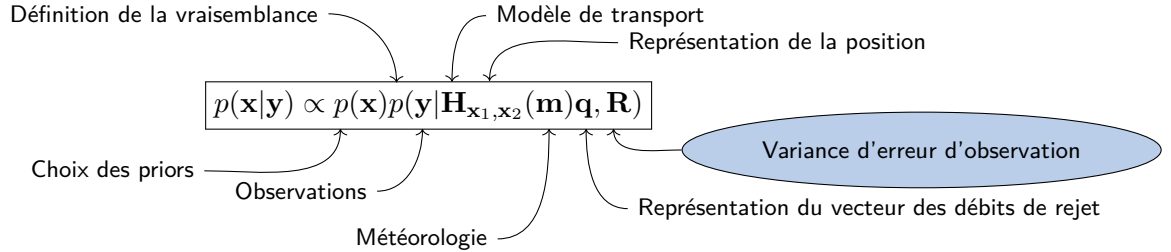


Figure 5.4 – Description des sources d’incertitudes dans la formule de Bayes appliquée au cas de la reconstruction de sources. On se concentre sur la définition de la modélisation de la matrice de covariance de la vraisemblance \mathbf{R} .

Dans cette deuxième partie, nous nous concentrons sur les incertitudes provenant du choix de modélisation de la matrice de covariance de la vraisemblance, comme décrit dans la figure 5.4. Cette matrice est également définie comme la matrice de covariance de l’erreur d’observation, ou comme la matrice d’échelle dans le cas où la vraisemblance n’est pas gaussienne. Elle est notée \mathbf{R} .

Dans une première section, nous décrivons une faiblesse de la modélisation $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$ en présentant un "faux" paradoxe. Nous définissons ensuite un principe en section 5.2.2.1 : celui de la pertinence d’une observation.

Afin d’améliorer la modélisation de \mathbf{R} , une méthode de tri au sein du MCMC est développée en section 5.2.2.2. Notre choix de modélisation est ensuite évalué en section 5.2.2.3. Puis, une méthode de tri généralisée est proposée en section 5.2.3. Enfin, une autre modélisation, spatiale, indépendante du principe de pertinence est explicitée en section 5.2.4.

5.2.1 Limitations de la modélisation de \mathbf{R}

La définition de la vraisemblance, et donc la forme de la distribution a posteriori, est fortement influencée par le choix de modélisation de la matrice de covariance de l’erreur d’observation \mathbf{R} . Cette matrice est de taille $N_{\text{obs}} \times N_{\text{obs}}$, où N_{obs} est le nombre d’observations. En ce qui concerne cette matrice, le nombre de variables que l’on souhaite idéalement échantillonner est donc égal à $N_{\text{obs}} \times N_{\text{obs}}$. Dans les cas réels de reconstruction de sources d’accident nucléaire, le nombre d’observations peut être important (de quelques centaines à quelques milliers) alors que les méthodes d’échantillonnage bayésiennes ne peuvent généralement estimer efficacement qu’un nombre limité de variables.

Pour limiter le nombre de variables, la plupart des travaux (Chow et al. 2008 ; Delle Monache et al. 2008 ; Winiarek et al. 2012 ; Saunier et al. 2013 ; Rajaona et al. 2015 ; Tichý

et al. 2016 ; Y. Liu et al. 2017) décrivent la matrice de covariance des erreurs comme une matrice diagonale avec un coefficient diagonal unique et commun. Or, cette variance unique agglomère à la fois l'erreur d'observation (bruit et biais du capteur intégré), des modèles (incertitude des champs météorologiques et du modèle de transport), et de représentation entre une observation et une prédiction modélisée (e.g., Rajaona et al. 2015). Saunier et al. 2019 étudient l'impact d'un tel choix sur l'évènement du ^{106}Ru . Winiarek et al. 2014 l'étudient dans le cas de l'accident de Fukushima-Daiichi, et Y. Liu et al. 2017 l'étudient dans les cas de Tchernobyl et de Fukushima-Daiichi. C'est en effet une simplification importante puisque l'erreur est fonction du temps et de l'espace, et n'est donc évidemment pas constante pour tout couple observation-prédiction.

Du fait de cette variance unique, on peut faire émerger dans des cas synthétiques des résultats très paradoxaux, comme dans la situation décrite dans le prochain paragraphe.

Nous nous plaçons dans le cadre d'un évènement de rejet dont on cherche à reconstruire la source à l'aide d'un vecteur d'observations \mathbf{y} de taille N_{obs} . Supposons, pour simplifier le problème, que la fonction de coût soit calculée à partir d'une distribution de probabilité gaussienne, alors nous avons :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \frac{(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{r} + \frac{N_{\text{obs}} \ln(r)}{2}. \quad (5.12)$$

Supposons que nous ajoutons à cet ensemble d'observations \mathbf{y} un second ensemble d'observations $\mathbf{y}^* = \mathbf{0}_{N_{\text{obs}}^*}$ de taille N_{obs}^* pour lequel les prédictions correspondantes sont également nulles. Cela peut se produire par exemple si nous ajoutons des observations qui précèdent la date de début de l'accident. Dans ce cas, en effet, les stations n'auront rien détecté. Si les observations sont en-dehors de notre cadre de modélisation, alors les prédictions seront aussi de facto nulles.

Si nous prenons en compte ce nouvel ensemble d'observations, la fonction de coût devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{y}^*) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}+N_{\text{obs}}^*} \frac{(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{r} + \frac{1}{2}(N_{\text{obs}} + N_{\text{obs}}^*) \ln(r) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \frac{(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{r} + \frac{1}{2}(N_{\text{obs}} + N_{\text{obs}}^*) \ln(r), \end{aligned} \quad (5.13)$$

puisque pour chaque observation y_i du nouvel ensemble \mathbf{y}^* , $y_i = (\mathbf{H}\mathbf{x})_i = 0$.

Supposons maintenant que N_{obs}^* tende vers l'infini, alors la variance de l'erreur d'observation r tend nécessairement vers 0 d'après l'équation (5.13). De plus, si $r \rightarrow 0$, alors les distributions échantillonnées sont de plus en plus étroites : seules les sources \mathbf{x} avec les coûts les plus faibles sont échantillonnées.

En effet, selon la valeur de r , l'écart entre deux sources \mathbf{x} et \mathbf{x}' (de r égal) mesuré par

$$\left| \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \frac{(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{r} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \frac{(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x}')_i)^2}{r} \right| \quad (5.14)$$

est plus ou moins important. Si r est petit, l'écart sera grand, et la moins bonne des deux sources sera moins souvent échantillonnée que si r était grand. En effet, une source est plus ou moins échantillonnée selon la différence entre son coût, pour une paramétrisation donnée du problème, et le coût minimum (le coût de la meilleure source).

Par conséquent, pour une variance r qui tend vers 0, la distribution a posteriori jointe tend à piquer autour de son maximum global, i.e., la source qui maximise $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$.

Dans cette configuration, l'ajout d'un nombre donné d'observations par exemple antérieures à l'accident va donc affecter la forme des distributions, réduisant leur écart type et réduisant ainsi la probabilité de certaines sources.

Le paradoxe, apparent puisqu'il est explicitement lié à la modélisation de la matrice de covariance \mathbf{R} , est qu'un ajout d'observations indépendantes de l'accident (puisque les observations lui sont par exemple antérieures) affecte la reconstruction de source. Autrement dit, l'ajout d'une observation qui ne peut discriminer entre deux sources probables a pour conséquence l'augmentation de la probabilité de l'une d'entre elles (la plus probable) et la réduction de celle de l'autre (incidemment, la moins probable).

Avec $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$, la variance r est une sorte de moyenne des variances d'erreur des couples observation-prévision. Comme nous l'avons vu dans cette situation synthétique, certaines observations peuvent réduire artificiellement et de manière importante la valeur de r , et ainsi diminuer la variance de nos densités a posteriori.

On s'intéresse dans la prochaine sous-section 5.2.2 à une méthode pour résoudre ce faux paradoxe efficacement, et proposer une meilleure modélisation de la matrice de covariance, ou matrice d'échelle, \mathbf{R} .

5.2.2 Proposition d'une méthode de tri en fonction de la pertinence

Dans cette sous-section, nous proposons une méthode, basée sur une classification entre observations dites pertinentes et observations dites non-pertinentes, pour mieux modéliser la matrice \mathbf{R} .

5.2.2.1 Caractérisation de la pertinence d'une observation

Pour caractériser la pertinence d'une observation, nous nous plaçons dans le cadre d'une modélisation de la matrice de covariance de la vraisemblance \mathbf{R} avec N_{obs} paramètres

diagonaux distincts. Autrement dit, on suppose :

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & r_2 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & r_3 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & r_{N_{\text{obs}}-1} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & r_{N_{\text{obs}}} \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

Dans ce cadre, la pertinence d'une observation est définie comme le trait commun des observations qui ne peuvent être retirées de l'ensemble des observations sans modifier les densités de probabilités a posteriori reconstruites du terme source ou de la position, i.e., des variables qui ne sont pas des variances.

Les observations qui remplissent ce critère sont celles :

- qui apportent de l'information, i.e., qui vont contribuer à ce que soient privilégiées des sources à d'autres ;
- c'est-à-dire, qui vont augmenter la probabilité d'au moins une source (et donc réduire la probabilité d'autres sources) ;
- c'est-à-dire, qui vont juger que les prédictions \mathbf{y}_S d'une source correspondent mieux aux observations \mathbf{y} que les prédictions d'autres sources.

Et ainsi, une observation non-pertinente est :

- une observation y_i , telle que quelle que soit la source \mathbf{x} dans l'ensemble des sources noté \mathcal{X} , la prédiction associée $y_{S,i} = (\mathbf{H}\mathbf{x})_i$ est constante ;
- c'est-à-dire, une observation y_i , telle que la prédiction associée $y_{S,i} = (\mathbf{H}\mathbf{x})_i$ est indépendante de \mathbf{x} , pour toute source \mathbf{x} dans \mathcal{X} ;
- c'est-à-dire, une observation y_i , telle que la prédiction associée $y_{S,i}$ est toujours nulle quelle que soit la valeur de \mathbf{x} , pour toute source \mathbf{x} dans \mathcal{X} . Cette dernière implication est inférée du fait que, si $y_{S,i}$ n'était pas nulle et \mathbf{H} étant linéaire, alors $y_{S,i}$ dépendrait de \mathbf{x} .

En d'autres termes, une observation non discriminante est une observation qui ne contribue jamais à discriminer une source d'une autre. Il s'agit d'une observation pour laquelle, si la matrice \mathbf{R} était modélisée comme une matrice diagonale avec N_{obs} variances indépendantes, la variance r_i correspondant à cette observation serait nulle (puisque l'observation est toujours vérifiée, c'est-à-dire, égale à sa prédiction associée).

Une telle observation pourrait donc être supprimée par prétraitement des données. Il suffirait de calculer les prédictions de toutes les sources considérées, et de regarder quelles observations remplissent la condition ci-dessus. Seulement, nous souhaitons restreindre le principe de pertinence.

En effet, il semble fastidieux d'explorer tout l'espace des sources \mathcal{X} , et de considérer qu'une observation est non-pertinente, seulement si elle est non-pertinente pour l'entièreté des sources. Par exemple, si on mesure de faibles quantités d'un certain radionucléide au mois de septembre, il n'est pas nécessaire de considérer un rejet en mars.

Ainsi, on comprend intuitivement qu'il ne faut pas considérer l'espace des sources \mathcal{X} pour définir le principe de pertinence, mais plutôt l'espace des sources probables

$$\{\mathbf{x} \mid p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) > \epsilon_p\} \quad (5.16)$$

où ϵ_p est défini petit. À partir de cette réflexion, on peut définir le critère de pertinence. Une observation y_i est pertinente si :

$$\exists \mathbf{x} \in \{\mathbf{x} \mid p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) > \epsilon_p\} : |y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i| > \epsilon_d, \quad (5.17)$$

où l'on définit ϵ_d petit. Cela pose néanmoins un problème : puisque l'on définit la probabilité d'une source \mathbf{x} conditionnellement à un vecteur d'observations \mathbf{y} , il est impossible de définir \mathbf{y} directement à partir de cet espace des sources probables. Ce serait une définition circulaire, c'est-à-dire qu'on définirait \mathbf{y} en fonction de \mathbf{y} .

On peut noter que ce principe de pertinence est différent du principe de redondance d'une observation. La redondance, i.e., le fait d'apporter une information déjà apportée, apporte bien de l'information qui permet de discriminer en faveur de sources déjà privilégiées.

5.2.2.2 Tri des observations au sein du MCMC

Maintenant que nous avons défini le principe de pertinence d'une observation, nous allons décrire une méthode de tri des observations en deux groupes pertinent et non-pertinent au sein du MCMC.

Comme défini précédemment, on souhaite trouver les observations toujours égales aux prédictions calculées quelle que soit la source \mathbf{x} probable, c'est-à-dire la source \mathbf{x} dans

$$\{\mathbf{x} \mid p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) > \epsilon_p\} \quad (5.18)$$

On ne peut prétraiter ces observations car cela impliquerait de connaître à l'avance les sources suffisamment probables. Or, c'est justement le but de l'échantillonnage.

Il faut donc intégrer ce processus à l'intérieur de l'échantillonneur MCMC. Nous avons évoqué plus tôt la circularité du problème dont il faut tenir compte. Classifier des observations en deux groupes pertinents et non-pertinents est équivalent à modéliser \mathbf{R} d'une certaine façon, c'est-à-dire, définir \mathbf{x} le vecteur des variables décrivant la source d'une certaine façon. Or, la classification des observations est dépendante de la modélisation de la source \mathbf{x} .

La méthode de tri doit donc tenir compte de la circularité du problème. Dans la suite, on dérive une condition liée à la circularité que la méthode de tri doit satisfaire.

Nous proposons à cette fin un exemple où l'on utilise une vraisemblance gaussienne afin de simplifier les calculs. Les conclusions restent applicables pour des vraisemblances log-normales, log-Laplace, ou log-Cauchy.

On suppose que les observations ont été classifiées en deux groupes : pertinent et non-pertinent. On a alors :

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_{\text{np}} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & r_{\text{np}} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & r_{\text{p}} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & r_{\text{p}} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & r_{\text{np}} \end{bmatrix} \quad (5.19)$$

avec r_{np} la variance que l'on assigne aux observations non pertinentes et r_{p} la variance des observations pertinentes. Nous avons donc :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\text{N}_{\text{obs,p}}} \frac{(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{2r_{\text{p}}} + \frac{\text{N}_{\text{obs,p}}}{2} \ln(r_{\text{p}}) + \sum_{i=1}^{\text{N}_{\text{obs,np}}} \frac{(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{2r_{\text{np}}} + \frac{\text{N}_{\text{obs,np}}}{2} \ln(r_{\text{np}}) \quad (5.20)$$

avec $\text{N}_{\text{obs,p}}$ le nombre d'observations pertinentes, et $\text{N}_{\text{obs,np}}$ le nombre d'observations non-pertinentes.

On note y_i une observation particulière classée comme pertinente, c'est-à-dire associée à un coefficient r_{p} . On suppose que y_i respecte le critère suivant, défini comme critère de non-pertinence à partir de l'équation 5.17 :

$$\forall \mathbf{x} \in \{\mathbf{x} \mid p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) > \epsilon_p\} : |y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i| < \epsilon_d, \quad (5.21)$$

avec $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ la distribution pour la modélisation courante de \mathbf{R} , et où l'on définit ϵ_d et ϵ_p très petits. Autrement dit, pour toute source \mathbf{x} probable (dans la configuration courante), y_i est égale à ϵ_d près à la prédiction associée $(\mathbf{H}\mathbf{x})_i$.

On note ici le problème de circularité : si l'on classe y_i comme non-pertinente, alors on modifie \mathbf{R} , et donc nécessairement $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$. Suite à cette modification, une observation classée comme pertinente peut alors devenir non-pertinente, et le contraire est également possible. Puisqu'à chaque fois que l'on reclassifie une observation, la définition de $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ est modifiée, alors la classification peut très bien ne pas converger.

On décrit ci-dessous plus précisément la façon dont $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ peut être modifiée suite à la classification d'une observation pertinente en non-pertinente, et ce que cela peut entraîner.

Suite à la classification d'une observation pertinente en non-pertinente, le nombre $\text{N}_{\text{obs,p}}$ diminue ce qui entraîne, selon l'équation (5.20), que la valeur de r_{p} échantillonnée par le

MCMC augmente en moyenne (pour ϵ_d suffisamment petit). On a en effet :

$$r_{p,\text{optimal}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{obs},p}} (y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{N_{\text{obs},p}} \quad (5.22)$$

où $r_{p,\text{optimal}}$ est la valeur de r_p qui minimise la fonction de coût. Si $N_{\text{obs},p}$ diminue alors $r_{p,\text{optimal}}$ augmente. C'est aussi le cas des valeurs r_p échantillonnées qui augmentent en moyenne.

Or, une variance r_p plus élevée implique une plus grande variabilité autorisée à la différence $y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i$. Autrement dit, si la variance r_p est plus élevée, des sources \mathbf{x} qui produisent des prédictions $\mathbf{H}\mathbf{x}$ telles que les différences $y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i$ sont plus importantes vont être échantillonnées.

Cela veut dire que, la variance de la distribution a posteriori $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ augmentant, le support de la distribution, c'est-à-dire l'ensemble des sources probables $\{\mathbf{x}, p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) > \epsilon_p\}$, est agrandi. On utilise par la suite le terme de support pour désigner l'ensemble des sources un minimum probables.

Une observation qui a été classée comme non-pertinente pourrait alors, du fait de l'agrandissement de cet ensemble de sources probables, devenir pertinente. Ce problème doit absolument être évité, car cette observation pertinente serait alors associée à une variance extrêmement faible. En effet, les valeurs de r_{np} sont par définition proches de

$$\begin{aligned} r_{np,\text{optimal}} &= \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{obs},np}} (y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2}{N_{\text{obs},np}} \\ &< \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{obs},np}} \epsilon_d^2}{N_{\text{obs},np}} = \epsilon_d^2, \end{aligned} \quad (5.23)$$

et on désire choisir ϵ_d très petit pour les raisons explicitées plus haut. Une observation y_i qui serait pertinente, mais classée comme non pertinente, aurait donc une très faible variance r_{np} mais une différence non négligeable $y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i$ qui serait alors très amplifiée par cette très faible variance. Le couple associé $(y_i, (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)$ aurait alors un coût très élevé et dominerait la recherche de la source.

À partir de cet exemple, nous avons dérivé une nouvelle condition que doit satisfaire notre méthode de tri. Plus précisément, en plus de tenir compte de la circularité du problème, on souhaite donc satisfaire deux conditions :

- classifier les observations en deux groupes selon si elles sont pertinentes ou non ;
- ne classifier aucune observation pertinente dans le groupe des observations non-pertinentes.

De ces deux conditions, on peut déduire l'algorithme 5.1 qui permet de classer les observations en tenant compte du fait que le problème est circulaire.

Le principe de l'algorithme est :

Algorithme 5.1 : Procédure MCMC intégrant la classification des observations en groupes pertinents et non-pertinents.

Input : Un vecteur d'observations $\mathbf{y} = \mathbf{y}_p$ et $\mathbf{y}_{np} = \{\emptyset\}$ (et donc $N_{\text{obs}}^* = 0$).

Output : Un ensemble d'échantillons \mathbf{x} et deux vecteurs d'observations \mathbf{y}_p et \mathbf{y}_{np} .

```

1 Attendre  $N_{\text{burn-in}}$  jusqu'à la convergence d'un algorithme MCMC échantillonnant
   notre vecteur source  $\mathbf{x}$ .
2 for  $i = 1 : N_{\text{obs}}$  do
3   if  $|y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i| < \epsilon_d$  then
4      $\mathbf{y}_p = \{\mathbf{y}_p\} - \{y_i\}$ 
5      $\mathbf{y}_{np} = \{\mathbf{y}_{np}, y_i\}$ 
6      $N_{\text{obs}}^* = N_{\text{obs}}^* + 1$ 
7   end
8 end
9 for  $k = N_{\text{burn-in}} : N_{\text{itérations}}$  do
10  for  $i = 1 : N_{\text{obs}}^*$  do
11    if  $|y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i| > \epsilon_d$  then
12       $\mathbf{y}_p = \{\mathbf{y}_p, y_i\}$ 
13       $\mathbf{y}_{np} = \{\mathbf{y}_{np}\} - \{y_i\}$ 
14       $N_{\text{obs}}^* = N_{\text{obs}}^* - 1$ 
15    end
16  end
17  Itération de l'algorithme MCMC.
18  return échantillon courant  $\mathbf{x}$ 
19 end

```

- d'initier toutes les observations en les supposant pertinentes puis d'attendre la convergence du MCMC ;
- de classer les observations en deux groupes pertinent et non-pertinent une seule fois ;
- de n'autoriser ensuite que la reclassification de certaines observations supposées non-pertinentes et en fait pertinentes (et non le contraire).

Une justification rigoureuse de l'utilisation de ce regroupement à l'aide du critère d'information d'Akaike est proposée en section 5.2.2.3.

Notons que cette classification équivaut finalement à supprimer des observations. On peut en effet remarquer que les deux choix de modélisation suivants :

- une observation y_i est classifiée comme non-pertinente, et n'est jamais ré-évaluée pertinente ;
- une observation est supprimée de l'ensemble des observations, et n'est plus utilisée dans la suite du problème ;

sont équivalents, à ϵ_d près.

5.2.2.3 Évaluation de la modélisation avec le critère AIC

Nous utilisons ici le critère d'Aitchike (Aitchike Information Criterion) pour comparer deux modèles :

- un premier modèle (O) où une seule variable r est utilisée pour décrire la matrice de covariance \mathbf{R} ;
- un deuxième modèle (D) où deux variables r_1 et r_2 décrivent \mathbf{R} . Dans ce cas, puisque chaque coefficient diagonal de \mathbf{R} correspond à une observation, il existe deux groupes d'observations (notés 1 et 2).

Ce critère est utilisé en général pour résoudre le problème de l'arbitrage biais-variance (T. Hastie et al. 2009). Les deux critères correspondants s'écrivent :

$$\text{AIC}(O) = 2 \times 1 - 2 \ln(L(O)); \quad (5.24a)$$

$$\text{AIC}(D) = 2 \times 2 - 2 \ln(L(D)) \quad (5.24b)$$

où $L(O)$ est définie comme le maximum de vraisemblance lié à l'utilisation du premier modèle, et $L(D)$ le maximum de vraisemblance lié à l'utilisation du second modèle. Nous utilisons dans la suite une vraisemblance gaussienne pour simplifier les calculs. Ces calculs sont toujours valables si on utilise une vraisemblance log-normale, log-Cauchy, ou log-Laplace.

Dans le premier cas :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\text{AIC}(O) &= 1 - \ln(L(O)) \\ &= 1 + \frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln(r) + \frac{S}{2r}\end{aligned}\quad (5.25)$$

où $S = \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} (y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2$, et où les constantes de normalisation ont été supprimées. On peut alors minimiser cette expression en utilisant la variance r optimale :

$$\frac{d\left(\frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln(r) + \frac{S}{2r}\right)}{dr} = \frac{N_{\text{obs}}}{2r} - \frac{S}{2r^2} \rightarrow r_{\text{opti}} = \frac{S}{N_{\text{obs}}}.$$
 (5.26)

De cette manière, et en omettant les constantes de normalisation :

$$\frac{1}{2}\text{AIC}(O) = 1 + \frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln \frac{S}{N_{\text{obs}}} + \frac{N_{\text{obs}}}{2}.$$
 (5.27)

Dans le second cas :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\text{AIC}(D) &= 2 - \ln(L(D)) \\ &= 2 + \frac{N_1}{2} \ln(r_1) + \frac{S_1}{2r_1} + \frac{N_2}{2} \ln(r_2) + \frac{S_2}{2r_2}.\end{aligned}\quad (5.28)$$

où $S_k = \sum_{i=1}^{N_k} (y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2$, $N_1 + N_2 = N_{\text{obs}}$, et N_1, N_2 le nombre d'observations appartenant au groupe 1 et au groupe 2, respectivement. Avec $r_{k,\text{opti}} = \frac{S_k}{N_k}$, en omettant les constantes de normalisation :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\text{AIC}(D) &= 2 - \ln(L(D)) \\ &= 2 + \frac{N_1}{2} \ln \frac{S_1}{N_1} + \frac{N_1}{2} + \frac{N_2}{2} \ln \frac{S_2}{N_2} + \frac{N_2}{2}.\end{aligned}\quad (5.29)$$

Donc, en comparant les vraisemblances maximales des deux modèles :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(\text{AIC}(O) - \text{AIC}(D)) &= 1 + \frac{N_{\text{obs}}}{2} \ln \frac{S}{N_{\text{obs}}} + \frac{N_{\text{obs}}}{2} \\ &\quad - \left(2 + \frac{N_1}{2} \ln \frac{S_1}{N_1} + \frac{N_1}{2} + \frac{N_2}{2} \ln \frac{S_2}{N_2} + \frac{N_2}{2}\right) \\ &= -1 + \frac{N_1}{2} \ln \frac{(S_1 + S_2)N_1}{(N_1 + N_2)S_1} + \frac{N_2}{2} \ln \frac{(S_1 + S_2)N_2}{(N_1 + N_2)S_2}.\end{aligned}\quad (5.30)$$

On peut noter que $N_1, N_2 > 0$ sont des entiers, et que $S = S_1 + S_2$ est une constante non nulle. Ainsi :

$$S_2 \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{(S_1 + S_2)N_2}{(N_1 + N_2)S_2} \rightarrow +\infty \Rightarrow \text{AIC}(O) - \text{AIC}(D) \rightarrow +\infty.$$
 (5.31)

Plus la somme S_2 est petite, meilleur le modèle (D) est par rapport à (O). Or, c'est exactement selon ce principe que l'algorithme de tri des observations fonctionne. C'est-à-dire, l'objectif de l'algorithme de tri est précisément de sélectionner le plus grand ensemble d'observations avec le plus petit coût S_2 .

On peut écrire $R = \frac{S_1}{S_2}$ et $M = \frac{N_1}{N_2}$:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} (\text{AIC}(O) - \text{AIC}(D)) &= -1 + \frac{N_1}{2} \ln \frac{(S_1 + S_2)N_1}{(N_1 + N_2)S_1} + \frac{N_2}{2} \ln \frac{(S_1 + S_2)N_2}{(N_1 + N_2)S_2} \\
 &= -1 + \frac{N_2 M}{2} \ln \left(\left(1 + \frac{S_2}{S_1} \right) \frac{1}{\frac{N_1 + N_2}{N_1}} \right) + \frac{N_2}{2} \ln \left(\left(\frac{S_1}{S_2} + 1 \right) \frac{1}{\frac{N_1 + N_2}{N_2}} \right) \\
 &= -1 + \frac{N_2 M}{2} \ln \left(\left(1 + \frac{1}{R} \right) \frac{1}{1 + \frac{1}{M}} \right) + \frac{N_2}{2} \ln \left((R + 1) \frac{1}{1 + M} \right).
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

Par exemple, si l'on considère les observations relatives à l'évènement ^{106}Ru :
 $N_1 + N_2 = N_{\text{obs}} = 1600$, et $\frac{N_1}{N_2} = M$, et donc $N_2 = \frac{N_{\text{obs}}}{1+M}$. Cela entraîne :

$$\frac{1}{2} (\text{AIC}(O) - \text{AIC}(D)) = -1 + \frac{N_{\text{obs}} M}{2(1+M)} \ln \left(\frac{1 + \frac{1}{R}}{1 + \frac{1}{M}} \right) + \frac{N_{\text{obs}}}{2(1+M)} \ln \left(\frac{1+R}{1+M} \right). \tag{5.33}$$

Et on peut alors tracer $\text{AIC}(O) - \text{AIC}(D)$ en figure 5.5.

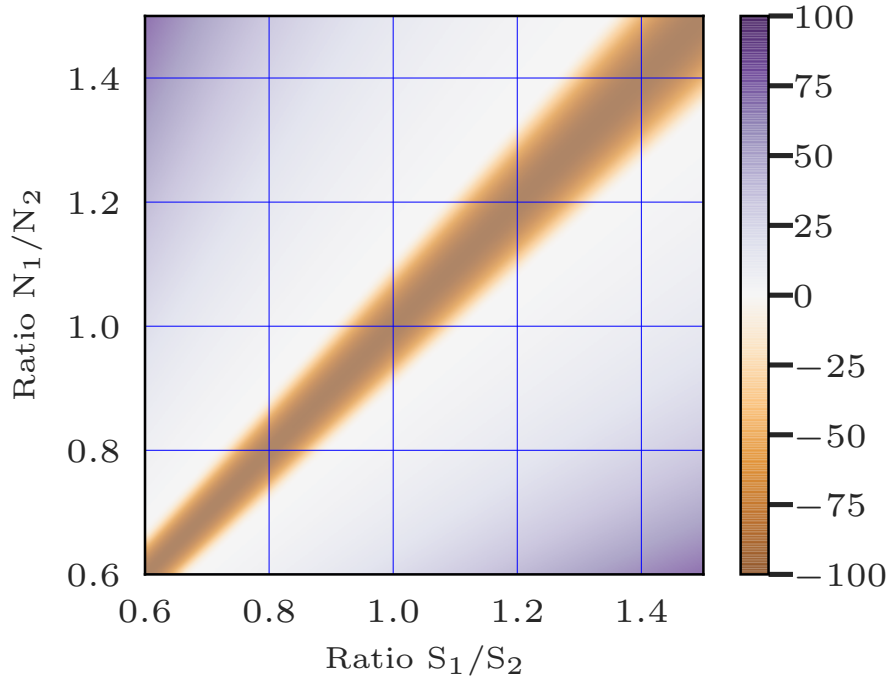


Figure 5.5 – $AIC(O)-AIC(D)$. Les valeurs négatives sont multipliées par 100 pour raisons de lisibilité.

Les valeurs négatives indiquent que le modèle (O) à un groupe est préférable.

Les valeurs positives indiquent que le modèle (D) à deux groupes est préférable.

En abscisse, est décrit le rapport entre la somme S_1 liée au groupe 1 du modèle (D) et la somme S_2 liée au groupe 2 du modèle (D).

En ordonnée, est décrit le rapport entre le nombre d'observations N_1 lié au groupe 1 du modèle (D) et le nombre d'observations N_2 lié au groupe 2 du modèle (D).

L'AIC pénalise le fait de créer plusieurs groupes, quand le coût (ici, la vraisemblance) de ces différents groupes est semblable. Autrement dit, l'AIC condamne les classifications chères et inutiles. Si N_1 est proche de N_2 , le modèle (D) n'est pas intéressant si S_1 est également proche de S_2 . Plus généralement, pour un rapport entre les deux groupes égal à $\frac{N_1}{N_2} = \beta > 1$, il n'est pas intéressant d'utiliser (D) uniquement si le rapport des sommes des coûts est proche de β . C'est-à-dire, le modèle (D) est jugé inutile par rapport au modèle (O) si le coût moyen des observations liées au groupe 1 est proche du coût moyen des observations liées au groupe 2.

5.2.3 Tri général des observations

Cette classification à l'aide de deux variances est une simplification d'un modèle plus ambitieux qui classerait les observations en k groupes en fonction de leur variance. Cette courte section n'a pas fait l'objet d'une application décrite dans la thèse.

On se place dans le cadre où seuls les paramètres diagonaux ont une importance. Les autres hyperparamètres sont supposés égaux à 0. Supposons que l'on décide de modéliser \mathbf{R} avec N_{obs} hyperparamètres :

$$\mathbf{R}_c = \begin{bmatrix} r_{1,c} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & r_{2,c} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & r_{3,c} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & r_{N_{\text{obs}}-1,c} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & r_{N_{\text{obs}},c} \end{bmatrix}. \quad (5.34)$$

Cela serait, comme expliqué précédemment, trop coûteux en temps de calcul. La classification en observations pertinentes et non pertinentes revient² à :

- repérer les observations dont, si on utilisait une modélisation \mathbf{R}_c comme ci-dessus, les variances associées $r_{i,c}$ seraient nulles ou très petites ;
- assigner une variance r_{np} commune à toutes ces observations (ce qui est approprié puisque toutes ces variances sont très proches les unes des autres) ;
- assigner une variance r_{p} commune à toutes les autres observations, ce qui représente une simplification importante.

Une bonne modélisation de \mathbf{R} est celle dont la variance d'une observation r_i est proche de la variance $r_{i,c}$ si on utilisait \mathbf{R}_c .

Utiliser une seule variance r pour toutes les observations est problématique, car cette seule variance est une sorte de moyenne de l'ensemble des variances $(r_{1,c}, \dots, r_{N_{\text{obs}},c})$. Comme on l'a vu précédemment, une telle variance moyenne va être trop faible pour l'ensemble des observations qui seraient associées à une variance $r_{i,c}$ importante.

Avec l'algorithme de tri, on résout une partie du problème en séparant les observations à variance nulle, ou très faible, des autres observations et en réhaussant ainsi la variance r_{p} commune aux observations pertinentes.

On pourrait néanmoins aller plus loin, et décider de modéliser \mathbf{R} de manière à regrouper les observations de variance $r_{i,c}$ proche. Pour cela, il faudrait connaître \mathbf{R}_c et les variances $(r_{1,c}, \dots, r_{N_{\text{obs}},c})$. Or, il est possible de calculer la variance optimale $r_{i,c}$ d'une observation

2. Ce n'est pas rigoureusement équivalent.

pour une source \mathbf{x} donnée. Celle-ci est simplement égale, pour une vraisemblance gaussienne, à :

$$(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2. \quad (5.35)$$

Ainsi, on pourrait proposer une classification des observations en k groupes, où chaque observation y_i aurait une variance dans $\{r_1, \dots, r_k\}$ selon l'ordre de grandeur de $(y_i - (\mathbf{H}\mathbf{x})_i)^2$. La prédiction $(\mathbf{H}\mathbf{x})_i$ étant variable tout au long de l'échantillonnage MCMC, il faudrait recalculer périodiquement la modélisation de \mathbf{R} , ou alors accepter que la modélisation ne soit pas parfaite mais néanmoins que chaque observation ait une variance plus adaptée en moyenne.

On peut noter que la classification en fonction de la variance est une classification en fonction du coût puisque ces deux quantités sont directement proportionnelles. Ainsi, une telle classification est validée, par essence, par le critère d'Aitchike.

5.2.4 Classification spatiale des observations

Nous proposons maintenant une deuxième approche pour améliorer la construction de la matrice de covariance \mathbf{R} et l'estimation des incertitudes associées. La variance r_i d'une observation y_i dépend de la position de la station liée à y_i . L'erreur de modélisation physique, qui est une partie de l'erreur dont \mathbf{R} est la matrice de covariance, est une fonction spatialement dépendante.

On peut regrouper les observations en fonction de leur position spatiale dans k groupes, où les observations d'un même groupe se voient attribuer la même variance d'erreur d'observation. Avec ce regroupement, nous avons

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, \dots, r_k) \quad (5.36)$$

les variables sources d'intérêt, et \mathbf{R} une matrice diagonale où le coefficient diagonal i se voit attribuer r_j avec $j \in \{1, \dots, k\}$ selon le groupe auquel l'observation y_i appartient.

En utilisant une classification spatiale et l'algorithme de tri présenté en section 5.2.2, \mathbf{x} devient

$$(x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, \dots, r_k, r_{\text{np}}) \quad (5.37)$$

avec, par exemple,

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_2 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & r_2 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & r_{\text{np}} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & r_k & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & r_{\text{np}} \end{bmatrix}. \quad (5.38)$$

5.3 Méthodes d'ensemble

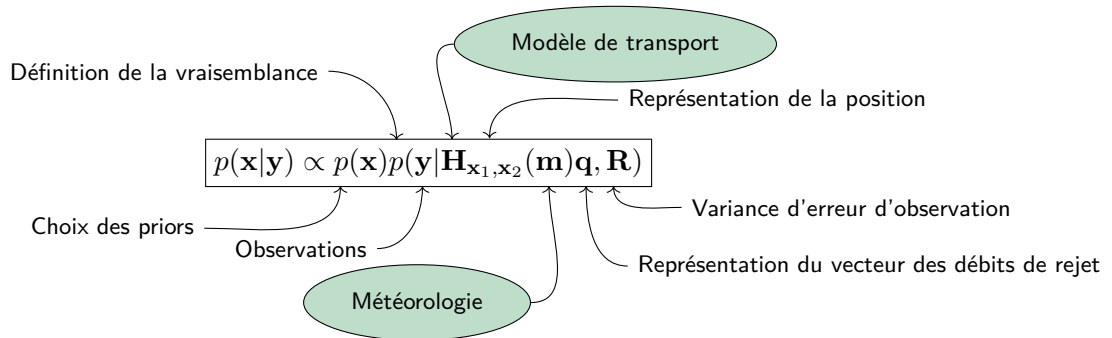


Figure 5.6 – Description des sources d’incertitudes dans la formule de Bayes appliquée au cas de la reconstruction de sources. On se concentre sur l’étude de l’incertitude émanant des modèles physiques.

Dans cette troisième partie, nous nous concentrons sur les incertitudes émanant des modèles physiques comme décrit dans l’équation 5.6 : la météorologie et le modèle de dispersion atmosphérique.

Une source importante d’incertitudes dans la modélisation inverse pour l’estimation du terme source trouve son origine dans les données météorologiques et les modèles de transport (Sato et al. 2018) qui sont utilisés pour simuler le transport du panache. Les incertitudes des prévisions météorologiques proviennent d’erreurs dans les conditions initiales et d’approximations dans les constructions des modèles numériques.

Elles peuvent être réduites et évaluées grâce à l’utilisation de méthodes de prévisions d’ensemble (Leith 1974). Plusieurs réalisations d’une même prévision sont considérées, où pour chaque réalisation, les conditions initiales et le modèle numérique sont perturbés. Pour réduire et mieux estimer les incertitudes, on peut utiliser une combinaison de ces prévisions. Cette approche est connue sous le nom de prévision d’ensemble multi-modèles (Zhou et Du 2010). Plus précisément, les membres de l’ensemble peuvent être combinés par agrégation séquentielle, où chaque membre de l’ensemble se voit attribuer un poids. Une prévision agrégée est alors formée par la combinaison linéaire pondérée des prévisions de l’ensemble, où les poids sont calculés en utilisant diverses méthodes telles que des algorithmes d’apprentissage automatique (Mallet et al. 2009) ou des algorithmes de moindres carrés (Mallet et Sportisse 2006). Ces poids peuvent dépendre d’observations ou d’analyses antérieures (Mallet 2010).

De la même façon, l’incertitude liée au modèle de transport peut être réduite par des méthodes d’ensemble, telles que celles présentées par Delle Monache et Stull 2003 qui utilisent un mélange de plusieurs modèles de qualité de l’air.

5.3.1 Création de l'ensemble d'opérateurs d'observation

Comme expliqué dans la section 1.4, l'opérateur d'observation linéaire \mathbf{H} est calculé avec un modèle de transport atmosphérique, qui prend les champs météorologiques comme données d'entrées. Pour améliorer les prévisions et donc mieux quantifier les incertitudes, plusieurs opérateurs d'observation calculés avec divers paramètres physiques configurant le modèle de transport et les champs météorologiques peuvent être combinés de façon linéaire. Cette combinaison produit alors une prévision unique, espérée plus habile que toute prévision individuelle.

Nous souhaitons donc construire un ensemble d'opérateurs d'observation caractérisé à la fois :

- par une variabilité météorologique. En ce qui concerne celle-ci, les prévisions météorologiques d'ensemble peuvent être utilisées pour la représenter. Les membres d'un ensemble météorologique sont basés sur un ensemble de modèles de taille N_m , où chaque modèle dispose de sa propre formulation physique. L'ensemble d'opérateurs d'observation peut être construit à partir d'un ensemble météorologique ;
- par une variabilité de la paramétrisation du modèle de transport. Nous ne mélangeons pas les résultats de différents modèles de transport dans cette thèse, mais nous pouvons utiliser plusieurs paramétrisations physiques du même modèle de transport. D'abord, nous pouvons faire un inventaire des paramètres du modèle de transport qui peuvent avoir un impact important sur la dispersion d'un radionucléide. Girard et al. 2014 font cet inventaire dans le cas de l'accident de Fukushima-Daiichi. Dans un cas avec peu d'épisodes de précipitation, trois paramètres spécifiques du modèle de transport en particulier peuvent avoir un impact important sur la dispersion d'un radionucléide et sont soumis à d'importantes incertitudes : le dépôt sec, la hauteur du rejet et la valeur du coefficient de diffusion turbulente verticale (K_z). C'est alors à partir d'une collection d'échantillons de ces trois paramètres que l'on peut construire notre ensemble d'opérateurs d'observation.

Par conséquent, pour créer un ensemble d'opérateurs d'observation incluant à la fois les incertitudes provenant des champs météorologiques et du modèle de transport, on peut calculer une collection d'opérateurs d'observation $\mathbf{H}_1, \dots, \mathbf{H}_{N_e}$ à partir de quatre paramètres (N_e est la taille de notre ensemble d'opérateurs d'observation).

Plus précisément, chaque \mathbf{H}_i avec $i \in [1, N_e]$ est la sortie d'un modèle de transport paramétré par :

- un membre choisi dans un ensemble de champs météorologiques, donc une valeur discrète dans $[1, N_m]$;

- une vitesse de dépôt constante tirée dans $[v_{d,\min}, v_{d,\max}]$, deux valeurs qui dépendent du radionucléide considéré ;
- une répartition de la hauteur de rejet entre les différentes couches verticales ;
- une constante multiplicative sur les valeurs de Kz.

L'ensemble d'opérateurs d'observation est donc calculé à partir d'une collection de paramètres. Cette collection est obtenue à partir de l'échantillonnage des valeurs des paramètres.

Une fois l'ensemble d'opérateurs d'observation construit, l'idée est de combiner les membres de cet ensemble de manière linéaire pour obtenir une prédiction plus précise. Un poids w_i peut être associé à chaque opérateur d'observation de l'ensemble :

$$\mathbf{y}_S = \mathbf{H}\mathbf{x} = \sum_{k=1}^{N_e} w_k \mathbf{H}_k \mathbf{x} = \sum_{k=1}^{N_e} w_k \mathbf{y}_{S,k} \quad (5.39)$$

avec $\mathbf{y}_{S,k}$ le vecteur des prédictions calculé à partir de l'opérateur d'observation \mathbf{H}_k . Ainsi, la prédiction est une combinaison linéaire des prédictions de chaque membre de l'ensemble.

Une question légitime est celle de la physacité de l'opérateur d'observation ainsi créé par combinaison linéaire. Autrement dit, on peut se demander si l'objet $\sum_{k=1}^{N_e} w_k \mathbf{H}_k$ représente toujours un transport physique. On peut répondre à cette question de deux manières :

- d'un point de vue physique, cela dépend de deux choses :
 - de la variance de l'ensemble d'opérateurs d'observation. Si la variance est faible, c'est-à-dire si les opérateurs d'observation de l'ensemble dévient peu d'une moyenne, alors on peut considérer que l'objet $\sum_{k=1}^{N_e} w_k \mathbf{H}_k$ représente toujours approximativement un transport physique ;
 - de la répartition des poids : si un ou quelques poids w_k ont des valeurs significativement plus importantes que les autres poids, alors de la même manière on peut considérer que l'opérateur d'observation combiné représente toujours approximativement un transport physique. Il ne dépend en effet réellement que d'un opérateur d'observation ou de l'agrégation de quelques opérateurs d'observation ;
- d'un point de vue mathématique, la question n'a que peu de sens. On peut en effet soutenir la position que la physacité de l'opérateur d'observation importe peu et que seule la qualité des prédictions compte. C'est la position défendue par l'usage de certaines méthodes d'apprentissage automatique : on entraîne un modèle à produire les meilleures prédictions, et ceci peu importe qu'il résolve convenablement des équations physiques ou non.

Enfin, on peut noter que chaque poids w_k peut être considéré comme une variable positive à échantillonner, et peut ainsi être inclus dans l'ensemble des variables échantillonnées par l'algorithme MCMC. Les poids sont dépendants les uns des autres grâce à la condition nécessaire $\sum_{k=1}^{N_e} w_k = 1$, ce qui signifie que $N_e - 1$ variables de poids peuvent être ajoutées à

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, \mathbf{R}, w_1, \dots, w_{N_e-1}). \quad (5.40)$$

Dans la suite, nous nommons ensemble d'opérateurs d'observation ou ensemble amélioré la collection $(\mathbf{H}_1, \dots, \mathbf{H}_{N_e})$.

5.3.2 Évaluation de la qualité d'un ensemble

Il existe différents critères pour juger de la qualité d'un ensemble de prévisions probabilistes (Murphy 1993 ; Delle Monache et al. 2006) :

- la fiabilité : la correspondance de l'observation moyenne conditionnelle et des prévisions conditionnelles, moyennées sur l'ensemble des prévisions. L'étude de la fiabilité d'un ensemble à l'aide de diagrammes de fiabilité est présentée en section 5.3.2.2 ;
- la précision : le niveau de concordance entre les prévisions et les observations, évaluée par le score Brier, ou un score d'erreur de moyenne absolue ;
- la compétence : la précision des prévisions par rapport à la précision des prévisions produites par une méthode standard, mesurée par un score de compétence de Brier ;
- la discrimination : la capacité du système de prévision à distinguer clairement les situations conduisant à la survenance d'un événement d'intérêt de celles conduisant à la non-survenance de l'évènement. L'étude de la discrimination à l'aide d'une courbe ROC est présentée en section 5.3.2.3 ;
- la résolution : la capacité de la prévision à distinguer des situations ayant des fréquences d'occurrence nettement différentes ;
- et la netteté : la capacité à prévoir des valeurs extrêmes ;

Trois types de méthodes pour étudier en particulier la variance, la fiabilité et la discrimination de notre ensemble sont utilisées en section 5.4.2.4 :

- les histogrammes de rang (Anderson 1996 ; Talagrand et al. 1997) utiles pour évaluer la moyenne et la variance d'un ensemble ;
- les diagrammes de fiabilité qui sont des graphiques de la fréquence observée d'un événement tracée par rapport à la probabilité prévue d'un événement ;
- les courbes ROC, qui tracent le taux de vrais positifs par rapport au taux de faux positifs en utilisant plusieurs seuils de probabilité.

Dans la suite, nous considérons que nous travaillons avec l'ensemble d'opérateurs d'observation de taille N_e . Le vecteur des prédictions correspondant au membre j de cet ensemble est noté \mathbf{y}_S^j .

Pour représenter les différents critères, nous avons besoin d'un ensemble de N_{obs} observations binaires et d'une matrice de taille (N_{obs}, N_e) de prédictions binaires correspondantes pour chaque membre de l'ensemble d'opérateurs d'observation. Nous appelons observations ou prédictions binaires des observations ou prédictions ne pouvant prendre que la valeur 0 ou 1.

Le vecteur des observations binaires et la matrice des prédictions binaires sont construits à partir d'un évènement qui peut être défini comme :

- $\{y > t\}$ avec y une observation non binaire et t un seuil ;
- $\{y < t\}$ avec y une observation non binaire et t un seuil ;
- $\{t_1 < y < t_2\}$ avec y une observation non binaire et t_1, t_2 des seuils.

Par exemple, à partir de notre vecteur d'observations \mathbf{y} et l'évènement $\{y > t\}$ défini par un certain seuil t , on peut construire \mathbf{y}_b le vecteur d'observations binaires correspondant à \mathbf{y} où :

$$\forall i \begin{cases} y_{b,i} = 1, & \text{si } y_i > t, \\ y_{b,i} = 0, & \text{sinon,} \end{cases} \quad (5.41)$$

et de la même façon, on peut construire pour chaque membre de notre ensemble amélioré et une source \mathbf{x} (car les prédictions d'un membre \mathbf{H}_j de l'ensemble amélioré dépendent forcément d'une source $\mathbf{x} : \mathbf{y}_S^j = \mathbf{H}_j \mathbf{x}$), un vecteur de prédictions binaires.

5.3.2.1 Histogrammes de rang

Les histogrammes de rang sont utilisés pour diagnostiquer l'écart moyen d'un ensemble par rapport aux observations. Ceci permet de

- diagnostiquer les erreurs de moyenne ou de variance de l'ensemble ;
- mesurer la fiabilité d'un ensemble : un histogramme de rang mesure à quel point l'observation est statistiquement indissociable des prédictions des membres de l'ensemble (Talagrand et al. 1997; Hamill 2001).

Autrement dit, l'histogramme de rang mesure si la distribution de probabilité des observations est bien représentée par l'ensemble, il quantifie la "propagation" d'un ensemble. L'histogramme de rang est construit de la manière suivante :

- pour chaque observation spécifique, les prédictions associées des membres de l'ensemble sont classées, de la plus basse à la plus haute : par exemple, pour l'observation y_i , on classe $(y_{S,i}^j)_{1 \leq i \leq N_e}$;

- ensuite, l'observation est rangée entre les deux prédictions qui l'encadrent : on classe y_i dans $[y_{S,i}^k, y_{S,i}^l]$, ordonné, et on note sa position.

Au final, les observations sont rangées en quantité plus ou moins importante dans différentes boîtes qui correspondent aux intervalles entre les membres classés. On peut alors compter le nombre total d'occurrences, i.e., le nombre total d'observations, dans chaque intervalle. L'histogramme de rang correspond alors à l'ensemble de ces intervalles où le nombre d'observations associé est plus ou moins important. En général, un bon histogramme de rang est plat bien que ce critère soit insuffisant (Hudson et Ebert 2017).

5.3.2.2 Diagrammes de fiabilité

Comme indiqué par Bröcker et L. A. Smith 2007, un ensemble est fiable par rapport à un évènement si celui-ci se produit effectivement avec une fréquence relative observée compatible avec la probabilité relative de prévision calculée par l'ensemble.

Les diagrammes de fiabilité mesurent la capacité à donner des estimations de probabilité non biaisées pour des prédictions dichotomiques. Autrement dit, ils fournissent un diagnostic permettant de vérifier si la probabilité de prévision de l'ensemble est fiable ou non. Pour construire des diagrammes de fiabilité, il faut calculer le vecteur des probabilités de prévision, c'est-à-dire que pour chaque observation, il faut calculer la probabilité prévue que l'observation binaire soit égale à 1.

Avec les membres d'un ensemble, nous avons pour chaque observation y_i la probabilité de prévision que l'observation binaire soit égale à 1 :

$$f_i = \sum_{j=1}^{N_e} \frac{y_{S,i}^{j,b}}{N_e} \quad (5.42)$$

avec $y_{S,i}^{j,b}$ la prédiction binaire de l'opérateur d'observation j de l'ensemble amélioré, et associé à l'observation i . Le vecteur des probabilités de prévision \mathbf{f} est donc de taille N_{obs} .

En résumé, nous avons :

$$\mathbf{y}^b = \begin{bmatrix} y_1^b \\ y_2^b \\ \dots \\ \dots \\ y_{N_{\text{obs}}}^b \end{bmatrix} \quad \text{où } \forall i, y_i \in \{0; 1\} \quad \text{et} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ \dots \\ f_{N_{\text{obs}}} \end{bmatrix} \quad \text{où } \forall i, f_i \in [0, 1]. \quad (5.43)$$

Pour évaluer la fiabilité des prévisions probabilistes, nous devons évaluer si les probabilités prévues correspondent aux observations, c'est-à-dire que nous devons évaluer si une observation binaire y_i^b qui correspond à une probabilité de prévision f_i égale par exemple à 0.3 ne sera finalement égale à 1 que 30% du temps. Bien sûr, ceci est absurde puisque nous

ne disposons que d'une seule réalisation de notre observation (par définition). Nous devons donc, pour réaliser une comparaison, définir des intervalles où nous pouvons rassembler des observations rapprochées et les faire se comporter comme un ensemble cohérent.

Ainsi, on définit un ensemble d'intervalles $(B_k)_k$, des intervalles deux à deux distincts couvrant l'espace $[0, 1]$. De cette façon, chaque prévision de probabilité f_i tombe dans un sous-intervalle B_k unique de $[0, 1]$.

On peut alors définir :

$$I_k = \{i; f_i \in B_k\}, \quad (5.44)$$

qui correspond aux indices des probabilités de prévision tombant dans un certain sous-intervalle. De cette façon, on peut calculer la probabilité observée :

$$l_k = \frac{1}{\text{Card}(I_k)} \sum_{i \in I_k} y_i^b. \quad (5.45)$$

Cette probabilité observée peut être comparée à la prévision probabiliste moyenne des indices en I_k :

$$m_k = \frac{1}{\text{Card}(I_k)} \sum_{i \in I_k} f_i. \quad (5.46)$$

Plus ces deux quantités sont proches, plus on dit que la prévision probabiliste est fiable.

5.3.2.3 Courbes ROC

Les courbes ROC (Receiver Operating Characteristic) mesurent la capacité de l'ensemble à faire la distinction entre les événements et les non-événements. De fait, comme pour les autres méthodes, on utilise des observations et des prédictions dichotomiques.

En substance, la courbe ROC est le tracé du taux de réussite par rapport au taux de fausses alarmes en utilisant un ensemble de seuils de probabilité variables pour prendre la décision oui/non, c'est-à-dire pour définir si une certaine prévision probabiliste est une réussite ou non. Plus précisément, la courbe ROC est la courbe du TPR (True Positive Rate), par rapport au FPR (False Positive Rate). Ces diverses quantités sont définies dans la suite, et plus précisément dans les équations 5.48, 5.49, 5.50.

Pour tracer la courbe ROC, on utilise comme dans les sections précédentes :

- le vecteur des observations binaires qui satisfont ou non la condition d'un événement prédéfini pour un certain seuil t ;
- la matrice des prédictions binaires pour chaque membre de l'ensemble amélioré (l'ensemble d'opérateurs d'observation).

Puis, un ensemble de seuils $\{s_j\}$ est défini entre 0 et 1. Pour chaque seuil, la positivité d'une prévision est établie en comparant la prévision probabiliste au seuil. Plus précisément,

une prévision probabiliste correspondant à l'observation i sera assimilée à un "oui" si, pour un certain seuil s , $f_i > s$, où on rappelle que

$$f_i = \sum_{j=1}^{N_e} \frac{y_{S,i}^{j,b}}{N_e}. \quad (5.47)$$

De cette façon, on peut calculer les scores "True Positive" (TP), "False Positive" (FP), "False Negative" (FN), "True Negative" (TN) :

$$\begin{aligned} \text{TP}(s) &= \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \mathbf{1}_{\{f_i > s\}} \mathbf{1}_{\{y_i^b = 1\}}, \\ \text{FP}(s) &= \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \mathbf{1}_{\{f_i < s\}} \mathbf{1}_{\{y_i^b = 1\}}, \\ \text{FN}(s) &= \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \mathbf{1}_{\{f_i > s\}} \mathbf{1}_{\{y_i^b = 0\}}, \\ \text{TN}(s) &= \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \mathbf{1}_{\{f_i < s\}} \mathbf{1}_{\{y_i^b = 0\}}. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Pour les (s_1, \dots, s_n) précédemment définis, on peut dessiner les points définissant la courbe ROC, soit le TPR :

$$\left(\frac{\text{TP}(s_1)}{\text{TP}(s_1) + \text{FN}(s_1)}, \dots, \frac{\text{TP}(s_n)}{\text{TP}(s_n) + \text{FN}(s_n)} \right) \quad (5.49)$$

contre le FPR :

$$\left(\frac{\text{FP}(s_1)}{\text{TN}(s_1) + \text{FP}(s_1)}, \dots, \frac{\text{FP}(s_n)}{\text{TN}(s_n) + \text{FP}(s_n)} \right). \quad (5.50)$$

Par ailleurs, l'aire sous la courbe (AUC) est une mesure utile utilisée pour calculer le score de compétence

$$2(\text{AUC} - 0.5). \quad (5.51)$$

5.4 Application au cas du ^{106}Ru

Dans cette partie, nous appliquons les méthodes décrites dans ce chapitre à l'évènement de rejet de ^{106}Ru . L'objectif est d'étudier l'apport de chaque méthode à la reconstruction des diverses distributions. Plus précisément, nous nous demandons si les méthodes élaborées avancent une réponse satisfaisante au problème soulevé à la fin de la section 4.1.3.3 du chapitre 4.

Autrement dit, est-ce que

- la définition de meilleures vraisemblances et leur usage ;
- la modélisation de la matrice de covariance de la vraisemblance \mathbf{R} à partir d'un critère de pertinence ;
- l'incorporation des incertitudes météorologiques et du modèle de transport au sein du formalisme bayésien ;

améliorent la quantification d'incertitudes à travers la reconstruction des densités de probabilité des variables décrivant la source du ^{106}Ru ?

Nous répondons à ces questions dans les prochaines sections.

5.4.1 Paramétrisation

Toutes les simulations de cette section sont réalisées à partir des champs météorologiques ERA5 de ECMWF. Ces champs météorologiques sont décrits dans la section 3.4.1.4 du chapitre 3.

Nous rappelons que l'ensemble de données ERA5 est composé

- d'une réalisation haute résolution (HRES) de résolution spatiale 0.28125 degrés et de résolution temporelle 1 heure. Nous utilisons dans un premier temps ces champs météorologiques pour étudier la pertinence de l'usage de plusieurs vraisemblances, sans l'intégration des incertitudes météorologiques et du modèle de transport ;
- d'un ensemble de dix membres à résolution réduite (EDA) de résolution spatiale 0.5625 degrés et de résolution temporelle 3 heures. Un ensemble amélioré d'opérateurs d'observation de taille $N_e = 50$ est construit selon la méthodologie articulée dans la section 5.3. Plus précisément, chaque \mathbf{H}_i avec $i \in [1, N_e]$ est construit à partir de ldX paramétré par
 - un membre choisi dans l'EDA de ECMWF, donc une valeur discrète dans $[1, 10]$;
 - une vitesse de dépôt constante tirée dans

$$[v_{d,\min} = 0.5 \times 10^{-3} \text{m.s}^{-1}, v_{d,\max} = 5 \times 10^{-3} \text{m.s}^{-1}] \quad (5.52)$$

(le choix de référence étant $v_d = 2 \times 10^{-3} \text{m.s}^{-1}$). Cette valeur est choisie à partir du choix de Girard et al. 2014, où l'on considère que les dépôts secs du ^{106}Ru et du ^{137}Cs sont similaires ;

- une répartition aléatoire de la hauteur de rejet entre le premier niveau (0 à 40 mètres) et le deuxième niveau (40m à 120m). Nous avons effectivement considéré précédemment que le rejet était réparti entre les deux premières couches. Cette hypothèse est conservée mais la répartition entre les deux couches est étudiée ;
- une constante multiplicative sur les valeurs de K_z choisie dans $[0.333, 3]$ aussi choisie à partir du travail de Girard et al. 2014 ;

D'autre part, dans le cas du ^{106}Ru , les pluies sont faibles sur l'ensemble du territoire concerné par la propagation du panache, sauf pour la Scandinavie et la Bulgarie. Ceci suggère que le dépôt humide a une faible influence sur les simulations, comparé aux autres processus, et qu'il ne constitue pas une variable intéressante à échantillonner.

Le tableau 5.3 décrit la configuration du modèle de transport ldX utilisée pour simuler la dispersion des radionucléides. Le choix des paramètres non décrits précédemment est basé sur l'analyse effectuée par Saunier et al. (2019) et Dumont Le Brazidec et al. (2020).

Parameter	ECMWF ERA5 HRES H	Ensemble amélioré
Domaine spatial	[6W ; 70E] et [34N ; 68N]	[47E ; 62E] et [53N ; 58N]
Résolution horizontale	$0.28125^\circ \times 0.28125^\circ$	$0.5625^\circ \times 0.5625^\circ$
Résolution verticale	15 couches verticales (de 0 à 8000 m)	
Résolution temporelle	1 heure	3 heures
Diffusion verticale	Diffusion suivant la paramétrisation de Louis (Louis 1979), et (Troen et Mahrt 1986) en conditions instables dans la CLA	Multiple de la diffusion verticale HRES dépendant du membre
Diffusion horizontale	Coefficient de diffusion des tourbillons horizontaux constant $K_h = 0 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$	
Lessivage	$\lambda = \Lambda_0 p_0$, où $\Lambda_0 = 5.10^{-5}\text{h} \cdot (\text{mm.s})^{-1}$ et p_0 est l'intensité des précipitations en mm.h^{-1} (Baklanov et Sørensen 2001)	
Dépôt sec	Vitesse de dépôt constante $v_d = 2.10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$	$v_d \in [0.5.10^{-3}, 5.10^{-3}] \text{m.s}^{-1}$
Hauteur de la source	40% dans la première couche (0 à 40m) ; 60% dans la seconde couche (40 à 120m)	répartition dépendant du membre

Table 5.3 – Configuration des simulations pour l'évènement ^{106}Ru , selon l'opérateur d'observation produit grâce aux données météorologiques HRES, ou selon l'ensemble d'opérateurs d'observation.

Le jeu de données utilisé est décrit dans la section 4.2.3 du chapitre 4. Il s'agit du jeu de données dont on a supprimé les observations liées aux stations localisées dans le sud de l'Oural, proche de l'installation de Mayak. Nous rappelons que cette modification a pour effet d'augmenter les variances des distributions de la longitude et de la latitude.

Les simulations sont effectuées du 22 septembre 2017 à 00.00 UTC au 13 octobre 2017, ce qui correspond à la date de la dernière observation.

Le domaine spatial HRES où nous calculons les opérateurs d'observation \mathbf{H} a été choisi sur la base de travaux antérieurs (Saunier et al. 2019; Dumont Le Brazidec et al. 2020). Le domaine spatial de l'ensemble amélioré est d'envergure réduite en raison des limitations de puissance de calcul, et se concentre sur les domaines géographiques d'origine les plus probables du rejet, déduits des résultats obtenus avec les champs HRES présentés dans la section 4.1.3.2 du chapitre 4. Cela n'a pas d'impact sur les distributions reconstruites : la probabilité que le rejet provienne d'une autre zone avait été identifié comme très faible dans la section 4.1.3.2.

La distance entre deux opérateurs d'observation est de 0.5 degrés pour les simulations avec l'opérateur d'observation ERA5 HRES et de 1 degré avec l'ensemble amélioré d'opérateurs d'observation.

Le vecteur des logarithmes de débits de rejet $\ln \mathbf{q}$ est défini comme un vecteur de taille $N_{\text{imp}} = 9$ impulsions quotidiennes du 22 au 30 septembre compris, comme discuté dans Dumont Le Brazidec et al. 2020.

5.4.1.1 Choix des priors

Comme dans la section 4.1.3 du chapitre 4, les priors sur la longitude, la latitude, la variance de l'erreur d'observation sont supposés être uniformes. Puisque nous ne disposons d'aucune information a priori, le prior sur les poids des membres est aussi supposé uniforme.

Les priors indépendants sur les logarithmes des débits de rejets sont choisis comme des distributions log-gamma pour éviter que les valeurs de rejets n'augmentent de manière irréaliste.

5.4.1.2 Paramètres de l'algorithme MCMC

Les variables sont échantillonnées à l'aide de l'algorithme du parallel tempering défini dans la section 4.1.2. Dix chaînes à des températures différentes $t_i = c^i$ avec $c = 1.5$ sont utilisées dans l'algorithme du parallel tempering.

Les probabilités de transition utilisées pour les marches aléatoires des chaînes de Markov sont définies indépendamment pour chaque variable et basées sur la distribution normale repliée telle que décrite dans (Dumont Le Brazidec et al. 2020) et dans le chapitre 3 en section 3.3.2.

La probabilité de transition des poids des membres de l'ensemble amélioré est également définie comme une distribution normale repliée. Les poids sont d'abord mis à jour indépendamment les uns des autres, puis chaque proposition est mise à jour par la somme des poids, i.e.,

$$\forall i \in [1, N_e] \quad w_i^k \sim \mathcal{FN}(w_i^{k-1}, \sigma_w) \quad \text{puis} \quad w_i^k = \frac{w_i^k}{\sum_{j=1}^{N_e} w_j^k} \quad (5.53)$$

où \mathcal{FN} est la distribution normale repliée, avec σ_w l'écart-type et w_i^{k-1} la valeur du poids du membre k avant la marche aléatoire.

Les variances des probabilités de transition sont choisies sur la base d'expérimentations et sont fixées à $\sigma_{x_1} = \sigma_{x_2} = 3.10^{-1}$, $\sigma_{\ln \mathbf{q}} = 3.10^{-2}$, $\sigma_r = 10^{-2}$, et $\sigma_w = 5.10^{-4}$.

La valeur de la variance σ_r est adaptative et recalculée toutes les 1000 itérations. De plus, dans le cas où nous utilisons plusieurs variables pour définir les coefficients diagonaux de la matrice \mathbf{R} , la variance de transition σ_r n'est pas uniforme pour toutes ces variables (elle doit dépendre de la valeur de la variable variance r associée). Ce choix permet de faciliter la convergence et l'échantillonnage des chaînes.

Toutes les variables sont initialisées de manière aléatoire. Lorsque l'algorithme de discrimination des observations pertinentes décrit dans la section 5.2 est utilisé, une prédiction et une observation sont considérées comme égales si leur différence est inférieure à $\epsilon_d = 0.1$ mBq.m⁻³. Ce choix de seuil est un compromis entre

- une valeur ni trop haute, car cela pourrait mener à juger non-pertinentes des observations qui apportent de l'information ;
- une valeur ni trop basse, car cela pourrait conduire à diminuer artificiellement la valeur r commune aux observations pertinentes, ce que l'algorithme de tri a pour but d'éviter.

5.4.2 Application des méthodes

5.4.2.1 Sommaire

Pour étudier les impacts des techniques proposées dans le chapitre 5 c'est-à-dire :

- l'utilisation de différentes vraisemblances proposées en section 5.1 ;
- l'utilisation de nouvelles modélisations de la matrice de covariance des erreurs proposées en section 5.2 ;
- les méthodes d'ensemble proposées en section 5.3 ;

les densités de probabilité des variables décrivant la source du ^{106}Ru sont échantillonnées selon différentes configurations :

- dans la section 5.4.2.2, les densités de longitude reconstruites avec ou sans l'algorithme de tri des observations en fonction de la pertinence sont comparées, ceci dans le but d'évaluer l'utilité de l'algorithme ;
- dans la section 5.4.2.3, l'objectif est d'analyser l'impact de l'utilisation de plusieurs vraisemblances. Les distributions a posteriori sont reconstruites à l'aide de la météorologie HRES. L'algorithme de tri des observations est appliqué et deux cas sont explorés :
 - pas de regroupement spatial des observations,

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, r_{\text{np}}), \quad (5.54)$$

- et le regroupement spatial des observations avec la modélisation correspondante de la matrice de covariance des erreurs \mathbf{R} comme décrit en section 5.2.4 :

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, \dots, r_k, r_{\text{np}}), \quad (5.55)$$

où nous utiliserons $k = 3$;

- l'ensemble amélioré d'opérateurs d'observation de 50 membres, construit à partir de l'ERA5 EDA de 10 membres et la perturbation des paramètres de ldX , est analysé dans la section 5.4.2.4. Ensuite, les variables décrivant la source \mathbf{x} sont échantillonnées en utilisant l'ensemble amélioré dans la section 5.4.2.5 :

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, r_{\text{np}}, w_1, \dots, w_{N_e}). \quad (5.56)$$

Les densités sont reconstruites à l'aide de l'algorithme de tri des observations et des diverses vraisemblances.

Notez que, lorsque l'algorithme de tri des observations est utilisé, dans tous les cas, environ la moitié des observations sont jugées comme non discriminantes.

5.4.2.2 Application de l'algorithme de tri en fonction de la pertinence

Nous présentons ici une expérience montrant l'intérêt de la méthode de tri des observations pertinentes et non pertinentes. Une reconstruction des variables décrivant la source est proposée en utilisant les 30 premiers membres de l'ensemble amélioré d'opérateurs d'observation. L'ensemble amélioré est étudié dans la section 5.4.2.5. Une vraisemblance log-Laplace avec un seuil égal à 0.1 mBq.m^{-3} est utilisée dans deux configurations de reconstruction de la source du ^{106}Ru : avec ou sans application de l'algorithme de tri des observations.

Ainsi, le vecteur des variables avec algorithme de tri des observations s'écrit :

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, r_{np}, w_1, \dots, w_{N_e}) \quad (5.57)$$

et sans tri des observations s'écrit :

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r, w_1, \dots, w_{N_e}). \quad (5.58)$$

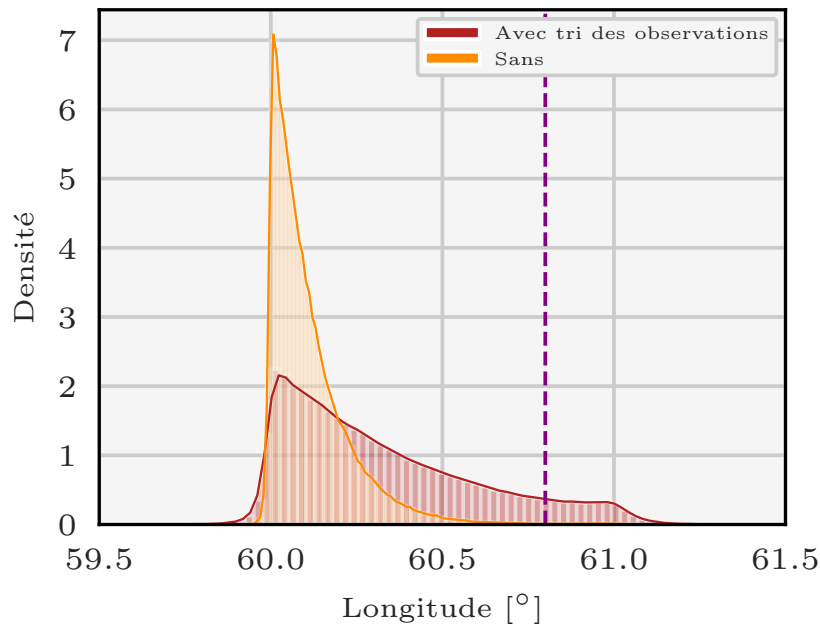


Figure 5.7 – Densité de probabilité de la longitude de la source de ^{106}Ru pour une vraisemblance log-Laplace avec seuil 0.1 mBq.m^{-3} échantillonnée avec l'ensemble amélioré d'opérateurs d'observation par la méthode du parallel tempering avec ou sans l'aide de l'algorithme de tri des observations.

La figure 5.7 présente la distribution de probabilité de la longitude de la source. L'histogramme de couleur rouge représente la densité de la longitude lorsque l'algorithme de tri

des observations est appliqué, tandis que l'histogramme de couleur orange représente la densité de la longitude sans application de l'algorithme de tri des observations.

On observe que la variance de l'histogramme rouge est beaucoup plus importante. En effet, le support de la distribution associée s'étend de 60°E à 61.2°E , tandis que celui associé à la densité de longitude reconstruite sans application de l'algorithme de tri des observations s'étend de 60°E à 60.6°E . C'est-à-dire que le support de la densité avec tri est deux fois plus grand que celui sans l'algorithme de tri.

Rigoureusement parlant, le support d'une variable aléatoire à densité est l'adhérence de l'ensemble des réels pour lesquels la fonction de densité est essentiellement non nulle. Mais nous précisons ici que nous désignons par support l'ensemble des sources probables, c'est-à-dire celles échantillonnées par l'algorithme en un temps raisonnable.

On utilise dans la suite de l'argumentation :

- $\{\mathbf{x}_{\text{avec}}\}$ l'ensemble des sources échantillonnées (et donc considérées comme probables) avec utilisation de l'algorithme de tri des observations ;
- $\{\mathbf{x}_{\text{sans}}\}$ l'ensemble des sources échantillonnées sans.

Par exemple, une source \mathbf{x} incluse dans $\{\mathbf{x}_{\text{avec}}\}$ a une longitude x_1 dans l'intervalle $[60^\circ\text{E}, 61.2^\circ\text{E}]$.

La moyenne des échantillons de la variance de l'erreur d'observation r obtenue sans l'algorithme de tri est de 3.99×10^{-1} . Avec application de l'algorithme de tri, nous avons deux variances :

- la variance r_1 associée aux observations discriminantes (ou pertinentes) qui est de moyenne égale à 6.3×10^{-1} ;
- la variance r_{np} associée aux observations non discriminantes qui tend vers une valeur très faible.

Par définition de la distribution de log-Laplace dans l'équation (5.8), le fait que r_{np} tende vers une valeur très faible confirme que les observations non discriminantes sont des observations qui ne sont pas capables de discriminer de sources incluses dans $\{\mathbf{x}_{\text{avec}}\}$.

Lorsque l'algorithme de tri des observations n'est pas utilisé, c'est-à-dire quand $\mathbf{R} = r\mathbf{I}$: la variance de l'erreur d'observation r est commune à toutes les observations. Le résultat $r = 3.99 \times 10^{-1}$ est donc un compromis entre $r_1 = 6.3 \times 10^{-1}$ et $r_{\text{np}} \sim 0$, les variances échantillonnées avec l'algorithme de tri. La valeur $r = 3.99 \times 10^{-1}$ est donc sous-évaluée pour les observations dites pertinentes, ou discriminantes. Ce compromis est néfaste pour nos distributions.

En effet, l'incertitude sur les observations discriminantes considérée dans le cas sans application de l'algorithme de tri des observations est réduite par rapport à l'incertitude

constatée lors de l'application de l'algorithme. En d'autres termes, la confiance dans les observations discriminantes dans le cas où l'algorithme de tri n'est pas appliqué est artificiellement élevée. L'écart-type des densités a posteriori résultantes est donc réduit par rapport à celui des densités a posteriori échantillonnées avec l'algorithme de tri des observations. Plus précisément, la probabilité des sources les plus probables (ici les longitudes entre 60°E et 60.6°E) est augmentée et la probabilité des sources les moins probables est diminuée (longitudes entre 60.6°E et 61.2°E).

L'algorithme de tri des observations est un algorithme de regroupement qui évite ce compromis néfaste. Les observations systématiquement égales à ϵ_d près à leurs prédictions associées (c'est-à-dire à très faible variance d'erreur d'observation, i.e., à très forte confiance pour toutes les sources probables) - les observations non discriminantes - se voient attribuer une variable d'erreur d'observation spécifique. De cette façon, la variance associée aux autres observations - les observations non-pertinentes, apportant de l'information - est beaucoup plus appropriée. Ce regroupement est donc légitime.

Enfin, il faut noter que l'échantillonnage de la distribution a posteriori de la longitude en utilisant \mathbf{y}_p le vecteur des observations pertinentes plutôt que \mathbf{y} conduit à la construction d'une densité très similaire à la densité bleue de la figure 5.7. En d'autres termes, indépendamment de l'application de l'algorithme de tri des observations, le fait de considérer les observations qui ne peuvent discriminer entre une source de longitude 60°E et une source de longitude 60.8°E diminue la probabilité de la source de longitude 60.8°E, ce qui est un non-sens.

Du fait de la différence significative entre les deux histogrammes, nous concluons de cette partie que l'application de l'algorithme de tri à partir du critère de pertinence est nécessaire.

5.4.2.3 Utilisation de plusieurs vraisemblances

Dans cette section, deux reconstructions sont évaluées, puis comparées : d'abord, nous évaluons l'impact du choix de la vraisemblance sur la reconstruction du vecteur source

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, r_{np}) \quad (5.59)$$

et ensuite, nous étudions comment la modélisation de la matrice d'échelle \mathbf{R} en fonction d'une classification spatiale des observations peut affecter le vecteur source

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, \dots, r_9, r_{np}). \quad (5.60)$$

Dans ce deuxième cas, les groupes sont calculés avec un algorithme de k-moyennes pour $k = 9$.

Les groupes d'observations sont présentés sur la carte 5.8. Comme on peut le voir sur la figure 5.8, les neuf variances ont des valeurs diverses. Étant donné que l'algorithme de

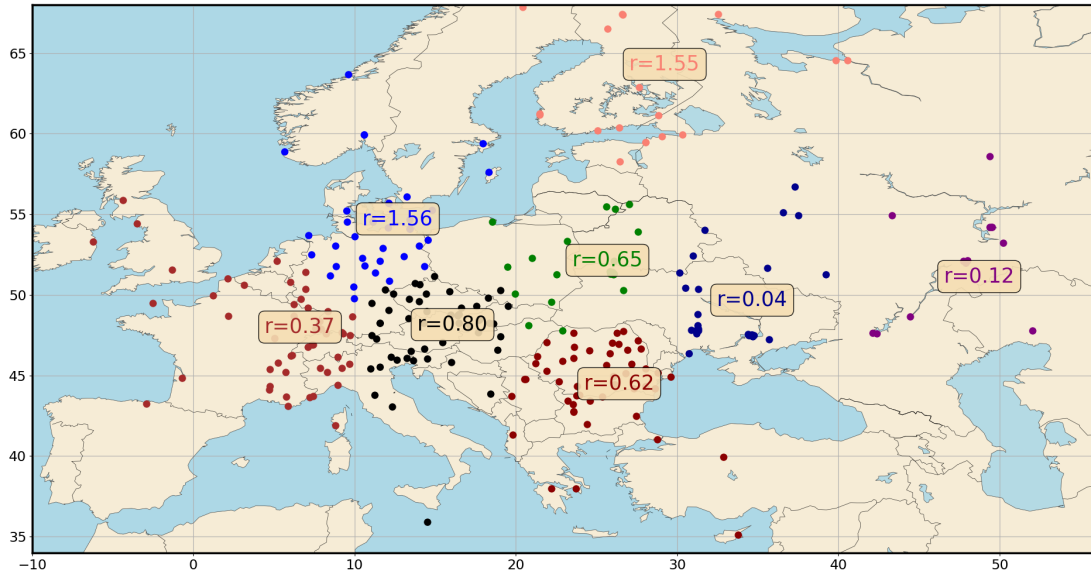


Figure 5.8 – Carte des activités volumiques de ^{106}Ru regroupées spatialement en 9 clusters avec un algorithme de k-moyennes. Les moyennes des échantillons des 9 variances correspondantes ont été calculées à l'aide d'un échantillonnage basé sur l'algorithme du parallel tempering pour une distribution log-normale avec un seuil égal à $0.5 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$.

tri des observations est utilisé et "élimine" les observations à faible incertitude, aucune hypothèse pour tenter d'expliquer la valeur des variances n'est ici proposée. En revanche, la figure est intéressante car elle montre que les variances sont très différentes : l'utilisation d'un seul paramètre pour les représenter toutes est une simplification importante.

Nous présentons maintenant la reconstruction des densités dans les deux scénarios.

Les figures 5.9.a, 5.9.b, 5.10.a représentent les densités marginales des variables décrivant la source en utilisant l'algorithme de tri des observations et en utilisant la météorologie HRES pour les trois vraisemblances décrites dans la section 5.1 : log-normal, log-Cauchy, et log-Laplace.

Dans la suite, nous désignons par densités jointes ou support des densités jointes la superposition des supports des densités pour les différents choix de vraisemblance.

Le support des densités jointes de la longitude s'étend de 59°E à 60.5°E , et celui de la latitude de 55.75°N à 56.75°N .

Le support des densités de longitude jointes est légèrement plus grand que le support de la densité de longitude reconstruit à l'aide d'une seule vraisemblance. Néanmoins, tous les choix sont cohérents sur la position de la source du rejet du ^{106}Ru .

La reconstruction du TRRA en figure 5.10.a montre que le rejet a principalement eu lieu le 25 septembre. Le support des densités du TRRA jointes s'étend de 140 à 300 TBq :

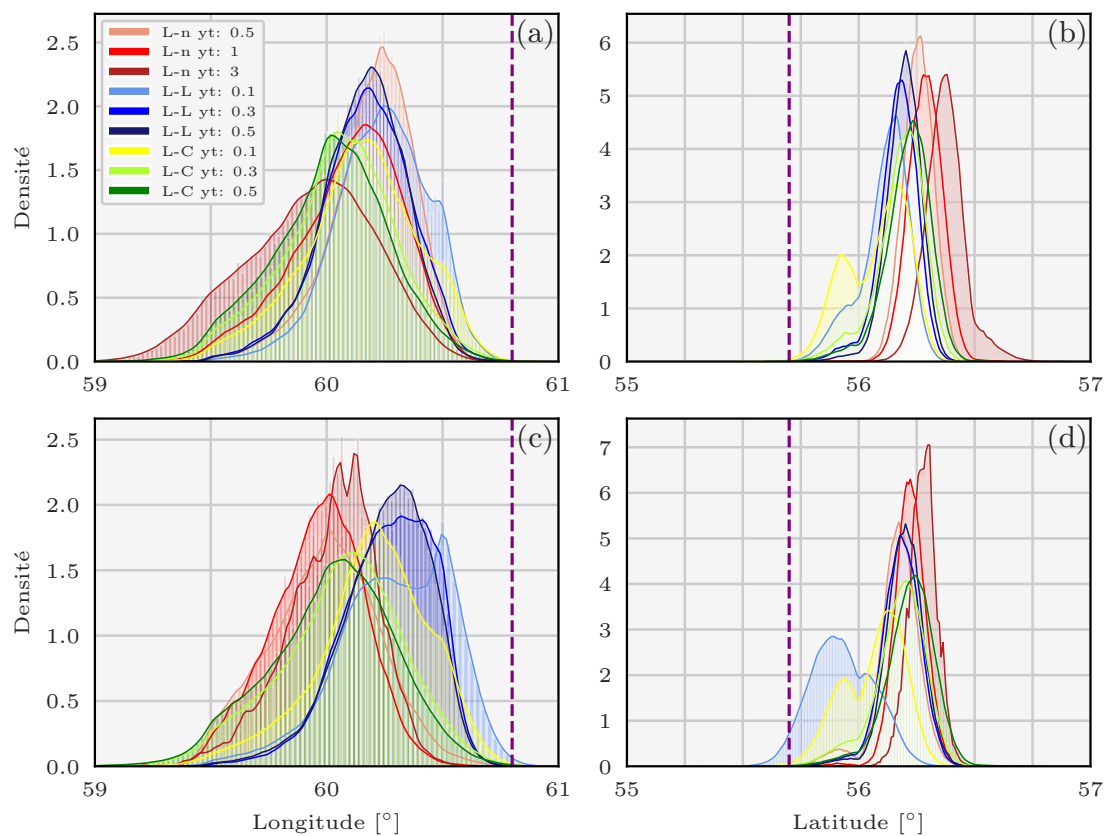


Figure 5.9 – Densités des coordonnées décrivant la source du ^{106}Ru échantillonnée selon la méthode du parallel tempering et l’algorithme de tri des observations et pour diverses vraisemblances dans deux scénarios : longitude sans (a) et avec regroupement spatial d’observation en 9 groupes (c) et latitude sans (b) et avec (d). Les barres verticales violettes représentent les coordonnées du complexe nucléaire de Mayak. L-L signifie log-Laplace, L-n signifie log-normal, L-C signifie log-Cauchy et y_t est le seuil de la vraisemblance.

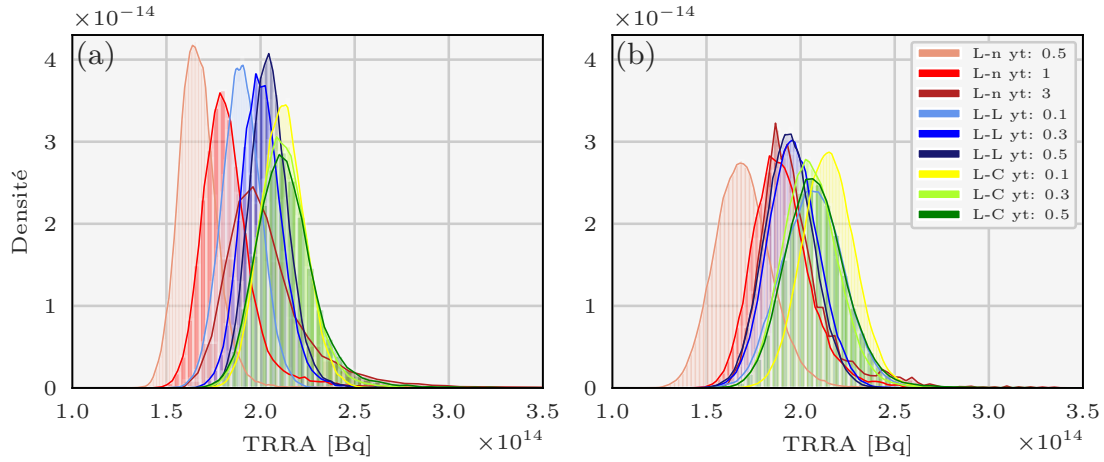


Figure 5.10 – Densité de l'activité totale (TRRA) décrivant la source du ^{106}Ru échantillonnée selon la méthode du parallel tempering et l'algorithme de tri des observations et pour diverses vraisemblances dans deux scénarios : sans (a) et avec regroupement spatial des observations en neuf groupes (b). L-L signifie log-Laplace, L-n signifie log-normal, L-C signifie log-Cauchy et y_t est le seuil de la vraisemblance.

on remarque que le chevauchement entre les supports des densités du TRRA est moins important que le chevauchement des supports des densités de coordonnées.

Cela montre que, dans la présente configuration, l'utilisation d'une seule vraisemblance ne suffit pas pour agréger toute l'incertitude du problème. De plus, nous pouvons voir sur ces graphiques que le choix du seuil a aussi un impact modéré sur la reconstruction des densités des coordonnées et de la densité du TRRA.

Les figures 5.9.c, 5.9.d, 5.10.b montrent les densités marginales des variables décrivant la source dans la même configuration, sauf que 9 variances d'erreur sont utilisées et attribuées aux observations en utilisant le regroupement spatial. L'impact de ce type de classification est faible : les pdfs des coordonnées ou du TRRA ne sont pas significativement modifiées par l'utilisation de cette représentation de la matrice de covariance \mathbf{R} .

5.4.2.4 Étude de l'ensemble

Avant de reconstituer la densité de la source de ^{106}Ru à l'aide de l'ensemble d'opérateurs d'observation, nous étudions la qualité de cet ensemble amélioré, créé par échantillonnage sur l'EDA ERA5 et les paramètres de IdX . L'ensemble amélioré est constitué de 50 membres.

La figure 5.11a est le graphe de l'évolution en fonction du nombre d'heures depuis le début des simulations du vent méridional

- à une position choisie aléatoirement en Europe,
- et évalué par la météorologie HRES ou par l'EDA.

Plus précisément, en bleu sont dessinées les prévisions de vent de la météorologie HRES, et en rouge la prévision moyenne de l'EDA avec les valeurs maximum et minimum. On observe que sur la plupart des pas temporels, la valeur HRES n'est pas incluse dans l'intervalle des valeurs prédites par l'EDA. Autrement dit, la valeur HRES est "en dehors" de l'incertitude émanant de l'ensemble des valeurs EDA.

Cela illustre la faible variance de l'ensemble : les prévisions d'ensemble de ECMWF ont en effet tendance à être sous-dispersives dans la couche limite (surtout à court terme) (Pinson et Hagedorn 2011 ; Leadbetter et al. 2020).

Par conséquent, puisque seules les variables de paramétrisation du modèle de transport peuvent avoir un impact significatif sur l'échantillonnage, nous considérons que 50 opérateurs d'observation est un nombre suffisant d'échantillons.

Pour examiner l'ensemble d'opérateurs d'observation, nous devons définir une source de référence \mathbf{x}_{ref} comme indiqué dans la section 5.3.2. A partir de cette source de référence, les prédictions de l'ensemble amélioré seront calculées pour chaque opérateur d'observation et comparées ensuite aux observations de ^{106}Ru . Il est important de noter que le choix de la source de référence est nécessairement un choix arbitraire qui biaise de fait les résultats.

Nous utilisons la source évaluée à partir de méthodes déterministes (donc, la source évaluée comme la plus probable) de Saunier et al. 2019 comme source de référence : La source de référence est localisée aux coordonnées $[60^\circ\text{E}; 55^\circ\text{N}]$. Selon cette source, 90 TBq ont été rejetés le 25 septembre, et 166 TBq ont été rejetés le 26 septembre.

Le diagramme de rang correspondant (figure 5.11b) montre qu'en moyenne les prédictions sous-estiment les observations. On peut en effet remarquer que les valeurs des observations excèdent très régulièrement celles des 50 prédictions associées.

À partir de la source de référence, une courbe ROC et un diagramme de fiabilité sont tracés en figure 5.12. Chaque courbe des figures 5.12a et 5.12b correspond à un évènement

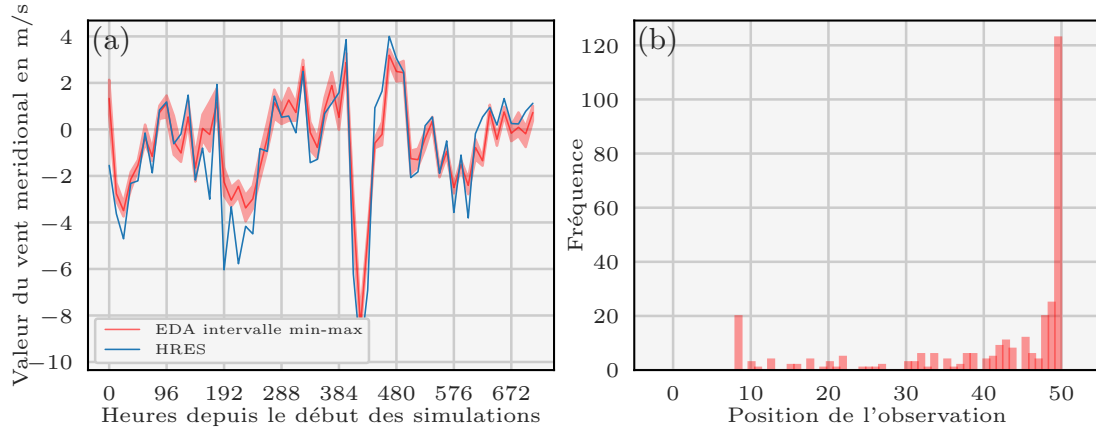


Figure 5.11 – Evolution du vent méridional des météorologies HRES et EDA évalué à une position aléatoire en Europe. La courbe bleue décrit les prévisions de vent selon les champs météorologiques HRES, et la courbe rouge décrit la prévision moyenne de l'EDA avec les valeurs maximum et minimum (a). Histogramme de rang : comparaison entre les observations ^{106}Ru et les prédictions de l'ensemble amélioré calculées avec la source de référence (b).

dichotomique :

$$y \in [y_{\min}, y_{\max}], \quad (5.61)$$

où y est une observation, et y_{\min}, y_{\max} sont les valeurs qui définissent si l'évènement est vrai ou faux pour y .

Ces indicateurs sont tracés pour plusieurs plages $[y_{\min}, y_{\max}]$:

- $[0, 20]$ mBq.m^{-3} ,
- $[20, 50]$ mBq.m^{-3} ,
- $[50, 300]$ mBq.m^{-3} ,
- et $[20, 100]$ mBq.m^{-3} ,

afin d'évaluer les capacités de l'ensemble amélioré sur plusieurs gammes de valeurs.

D'après les courbes ROC, l'ensemble amélioré possède une bonne capacité de discrimination : trois des courbes ont toujours un faible taux de fausses occurrences et un taux de réussite acceptable. On remarque néanmoins que pour l'évènement $[0, 20]$ mBq.m^{-3} , le FPR (probabilité de fausse occurrence) est important pour la plupart des seuils. Les prévisions surestiment la probabilité qu'une observation se situe entre 0 et 20 mBq.m^{-3} .

En ce qui concerne les diagrammes de fiabilité, on peut là aussi remarquer que la prévision surestime la probabilité qu'une observation se situe entre 0 et 20 mBq.m^{-3} . En effet, un

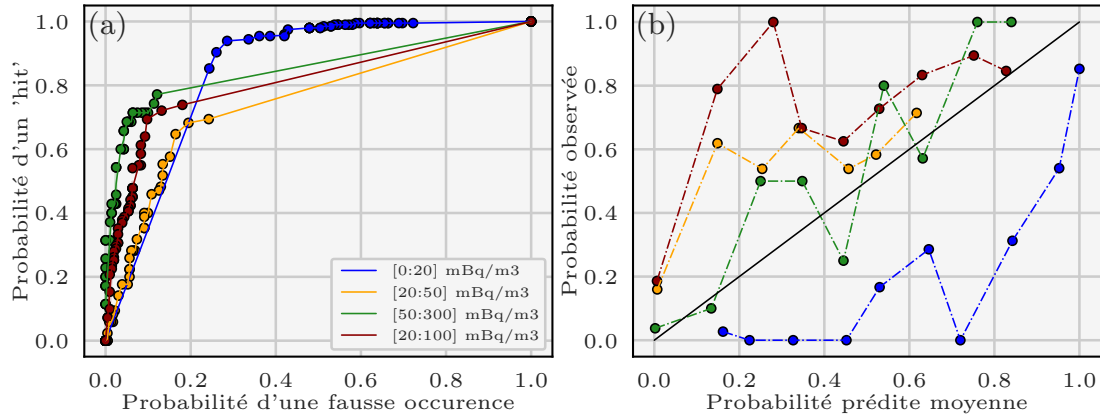


Figure 5.12 – Courbe ROC et diagramme de fiabilité de l'ensemble amélioré créé avec l'échantillonnage de l'EDA et des paramètres du modèle de transport.

ensemble fiable, pour un évènement donné, a une courbe de fiabilité aussi proche que possible de la fonction identité. Pour les trois autres évènements, les diagrammes montrent une fiabilité acceptable dans les prévisions de l'ensemble amélioré.

5.4.2.5 Application des méthodes d'ensemble

Nous étudions maintenant l'impact de l'ajout d'incertitudes météorologiques et de transport dans le processus d'échantillonnage :

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ln \mathbf{q}, r_1, r_{np}, w_1, \dots, w_{N_e}). \quad (5.62)$$

Plus précisément, l'objectif est d'évaluer comment l'ajout de ces incertitudes affecte la reconstruction des distributions des variables.

La figure 5.13 présente les densités marginales des variables de la longitude, de la latitude, et du TRRA. On observe sur les figures 5.13.a et 5.13.b que le support des densités des coordonnées jointes est similaire au support reconstruit avec les champs météorologiques HRES en section 5.4.2.3.

L'utilisation d'un ensemble amélioré pour intégrer les incertitudes météorologiques et de dispersion a un impact très intéressant sur la reconstruction des variables décrivant la source.

En combinaison avec l'utilisation de diverses vraisemblances, les pdfs de la longitude et de la latitude sont significativement impactées comme on peut le voir sur les figures 5.13a et 5.13b. Le support de la pdf de la longitude s'étend de 58.75°E à 61.2°E, et celui de la latitude de 54.75°N à 56.5°N, sans tenir compte des résultats avec la vraisemblance

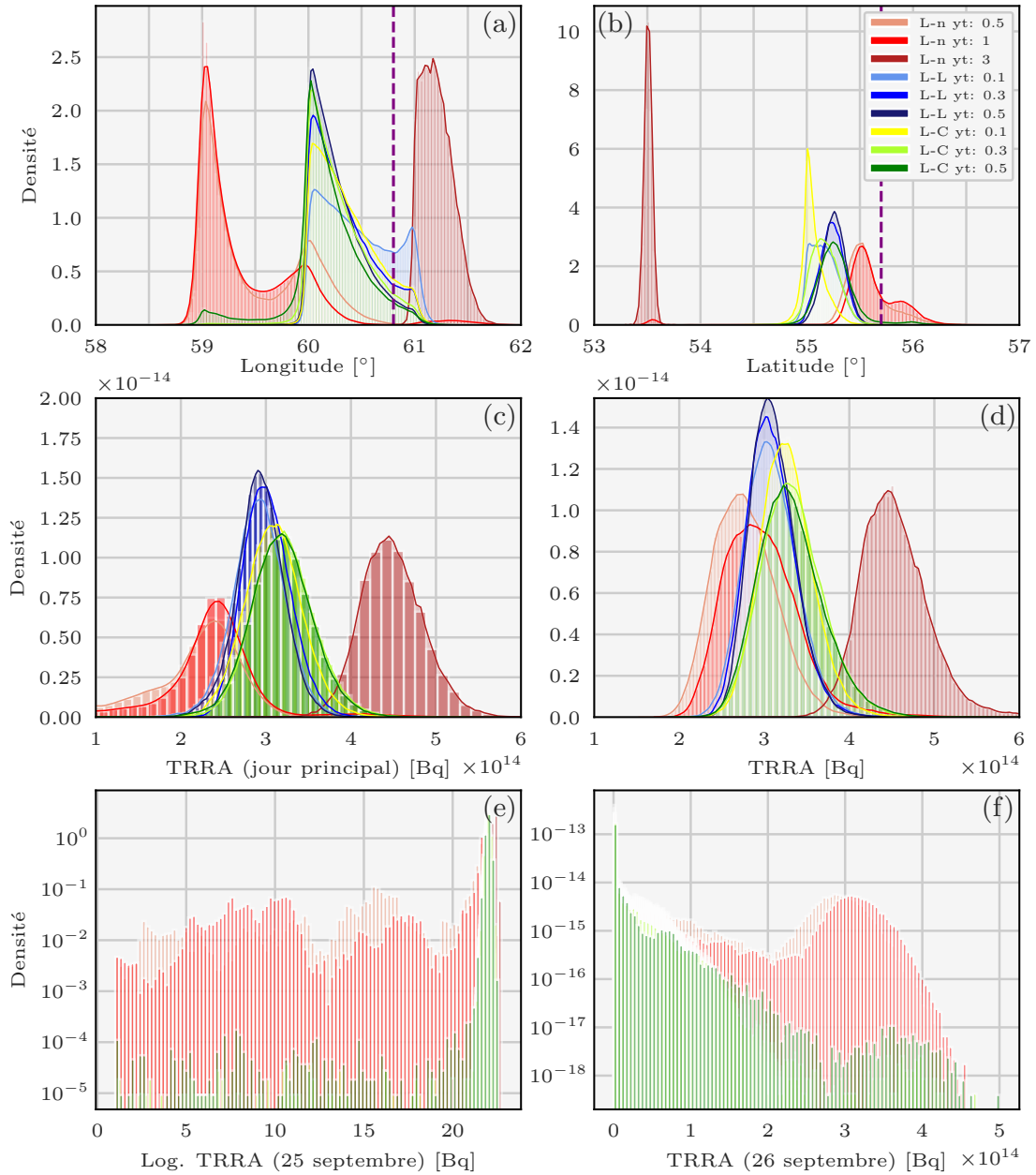


Figure 5.13 – Densités de probabilité des variables décrivant la source de ^{106}Ru échantillonnée selon la méthode du parallel tempering avec l'ensemble amélioré d'opérateurs d'observation et l'algorithme de tri des observations et pour diverses vraisemblances : longitude (a), latitude (b), TRRA le jour principal (c), TRRA (d), Log. du TRRA le 25 septembre (e) et TRRA le 26 septembre (f). Les barres verticales violettes représentent les coordonnées du complexe nucléaire de Mayak. L-L signifie log-Laplace, L-n signifie log-normal, L-C signifie log-Cauchy et y_t est le seuil de la vraisemblance.

log-normale de seuil 3 mBq.m^{-3} . La distribution "outlier" reconstruite avec la vraisemblance log-normale de seuil 3 mBq.m^{-3} est en effet discutable, car elle diffère largement de toutes les autres. Le seuil de 3 mBq.m^{-3} a été choisi comme une limite supérieure et ne semble pas être le choix le plus approprié.

Par ailleurs, sur la figure 5.13d, le support des densités du TRRA jointes s'étend de $150 - 200$ à $450 - 500 \text{ TBq}$ (sans tenir compte de la reconstruction "outlier") alors que ce support s'étendait de 140 à 300 TBq dans la section 5.4.2.3.

En conclusion, cela signifie que l'incertitude émanant des données météorologiques et du modèle de transport est mieux quantifiée.

Il convient également de noter qu'avec la vraisemblance log-normale et un seuil de 0.5 mBq.m^{-3} , ou 1 mBq.m^{-3} , ou log-Cauchy avec un seuil de 0.3 mBq.m^{-3} ou 0.5 mBq.m^{-3} , la distribution du rejet est répartie entre le 25 et le 26 septembre comme l'attestent les figures 5.13c, 5.13e, et 5.13f.

En d'autres termes, l'intégration des incertitudes météorologiques et de transport ajoute une incertitude non seulement sur l'amplitude du rejet mais aussi sur le moment du rejet : ici, le jour.

Nous considérons maintenant la reconstruction des densités des variables de poids des opérateurs d'observation de l'ensemble amélioré :

$$(w_1, \dots, w_{N_e}). \quad (5.63)$$

Les densités des poids des membres sont représentées dans la figure 5.14, chaque graphe correspondant à une vraisemblance et un seuil particuliers. Seules les densités de poids dont la médiane est élevée sont inclus dans les graphiques pour des raisons de visibilité.

En premier lieu, on peut remarquer que le membre 27 est toujours inclus dans le mélange de poids qui définit l'opérateur d'observation interpolé utilisé pour faire les prédictions. D'autre part, le membre 27 constitue pour les six vraisemblances considérées l'un des éléments les plus importants de ce mélange.

Comme l'EDA est peu dispersif, on peut faire l'hypothèse que la densité du poids associé à un membre dépend principalement des paramètres de dispersion qui sont utilisés pour créer ce membre (cet opérateur d'observation).

Pour le membre 27 de l'ensemble amélioré, le rejet est principalement compris entre 40 et 120 mètres, sur la seconde couche verticale ($>90\%$). De plus, la vitesse de dépôt sec utilisée pour construire cet opérateur d'observation est de $0.6 \times 10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$, ce qui est très faible. Par ailleurs, le K_z a été multiplié par 0.47 . Enfin, ce membre de l'ensemble amélioré a été construit à partir des champs météorologiques du membre 6 de l'EDA.

Par ailleurs, on observe que :

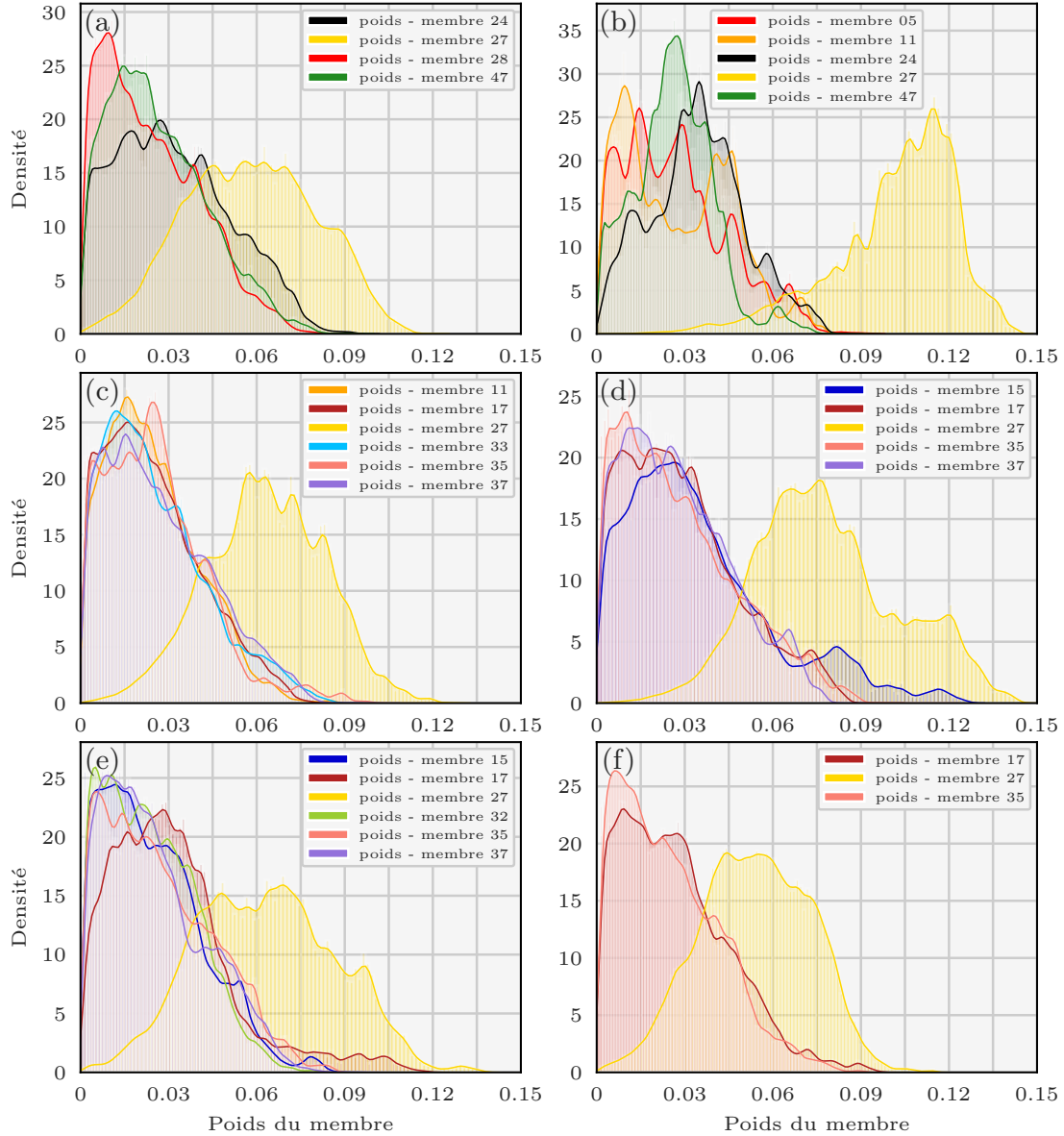


Figure 5.14 – Densités des poids des membres de l'ensemble amélioré en utilisant la méthode du parallel tempering et l'algorithme de tri des observations pour plusieurs vraisemblances : log-normal avec seuil 0.5 (a), log-normal avec le seuil 3 (b), log-Laplace avec le seuil 0.1 (c), log-Laplace avec le seuil 0.5 (d), log-Cauchy avec le seuil 0.3 (e), log-Cauchy avec le seuil 0.5 (f). Tous les seuils sont en $\text{mBq}\cdot\text{m}^{-3}$. Seules les densités avec des médianes élevées sont indiquées.

- la densité marginale du membre 17 est de médiane importante pour 4 vraisemblances différentes. L'opérateur d'observation associé est construit à partir d'une vitesse de dépôt sec égale à $1.2 \times 10^{-3} \text{m.s}^{-1}$, un rejet principalement sur la deuxième couche (75%) et un K_z multiplié par 1.32 ;
- la densité marginale du membre 35 est de médiane importante pour 4 vraisemblances différentes. L'opérateur d'observation associé est construit à partir d'une vitesse de dépôt sec égale à $3.3 \times 10^{-3} \text{m.s}^{-1}$, un rejet principalement sur la deuxième couche (83%) et un K_z multiplié par 0.45 ;

Nous proposons deux hypothèses :

- le poids du membre 27 (et du membre 47) est important car il a une très faible vitesse de dépôt et cette vitesse de dépôt est surestimée lorsque l'on utilise le choix standard ;
- le K_z est surestimé, puisque les membres 27 et 35 sont construits à partir d'un multiplicateur sur le K_z faible.

On peut noter qu'un premier essai avec 30 membres (au lieu de 50 membres ici) a conduit aux mêmes conclusions.

Ces conclusions doivent toutefois être largement nuancées, et sont surtout proposées pour présenter l'intérêt et le potentiel de la méthode.

Finalement, on peut noter que le temps d'échantillonnage lors de l'utilisation d'un ensemble d'opérateurs d'observation est important (4 heures sur un ordinateur disposant de 12 cœurs pour $2e^6$ itérations et 50 membres).

5.4.2.6 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons proposé plusieurs méthodes pour incorporer l'estimation des incertitudes au sein du formalisme bayésien, et ainsi améliorer leur quantification dans le cadre de la reconstruction de sources. L'aspiration de cette section était d'évaluer la pertinence de ces méthodes à partir de leur mise en application sur l'évènement ^{106}Ru .

Nous avons d'abord étudié le choix de la vraisemblance et avons pu observer qu'il affectait modérément l'écart-type et la forme des distributions de la longitude et de la latitude de la source et du TRRA.

A partir d'une expérimentation, nous avons également observé que l'application de l'algorithme de tri des observations pertinentes et non pertinentes pouvait dans certaines configurations avoir un impact très important. En revanche, la classification spatiale des observations en neuf groupes et l'utilisation d'une modélisation de la matrice de covariance

de la vraisemblance appropriée n'a pas eu d'impact significatif sur les distributions des variables décrivant la source.

Enfin, nous avons construit l'ensemble des opérateurs d'observation et l'avons étudié. L'ajout d'incertitudes météorologiques et du modèle de transport en combinaison avec l'utilisation de plusieurs vraisemblances a eu un impact majeur sur la distribution des coordonnées et du TRRA, en affectant à la fois l'amplitude et la répartition temporelle du rejet.

5.5 Application au cas des feux de Tchernobyl en avril 2020

Avant de conclure ce chapitre 5, nous proposons dans cette partie de reconstruire le terme source lié à un évènement très récent : l'évènement des feux de Tchernobyl en avril 2020.

La proposition de cette partie est à la fois de tester nos méthodes sur une autre situation que celle de la détection de ^{106}Ru en 2017, mais aussi de mettre en œuvre ces algorithmes en temps réel afin de voir s'ils sont compatibles avec une utilisation opérationnelle.

Dans cette section, nous appliquons deux des méthodes préalablement décrites, à savoir

- l'utilisation de différentes vraisemblances proposée en section 5.1 ;
- l'utilisation de nouvelles conceptions de la matrice de covariance d'erreur d'observation proposée en section 5.2 ;

sur le cas des rejets de césium 137 suites aux feux de forêt qui ont atteint la zone d'exclusion de Tchernobyl en avril 2020.

Des incendies se sont déclarés en Ukraine en début avril 2020 dans un territoire fortement contaminé par l'accident nucléaire de la centrale de Tchernobyl en 1986. Les incendies ont atteint la zone d'exclusion et l'environnement proche (environ 1km) de la centrale nucléaire de Tchernobyl à partir du 8 avril. En fin de journée du 14 avril, les autorités ukrainiennes ont indiqué que les feux étaient sous contrôle (IRSN 2020).

Une estimation déterministe de l'IRSN évalue la quantité de radionucléides émis à partir du 3 avril à plusieurs centaines de GBq. Les conditions météorologiques qui ont prévalu jusqu'au 14 avril ont favorisé le transport des masses d'air vers la Biélorussie, le sud de l'Ukraine, et les Balkans (Roumanie, Bulgarie). La modélisation indique que les niveaux de radioactivité en France suite à cet accident étaient extrêmement faibles, en dessous de $1\mu\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$.

Dans la suite, nous proposons une reconstruction des rejets de césium 137, à partir des approches bayésiennes développées dans ce chapitre et les chapitres 3 et 4.

5.5.1 Description

Une description du cadre dans lequel nous reconstruisons les rejets est fournie dans cette partie. Plus précisément, le jeu de données est décrit dans la section 5.5.1.1, puis la paramétrisation physique du modèle en section 5.5.1.2. Ensuite, nous nous intéressons aux variables d'intérêt et aux priors utilisés dans le formalisme bayésien, avant de décrire les paramètres utilisés par l'algorithme d'échantillonnage en sections 5.5.1.3 et 5.5.1.4.

5.5.1.1 Jeu de données d'activités volumiques

Deux types de mesure ont été prélevés :

- des mesures du débit de dose gamma ambiant à proximité des zones affectées par les feux, qui n'ont pas mis en évidence de valeurs anormales (IRSN 2020). Mais ces mesures proviennent de dispositifs qui n'ont pas la capacité de détecter des accidents radiologiques mineurs ;
- des mesures beaucoup plus sensibles d'activité volumique de césium 137 que nous utilisons.

Les activités volumiques les plus élevées ont été enregistrées dans la zone de Kiev à partir du 9 avril et s'élèvent à plus d'un $\text{mBq}\cdot\text{m}^{-3}$. Ces valeurs sont significativement plus élevées que les valeurs habituellement mesurées dans l'air à Kiev, mais restent cependant modérées et sans conséquence sanitaire. La figure 5.15 décrit la répartition des activités volumiques prélevées par les stations de mesure européennes en avril 2020. Au total, 300 observations sont utilisées.

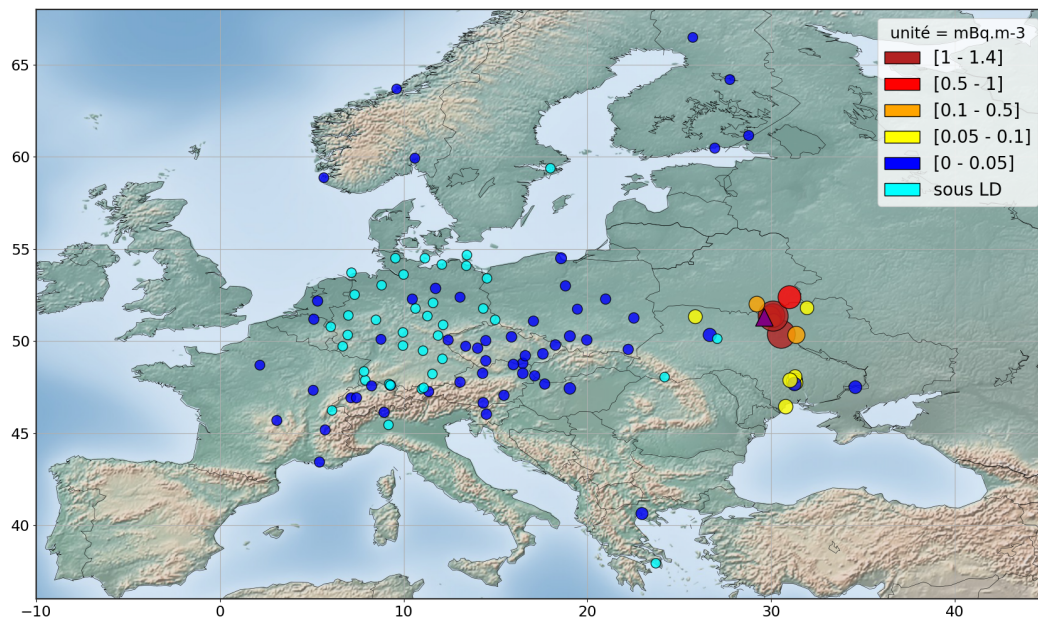


Figure 5.15 – Activités volumiques maximales en $\text{mBq}\cdot\text{m}^{-3}$ observées en Europe en automne 2017. Les points bleu clair correspondent à des concentrations inférieures à la limite de détection. Le triangle violet correspond à la zone supposée de rejet.

5.5.1.2 Paramétrisation

Les simulations sont réalisées à partir des champs météorologiques provenant du modèle ARPEGE de Météo-France. La résolution spatiale de ces champs est de 0.5° , mais les

champs utilisés sont interpolés pour être de résolution 0.25° afin de pouvoir exploiter les mesures à 100 km de la source. La résolution horaire des champs est de 3h. On suppose la source du césium située en un lieu

- unique, afin de simplifier le problème. En réalité, le feu et donc l'origine des rejets se sont déplacés pendant le mois d'avril de quelques dizaines de kilomètres. Cette hypothèse n'a pas d'impact majeur sur nos évaluations. Nous exploitons en effet des mesures situées à au moins 100 km des incendies, ce qui limite l'effet lié à leur mobilité ;
- connue, aux coordonnées $[29^\circ\text{E}, 51^\circ\text{N}]$.

Un opérateur d'observation unique \mathbf{H} est par conséquent construit aux coordonnées $[29^\circ\text{E}, 51^\circ\text{N}]$ à partir des données météorologiques ARPEGE.

Le tableau 5.4 décrit la paramétrisation du modèle de transport ldX utilisée pour simuler la dispersion des radionucléides. Le choix des paramètres est similaire à celui établi dans le cas du ruthénium 106, sauf pour la hauteur de rejet qui est répartie entre 0 et 500m. Le domaine est interpolé à résolution $0.25^\circ \times 0.25^\circ$, le modèle de transport ldX n'étant pas valide pour des prédictions à courte distance.

Paramètre	ARPEGE Météo-France \mathbf{H}
Domaine spatial	$[6^\circ\text{W}, 120.5^\circ\text{E}]$ et $[10^\circ\text{N}, 75.25^\circ\text{N}]$
Résolution horizontale	$0.5^\circ \times 0.5^\circ$ interpolé à $0.25^\circ \times 0.25^\circ$
Résolution verticale	15 couches verticales (de 0 à 8000 m)
Résolution temporelle	3 heures
Diffusion verticale	Diffusion suivant la paramétrisation de Louis (Louis 1979) et (Troen et Mahrt 1986) en conditions instables dans la couche limite
Diffusion horizontale	Coefficient de diffusion des tourbillons horizontaux constant $K_h = 0 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$
Lessivage	$\lambda = \Lambda_0 p_0$, où $\Lambda_0 = 5.10^{-5} \text{ h} \cdot (\text{mm} \cdot \text{s})^{-1}$; et p_0 est l'intensité des précipitations en $\text{mm} \cdot \text{h}^{-1}$ (Baklanov et Sørensen 2001)
Dépôt sec	Vitesse de dépôt sec $v_d = 2.10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Hauteur de la source	Rejet réparti entre 0 et 500m

Table 5.4 – Principales caractéristiques de configuration des simulations de rejets de radionucléides liées aux incendies de Tchernobyl en avril 2020.

Les prédictions du modèle pour un rejet unitaire sont calculées du 2 au 24 avril 2020, pour couvrir toutes les observations. Le vecteur des logarithmes des débits de rejet $\ln \mathbf{q}$ est défini comme un vecteur de taille $N_{\text{imp}} = 22$ impulsions quotidiennes.

La matrice \mathbf{R} est modélisée comme une matrice diagonale. Les observations sont triées spatialement et rangées dans 8 groupes différents. De fait, avec l'algorithme de tri des

observations selon le critère de pertinence, nous décrivons \mathbf{R} à l'aide de $8 + 1$ variables $(r_1, \dots, r_8, r_{np})$. Nous cherchons alors à reconstruire

$$\mathbf{x} = (\ln \mathbf{q}, r_1, \dots, r_8, r_{np}). \quad (5.64)$$

La figure 5.16 décrit la carte des observations classifiées spatialement en 8 groupes.

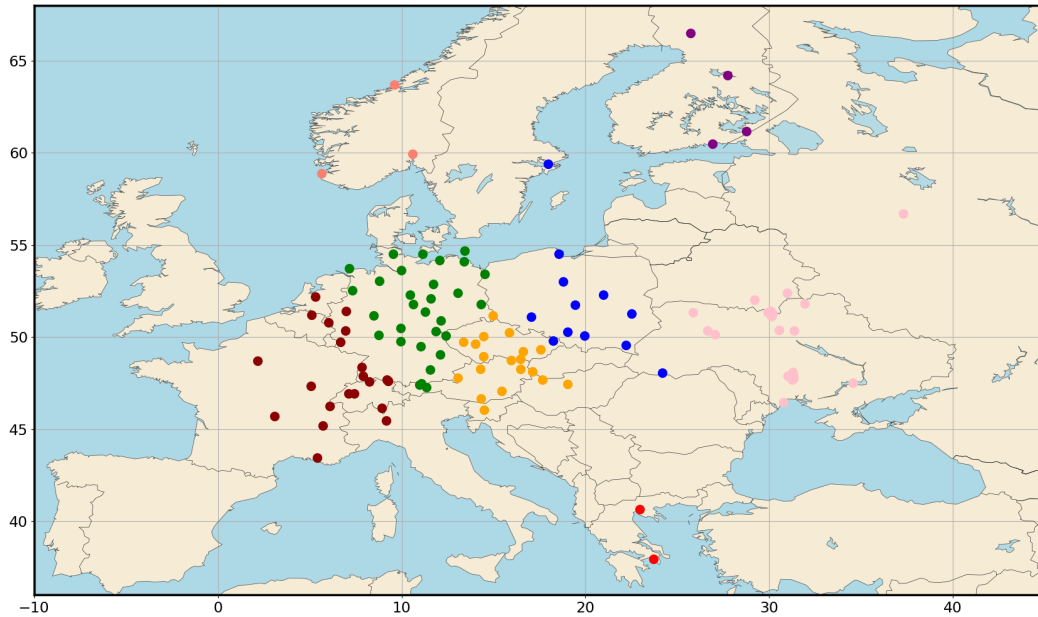


Figure 5.16 – Carte des observations classifiées spatialement en 8 groupes en Europe. Deux groupes correspondent à la Scandinavie (Norvège et Finlande). Un groupe correspond aux observations les plus à l'ouest, trois groupes rassemblent les observations en Europe centrale. Un groupe correspond aux observations en Ukraine et Biélorussie. Enfin, un groupe rassemble les observations des stations grecques.

5.5.1.3 Variables et choix des priors

Dans un cadre bayésien, les connaissances préalables sur les variables de contrôle de la source du césium doivent être décrites. La position de la source est connue, et donc non incluse dans les variables à reconstruire. Cela se formalise dans le cadre bayésien comme un prior où toute la masse de la distribution est concentrée sur un point unique. On supposera le prior sur les variances des erreurs d'observations uniforme.

Pour régulariser le rejet, non suffisamment contraint, on utilise un prior gaussien de variance $b = 10$ sur les logarithmes des débits de rejet. La valeur de la variance a été choisie après expérimentations, pour ne pas contraindre plus que nécessaire le rejet.

5.5.1.4 Paramètres de l'algorithme MCMC

Les probabilités de transition utilisées pour la marche aléatoire des chaînes de Markov sont définies de manière similaire à celles utilisées plus tôt lors de la reconstruction des rejets liés au cas du ^{106}Ru en section 5.4.1.2. On utilise, dans le cadre de l'algorithme du parallel tempering, 8 chaînes à des températures $t_i = c^i$ avec $c = 1.5$.

5.5.2 Application des méthodes

Nous appliquons douze fois l'algorithme du parallel tempering, avec chaque fois une vraisemblance différente pour reconstruire la source $\mathbf{x} = (\ln \mathbf{q}, r_1, \dots, r_8, r_{\text{np}})$. Plus précisément, nous utilisons les vraisemblances log-normal, log-Cauchy, et log-Laplace, avec des seuils de 0.1, 0.3, 0.5, ou 1 $\mu\text{Bq.m}^{-3}$ pour chacune des vraisemblances. Nous pouvons donc évaluer sur ce cas d'étude les effets de l'utilisation de différentes vraisemblances avec différents seuils. Six de ces douze reconstructions sont présentées seulement (par souci de lisibilité) sur la figure 5.17.

5.5.2.1 Reconstruction du rejet

Le TRRA (soit la somme des rejets journaliers) est reconstruit et représenté sur la figure 5.17.b. Le rejet est estimé entre 250 GBq et 2000 GBq pour les valeurs les plus extrêmes. La majorité de la masse de la distribution est comprise entre 250 et 750 GBq ce qui est cohérent avec les reconstructions déterministes. On observe peu de différences entre les reconstructions selon les différents choix de vraisemblance : les densités du rejet total pour une vraisemblance log-Cauchy ont simplement une variance un peu plus importante.

La figure 5.17.a montre l'évolution de la moyenne et de la variance du rejet pour les différentes vraisemblances. On observe plusieurs épisodes distincts de rejet :

- un rejet de moyenne amplitude entre le 5 et 7 avril de débit égal à 10^6Bq.s^{-1} ;
- un rejet de plus forte amplitude entre le 8 et le 13 avril avec un pic du débit à près de 10^7Bq.s^{-1} pour certaines vraisemblances au jour du 12 avril ;
- un rejet entre le 17 et le 19 avril avec un pic du débit à près de 10^7Bq.s^{-1} pour certaines vraisemblances, ou entre le 19 et 21 avril pour certains échantillons reconstruits selon les vraisemblances log-normales à seuils 0.1 ou 0.3 $\mu\text{Bq.m}^{-3}$.

On observe également une large variabilité dans la cinétique du rejet avec des pics de rejet à d'autres moments (comme le 21 avril donc) considérés comme possibles. Il faut néanmoins noter qu'un débit de rejet en dessous de 10^5Bq.s^{-1} est 100 fois inférieure au débit de rejet maximal et peut donc être considéré comme négligeable par rapport au rejet total. Dans la plupart des cas, les reconstructions obtenues pour chaque vraisemblance sont néanmoins globalement cohérentes entre elles.

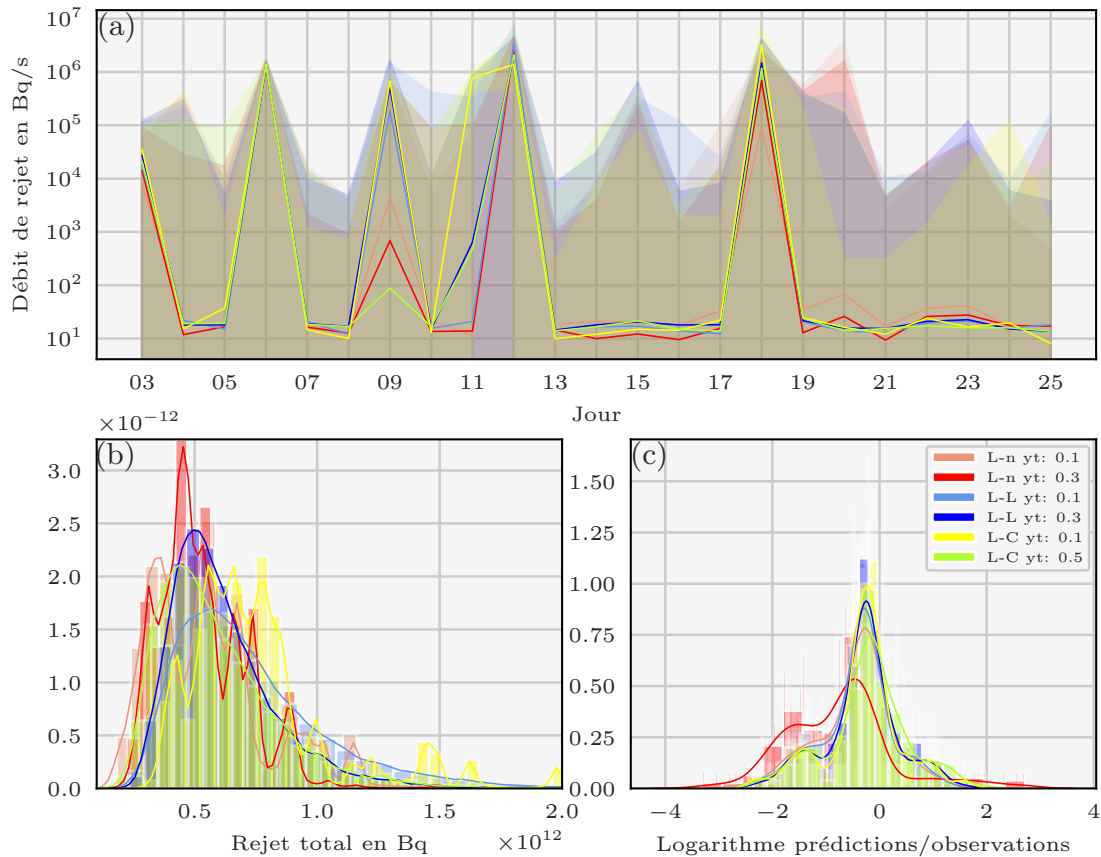


Figure 5.17 – Densités de probabilité des variables décrivant la source des rejets relatifs aux feux de Tchernobyl en avril 2020 échantillonnées selon la méthode du parallel tempering avec utilisation de l’algorithme de tri des observations et pour diverses vraisemblances. Évolution des débits de rejet journaliers du 03/04 au 25/04 (a), rejet total en Bq (b), logarithmes décimaux des différences relatives entre les prédictions ajoutées des seuils et les observations ajoutées des seuils (c). L-L signifie log-Laplace, L-n signifie log-normale, L-C signifie log-Cauchy et y_t est le seuil de la vraisemblance.

5.5.2.2 Reproduction des observations

Dans cette section, nous nous intéressons à la qualité de la reproduction des observations par les prédictions. Dans la figure 5.17.c est reconstruit l'histogramme des logarithmes décimaux des différences relatives entre les observations et les prédictions. Plus précisément, on reconstruit l'histogramme des valeurs

$$\log_{10} \left(\frac{y_{S,i} + y_t}{y_i + y_t} \right) \quad (5.65)$$

pour le vecteur d'observations \mathbf{y} et le vecteur de prédictions associé \mathbf{y}_S , où le vecteur de prédiction utilisé est le dernier vecteur de prédictions échantillonné par l'algorithme MCMC. Une valeur de -1 par exemple signifie que l'observation y_i est 10 fois plus grande que sa prédiction associée $y_{S,i}$. Les observations nulles ont été exclues pour la création de ce graphe.

On observe de manière générale que les prédictions reconstruites sous-estiment les observations, le support de l'histogramme reconstruit étant majoritairement déplacé vers la gauche par rapport à 0. Ceci semble particulièrement vrai pour les prédictions reconstruites à partir d'une vraisemblance log-normale. De manière générale, les vraisemblances log-Laplace ou log-Cauchy ont les meilleurs scores, avec une accumulation plus nette de valeurs nulles ou proches de 0 et un meilleur équilibre entre prédictions trop fortes et observations trop fortes.

Une autre manière d'étudier l'accord observations-prédictions, très similaire au principe de construction de l'histogramme précédent, est de considérer différents scores dits FAC. Les scores FAC2, FAC5 (facteur 2, facteur 5) sont des statistiques qui calculent la proportion des mesures pour lesquelles les valeurs observées et modélisées concordent avec un facteur 2, ou 5.

Les scores du tableau 5.5 ci-dessous ont été calculés avec la dernière des prédictions échantillonnées, mais la variabilité des scores pour différentes prédictions échantillonnées est très faible.

On observe des scores similaires entre les vraisemblances log-Cauchy et log-Laplace, supérieurs aux scores des vraisemblances log-normales. La reconstruction pour la loi log-normale obtient néanmoins un score satisfaisant pour un seuil de $0.1 \mu\text{Bq.m}^{-3}$. De manière générale, les meilleurs scores atteints sont proches de 0.4 dans le cas d'un facteur 2, 0.7 dans le cas d'un facteur 5, et 0.8 dans le cas d'un facteur 10.

5.5.2.3 Distributions des variables décrivant \mathbf{R}

Finalement, on cherche à reconstruire les distributions des variances décrivant la matrice \mathbf{R} dans le cas d'une vraisemblance log-normale avec un seuil de $0.3 \mu\text{Bq.m}^{-3}$.

Vraisemblance	Seuil en $\mu\text{Bq.m}^{-3}$	FAC2	FAC5	FAC10
Log-normal	0.1	0.3596	0.6699	0.7586
	0.3	0.1674	0.4384	0.5566
	0.5	0.2019	0.5911	0.7487
	1	0.1822	0.4729	0.6059
Log-Laplace	0.1	0.3645	0.6896	0.7931
	0.3	0.4236	0.7044	0.8078
	0.5	0.3891	0.6847	0.7832
	1	0.4039	0.7044	0.7783
Log-Cauchy	0.1	0.4137	0.7192	0.8029
	0.3	0.3448	0.6995	0.7783
	0.5	0.4039	0.6896	0.7684
	1	0.3940	0.7142	0.7783

Table 5.5 – Comparaison des concentrations observées et simulées (dernière prédiction échantillonnée), pour différentes vraisemblances et différents seuils. Les FAC2, FAC5, FAC10 sont la proportion des mesures pour lesquelles les valeurs observées et modélisées concordent avec un facteur 2, un facteur 5, ou un facteur 10.

Les observations sont donc réparties en différents groupes représentés par un centroïde qui se trouve dans un pays d'Europe en particulier. Le graphe 5.18 illustre la reconstruction des variances de ces différents groupes d'observations. On observe que la variance du groupe d'observations située en Ukraine est la plus importante, ce qui est cohérent avec le fait que les observations correspondantes sont nombreuses et de valeurs plus importantes et donc plus difficilement reproductibles que des observations nulles que l'on pourrait avoir mesuré, loin du lieu des rejets. La variance du groupe d'observations situé en Grèce est aussi très importante. La variance des observations en Pologne est non négligeable.

Enfin, on peut noter que moins d'une centaine d'observations sur les 300 dont nous disposons sont supposés non-pertinentes par les différentes reconstructions.

5.5.2.4 Conclusions

Pour échantillonner le terme source lié aux feux de Tchernobyl, nous avons appliqué différentes méthodes développées dans ces derniers chapitres. Nous concluons de cette application que :

- nos méthodes sont directement applicables en l'état à un accident pour lequel nous disposons de peu d'informations, et donnent des résultats cohérents et complémentaires d'une approche déterministe classique. Les échantillons sont de plus obtenus en temps réel (moins de 10 minutes) ce qui rend l'algorithme compatible avec une utilisation en temps réel ;

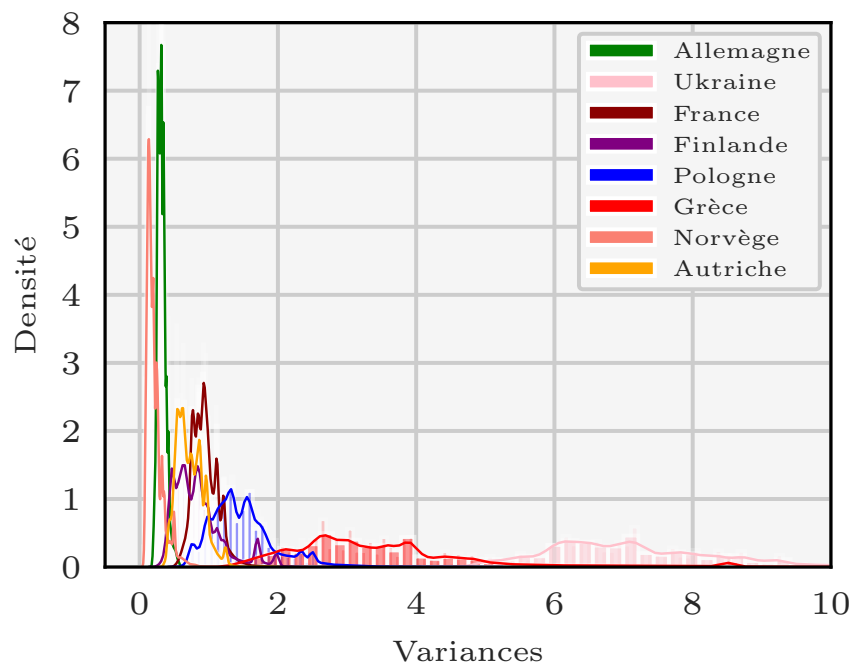


Figure 5.18 – Densités de probabilité des variances de l’erreur d’observation liées à la reconstruction de la source des rejets de césium suites aux feux de Tchernobyl en avril 2020, échantillonnées selon la méthode du *parallel tempering* avec l’algorithme de tri des observations pour une vraisemblance log-normale et un seuil de $0.3 \mu\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$.

- sur ce cas d’étude, l’usage d’une vraisemblance plutôt que d’une autre ne semble pas affecter significativement les distributions reconstruites, sinon sur la période de rejet ;
- bien que donnant des résultats assez similaires, la reconstruction avec la loi log-normale obtient des scores inférieurs en termes de reproduction des observations par rapport aux reconstructions utilisant une loi log-Cauchy ou log-Laplace.

Dans le prochain chapitre, nous nous intéressons à un autre type de cas d’application que ceux jusqu’ici étudiés : le cas d’un rejet complexe issu d’un accident radiologique majeur.

6 Échantillonnage dans le cas de rejets massifs et complexes

Sommaire

6.1	Échantillonnage transdimensionnel	183
6.1.1	Sélection de modèles	183
6.1.2	Algorithme du Reversible-Jump MCMC	187
6.1.3	Représentation transdimensionnelle de la fonction de rejet	190
6.1.4	La question des priors	196
6.1.5	Prior sur les logarithmes des débits de rejet	197
6.1.6	Prior sur la partition de frontières	201
6.1.7	Description de la probabilité de transition	205
6.1.8	Symétrisation des probabilités de transition dans le taux d'acceptation	207
6.1.9	Calcul du jacobien	207
6.1.10	Résumé des taux d'acceptation	209
6.2	Mélange de mesures	211
6.3	Reconstruction du terme source de ^{137}Cs rejeté lors de l'accident de Fukushima-Daiichi	213
6.3.1	Description du rejet de ^{137}Cs de l'accident de Fukushima-Daiichi	213
6.3.2	Paramétrisation	217
6.3.3	Application des méthodes	220

Dans ce chapitre, nous allons aborder le sujet de l'échantillonnage dans le cas de rejets massifs et complexes de radionucléides dans l'atmosphère. Ces rejets, comme ceux de césium 137 lors de l'accident de Fukushima-Daiichi, sont

- des rejets d'importantes quantités de radionucléides ;
- des rejets sur un temps long (plusieurs jours, voir plusieurs semaines) ;
- des rejets avec une très grande variabilité temporelle.

Pour étudier ce type de rejets,

- nous allons dans un premier temps nous intéresser aux concepts de transdimensionnalité et de sélection de modèles à travers l'algorithme du Reversible-Jump MCMC.
- dans un second temps, nous proposerons dans une courte section une méthode simple pour mêler et utiliser différents types de mesures.

Nous appliquerons en section 6.3 ces méthodes à l'estimation du terme source lié aux rejets de ^{137}Cs lors de l'accident de Fukushima-Daiichi. Ce chapitre est une continuité des travaux de Y. Liu et al. 2017 qui appliquent l'algorithme du RJ-MCMC à l'accident de Fukushima-Daiichi dans un cadre monodimensionnel. L'algorithme du RJ-MCMC est ici appliqué dans un cadre transdimensionnel.

6.1 Échantillonnage transdimensionnel

Dans cette première partie,

- nous présentons la méthode d'échantillonnage transdimensionnelle du Reversible-Jump MCMC en section 6.1.2 après avoir procédé à un rapide résumé des méthodes de sélection de modèle, et de moyennage de modèle en section 6.1.1 ;
- puis nous parlons de la modélisation transdimensionnelle du vecteur des débits de rejet et de la nécessité de passer par un algorithme et des processus transdimensionnels pour l'échantillonner en sections 6.1.3 ;
- ensuite, nous discutons de ce que cela implique pour les probabilités a priori en sections 6.1.4, 6.1.5, et 6.1.6 ;
- enfin, nous procédons aux calculs numériques des quantités liées au Reversible-Jump en sections 6.1.7, 6.1.8, et 6.1.9.

6.1.1 Sélection de modèles

Dans cette partie, nous tentons de faire un bref examen des méthodes de sélection de modèle, de la théorie de moyennage de modèles, et de leur mise en œuvre dans un cadre bayésien (George et Clyde 2004 ; T. Hastie et al. 2009 ; Wasserman 2000).

Comme décrit par Wasserman 2000, les modèles sont essentiellement des ensembles de distributions de probabilité à partir desquelles certaines données sont supposées être obtenues : dans notre cas les observations \mathbf{y} (en réalité obtenues à l'aide de capteurs). À cet égard, les modèles sont des fonctions qui relient certaines données \mathbf{y} avec certaines entrées, qui dans notre cas correspondent au vecteur de variables \mathbf{x} .

Par exemple, appelons \mathcal{M}_1 le modèle tel que le lien entre \mathbf{y} et un vecteur de variables \mathbf{x}_1 est supposé linéaire et d'erreur gaussienne comme suit :

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(a \mathbf{x}_1 + \mathbf{b}, \epsilon^2) \quad (6.1)$$

avec a et \mathbf{b} constants. De la même manière, supposons qu'un autre modèle \mathcal{M}_2 lie linéairement les données \mathbf{y} avec une configuration différente du vecteur de variables \mathbf{x}_2 .

Cela nous permet de poser nos deux problèmes :

- le problème de la sélection de modèle qui est celui de l'utilisation des données \mathbf{y} pour sélectionner entre \mathcal{M}_1 et \mathcal{M}_2 le modèle le plus satisfaisant. Cela implique de définir un critère de satisfaction ;
- le problème de moyennage des modèles (model averaging) qui est celui du traitement des données pour choisir et utiliser une combinaison de plusieurs modèles au lieu d'un seul.

Dans le cadre bayésien, les deux problèmes reposent sur l'estimation des quantités $p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})$ pour l'ensemble des modèles \mathcal{M}_j considérés.

En effet, dans le cas de la sélection de modèle, il faut choisir le modèle \mathcal{M}_k tel que

$$p(\mathcal{M}_k|\mathbf{y}) = \max_j p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y}), \quad (6.2)$$

tandis que dans le cas des méthodes de moyennage de modèles, on peut estimer la pertinence de chaque modèle \mathcal{M}_j en calculant un ensemble de poids :

$$\left\{ w_j = \frac{p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})}{\sum_k p(\mathcal{M}_k|\mathbf{y})} \right\}. \quad (6.3)$$

Une fois les poids calculés, ils peuvent être utilisés pour calculer certaines quantités. Par exemple, la prédiction \hat{y}_i correspondant à une observation y_i sera calculée comme la somme des prédictions pondérées des modèles :

$$\hat{y}_i = \sum_j w_j \hat{y}_i^j. \quad (6.4)$$

6.1.1.1 Estimation de $p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})$

Le problème est donc celui de l'estimation de $p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})$. En utilisant la formule de Bayes, $p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})$ est obtenu comme :

$$p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_j)p(\mathcal{M}_j)}{\sum_k p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_k)p(\mathcal{M}_k)}. \quad (6.5)$$

Rappelons qu'un modèle consiste en un ensemble de densités de probabilité décrivant \mathbf{y} . Si l'on note Ω_j l'espace d'états associés au modèle \mathcal{M}_j , nous avons :

$$\mathcal{M}_j = \{ p_{\mathbf{x}_j}(\mathbf{y}) \mid \mathbf{x}_j \in \Omega_j \}. \quad (6.6)$$

Cela donne :

$$p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_j) = \int_{\Omega_j} p_{\mathbf{x}_j}(\mathbf{y})p(\mathbf{x}_j)d\mathbf{x}_j. \quad (6.7)$$

Wasserman 2000 montre que le problème est mal défini pour les priors non informatifs : les solutions exactes de $p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_j)$ (et donc de $p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})$) peuvent être compliquées à calculer. Cependant, une approximation de la distribution a posteriori du modèle peut être calculée (Wasserman 2000) :

$$p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y}) \approx \frac{e^{\hat{m}_j}}{\sum_k e^{\hat{m}_k}}, \quad (6.8)$$

où

$$\hat{m}_j = \max_{\mathbf{x}_j \in \Omega_j} \ln p_{\mathbf{x}_j}(\mathbf{y}) - \frac{\dim \Omega_j}{2} \ln N_{\text{obs}}, \quad (6.9)$$

un critère aussi connu sous le nom de critère BIC (Bayesian Information Criterion). L'entier $\dim \Omega_j$ représente ici la dimension de l'espace d'états décrivant le modèle \mathcal{M}_j : c'est la complexité du modèle.

6.1.1.2 Sélection de modèles selon les critères AIC, BIC

Essentiellement, le critère BIC permet de choisir un modèle plutôt qu'un autre en fonction de deux principes :

- le maximum de vraisemblance du modèle : $\max_{\mathbf{x} \in \Omega} \ln p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$;
- la simplicité du modèle : $-\frac{\dim \Omega}{2} \ln N_{\text{obs}}$.

Cette approximation permet de développer le facteur de Bayes :

$$B_{i,j} = \frac{p(\mathcal{M}_i|\mathbf{y})}{p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})} \quad (6.10)$$

dont le logarithme s'écrit :

$$\begin{aligned} \ln B_{i,j} &= \ln p(\mathcal{M}_i|\mathbf{y}) - \ln p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y}) \\ &= \hat{m}_i - \hat{m}_j \\ &= \max_{\mathbf{x}_i \in \Omega_i} \ln p_{\mathbf{x}_i}(\mathbf{y}) - \max_{\mathbf{x}_j \in \Omega_j} \ln p_{\mathbf{x}_j}(\mathbf{y}) + \frac{\dim \Omega_j - \dim \Omega_i}{2} \ln N_{\text{obs}} \end{aligned} \quad (6.11)$$

et est équivalente à une différence de fonctions de coûts : on retrouve les équivalences entre les formulations variationnelles et probabilistes décrites en section 3.2.4. Le facteur de Bayes $B_{i,j}$ permet de comparer la pertinence d'un modèle \mathcal{M}_i par rapport à un autre modèle \mathcal{M}_j .

Il existe d'autres critères qui mesurent la pertinence d'un modèle comme le critère AIC : on choisit le modèle \mathcal{M}_j qui maximise

$$\max_{\mathbf{x}_j \in \Omega_j} \ln p_{\mathbf{x}_j}(\mathbf{y}) - \dim \Omega_j. \quad (6.12)$$

Ce critère fonctionne aussi sur les deux principes de soupeser le maximum de vraisemblance du modèle et sa simplicité.

On peut comparer la pertinence des deux critères. Le critère BIC pénalise davantage la complexité, et tend donc à choisir des modèles plus simples. Il semble qu'il n'y ait pas de meilleur choix évident entre les critères AIC et BIC (T. Hastie et al. 2009). Notons néanmoins que le critère BIC et la méthode de Bayes, i.e., le calcul direct de $p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})$, sont asymptotiquement équivalents sous de faibles hypothèses (Wasserman 2000). Ainsi, pour un grand nombre d'observations, on peut supposer que le critère BIC choisit un modèle plus correct que le critère AIC.

Un autre atout du critère BIC est qu'il donne un calcul direct d'une approximation de $p(\mathcal{M}_j|\mathbf{y})$ en utilisant \hat{m}_j . D'autres critères existent tels que la longueur minimale de description : DIC (Celeux et al. 2019).

6.1.1.3 Le compromis biais-variance

Plus généralement, le problème de la sélection de modèle rejoint, selon les termes des critères AIC et BIC, le célèbre problème de statistique du compromis biais-variance (T. Hastie et al. 2009). Les modèles de faible complexité sont enclins à un biais élevé mais à une faible variance, tandis que les modèles de grande complexité sont enclins à un biais faible mais à une forte variance. La difficulté de la sélection des modèles est celle de la sélection de modèles suffisamment complexes, mais pas trop pour éviter les surinterprétations qui entraînent une erreur de variance élevée.

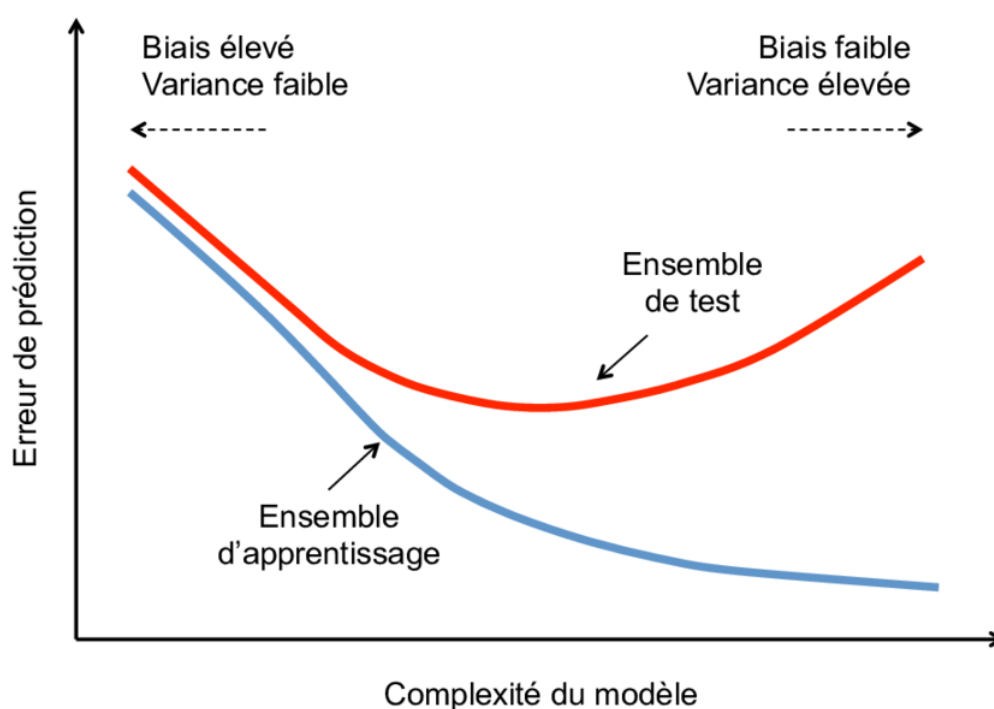


Figure 6.1 – Illustration du dilemme biais-variance. Lorsque la complexité du modèle augmente, l'erreur commise sur l'ensemble d'apprentissage diminue, i.e., la différence entre les prédictions et les observations diminue. Cependant, l'erreur mesurée sur un vecteur d'observations indépendant de l'ensemble d'apprentissage, qui diminue initialement du fait que le biais soit réduit, augmente à partir d'une certaine complexité en raison de l'augmentation de la variance (Brouard 2013).

Autrement dit, c'est le problème de l'arbitrage, illustré en figure 6.1, entre

- un modèle trop peu complexe, c'est-à-dire, un modèle qui n'est pas capable d'apprendre suffisamment des données. Un tel modèle va donc faire des hypothèses très erronées, sous-apprendre l'information à récupérer dans les données. On parle donc d'erreur de biais.
- un modèle trop complexe, qui tend à l'overfitting, c'est-à-dire la surinterprétation des données, et qui va être trop sensible aux observations, de sorte que l'algorithme apprend la variance interne aux observations et aux prédictions associées. On parle donc d'erreur de variance.

Les critères BIC ou AIC arbitrent entre une partie d'ajustement aux données (la maximisation de la log-vraisemblance) et une partie de lutte contre la surinterprétation (la dimension ou le nombre de paramètres) qui rejoint l'argument du rasoir d'Ockham (MacKay 2003). Un autre avantage est qu'en optant pour des modèles de moindre complexité, un algorithme régulé par un critère AIC ou BIC sélectionnera automatiquement des modèles qui n'engendrent pas de temps de calcul trop importants.

Une fois qu'une bonne approximation de la probabilité d'un modèle est calculée, il faut choisir entre sélection du modèle et calcul de moyenne des modèles. La sélection classique d'un modèle statistique ne tient pas compte des incertitudes, tandis que la méthode de moyennage des modèles fournit des mécanismes permettant de prendre en compte l'incertitude du modèle lors de l'estimation des paramètres. On peut appliquer différentes méthodes comme le bagging, l'algorithme d'expectation maximisation, ou les méthodes MCMC (Y. Liu et al. 2017).

6.1.2 Algorithme du Reversible-Jump MCMC

Les méthodes de sélection et de moyennage des modèles décrites jusqu'à présent maximisent la probabilité sur l'ensemble de l'espace d'états et fonctionnent donc à partir d'échantillons déjà produits par d'autres méthodes.

Une autre approche consiste à inclure le choix du modèle désigné par \mathcal{M}_j comme variable de l'algorithme d'échantillonnage. Pour ce faire, nous pouvons utiliser l'algorithme du Reversible-Jump MCMC (RJ-MCMC) qui a été introduit par Green 1995 ou discuté par D. I. Hastie et Green 2012. Cet algorithme a été utilisé par Yee 2008 dans le domaine de la modélisation inverse pour l'évaluation des rejets de substances, et par Y. Liu et al. 2017 dans le cas de Fukushima-Daiichi.

L'algorithme du RJ-MCMC est une extension naturelle de l'algorithme traditionnel de Metropolis-Hastings pour des étapes transdimensionnelles. Une chaîne de Markov est mise

en œuvre et opère sur l'espace

$$\bigcup_j (\{\mathcal{M}_j\} \times \Omega_j) \quad (6.13)$$

avec Ω_j l'espace d'états associé au modèle désigné par \mathcal{M}_j . Autrement dit, Ω_j représente l'ensemble des valeurs que peut prendre un vecteur paramétrisé selon le modèle \mathcal{M}_j .

La chaîne de Markov procède à des marches aléatoires entre différents modèles composés de variables de dimensions différentes tout en préservant l'équilibre détaillé (detailed balance) pour assurer la convergence vers la distribution invariante cible.

Dans l'algorithme du RJ-MCMC, l'équilibre détaillé est préservé lorsque la probabilité de proposer une marche vers l'état $(\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j})$ depuis l'état $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ est égale à la probabilité inverse, c'est-à-dire de proposer une marche vers l'état $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ depuis $(\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j})$. Ici, $\mathbf{x}_{\mathcal{M}_j}$ décrit le vecteur des variables évoluant dans Ω_j .

L'algorithme est très similaire dans sa structure à l'algorithme MH. Il faut d'abord l'initialiser avec un modèle et un ensemble de variables décrits dans ce modèle $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ puis procéder par marches aléatoires. Une marche aléatoire peut être

- intra-modèle, c'est-à-dire qu'on marche de $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ à $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}'_{\mathcal{M}_i})$ où $\mathbf{x}_{\mathcal{M}_i}, \mathbf{x}'_{\mathcal{M}_i} \in \Omega_i$ l'espace d'états associé à \mathcal{M}_i . Une telle marche est définie comme dans un algorithme Metropolis-Hastings ;
- un "saut" aléatoire réversible : une marche aléatoire réversible entre deux modèles (un "reversible jump"). On marche depuis $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ vers $(\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j})$. Les modèles \mathcal{M}_i et \mathcal{M}_j peuvent être de mêmes dimensions ou non. Dans le cas où ils sont de dimensions différentes, nous utiliserons le terme de marches aléatoires transdimensionnelles.

Nous décrivons ici les étapes d'un saut aléatoire réversible (saut entre modèles) :

- engendrer un vecteur de variables \mathbf{u}_i à partir d'une probabilité de transition prédéfinie $g(\mathbf{u}_i | \mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$. C'est ce vecteur de variables qui permet à la chaîne de Markov de "sauter" d'un modèle à un autre. Cette étape est similaire à une étape de Metropolis-Hastings : la marche aléatoire d'une longitude x_1 à une autre x'_1 est construite à partir par exemple d'un bruit gaussien u_{x_1} . Ici, \mathbf{u}_i est un des éléments qui permet de sauter de $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ à $(\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j})$;
- définir $(\mathbf{u}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j}) = g_{i,j}(\mathbf{u}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ où
 - \mathbf{u}_j a un rôle similaire à \mathbf{u}_i : il est le vecteur de variables engendré pour réaliser le saut inverse : $(\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j}) \rightarrow (\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$,
 - $g_{i,j}$ est une fonction inversible et différentiable dont l'espace d'entrée a même dimension que l'espace de sortie ($g_{i,j} = g_{j,i}^{-1}$) :

$$\dim(\mathbf{x}_{\mathcal{M}_i}) + \dim(\mathbf{u}_i) = \dim(\mathbf{x}_{\mathcal{M}_j}) + \dim(\mathbf{u}_j). \quad (6.14)$$

L'inversibilité de $g_{i,j}$ et sa différentiabilité sont nécessaires pour calculer le jacobien utilisé dans le calcul de l'équation (6.15) du taux d'acceptation. On peut noter que dans le cas d'un modèle \mathcal{M}_i imbriqué dans \mathcal{M}_j , un choix naturel pour $g_{i,j}$ est $\mathbf{x}_{\mathcal{M}_j} = g_{i,j}(\mathbf{x}_{\mathcal{M}_i}, \mathbf{u}_i)$ et $\dim(\mathbf{u}_j) = 0$.

Les définitions des probabilités de transitions et de $g_{i,j}$ dépendent de la façon

- dont nous définissons les modèles,
- et dont nous déterminons les sauts aléatoires entre modèles.

Ces quantités sont donc plus précisément définies à l'aide de ces caractérisations dans les prochaines sections de ce chapitre : une représentation concrète est alors donnée ;

- calculer le taux d'acceptation :

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{y}}(i, j) &= \alpha_{\mathbf{y}} \left((\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i}) \rightarrow (\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j}) \right) \\ &= \min \left(1, \text{prior ratio} \times \text{vraisemblance ratio} \times \text{transition ratio} \times |\mathbf{J}| \right) \\ &= \min \left(1, \frac{p(\mathbf{x}_{\mathcal{M}_j}, \mathcal{M}_j)}{p(\mathbf{x}_{\mathcal{M}_i}, \mathcal{M}_i)} \frac{p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j})}{p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})} \frac{g(\mathbf{u}_j|\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j})}{g(\mathbf{u}_i|\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})} |\mathbf{J}| \right). \end{aligned} \tag{6.15}$$

Les deux premiers termes de ce ratio sont les termes relatifs à la distribution invariante tandis que les deux derniers termes assurent la symétrie de la partie transitoire du taux d'acceptation pour satisfaire la balance détaillée. \mathbf{J} est la matrice jacobienne :

$$\mathbf{J} = \left(\frac{\partial g_{i,j}(\mathbf{x}_{\mathcal{M}_i}, \mathbf{u}_i)}{\partial(\mathbf{x}_{\mathcal{M}_i}, \mathbf{u}_i)} \right) \tag{6.16}$$

de la transformation de $(\mathcal{M}_i, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_i})$ à $(\mathcal{M}_j, \mathbf{x}_{\mathcal{M}_j})$, et la valeur absolue de son déterminant (le jacobien) est nécessaire pour tenir compte des changements d'échelle lorsque la transformation implique un saut entre les dimensions. En d'autres termes, le jacobien normalise la différence de volume entre deux espaces de dimensions différentes.

6.1.3 Représentation transdimensionnelle de la fonction de rejet

On s'intéresse dans cette partie à définir l'objet modélisant sur lequel nous allons appliquer nos méthodes de sélection de modèle. Pour cela, nous repartons de la définition de la représentation de notre fonction du débit de rejet de la section 1.4.1 du chapitre 1.

6.1.3.1 Représentation sous forme d'une fonction en escalier

La fonction du débit de rejet, comme décrite dans les chapitres 1 et 3, est une fonction évidemment continue, quelle que soit par ailleurs la représentation de la position que l'on utilise, ou du modèle de transport.

Plutôt que de reconstruire cette fonction continue, nous avons décidé de reconstruire une fonction discrète qui la représente. Plus précisément, nous reconstruisons une fonction en escalier comme décrite en sections 1.4.1, 3.2.1 des chapitres 1, 3.

Jusqu'ici, cette fonction en escalier était à pas

- constants tout au long de l'échantillonnage,
- et réguliers : tous les pas étaient de la même taille.

Pour des termes source peu complexes, comme ceux du cas de détection de ruthénium 106 décrit en section 3.4 du 3, ou des incendies de Tchernobyl décrits en section 5.5 du 5, cette représentation est raisonnable.

Cependant, pour des rejets plus complexes comme celui de Fukushima-Daiichi (que l'on décrit en section 6.3.1.1 de ce même chapitre), une représentation de l'évolution temporelle du rejet à l'aide d'une fonction à pas plus ou moins grands peut être un véritable atout. En effet, un rejet comme celui de Fukushima-Daiichi est marqué par une importante variabilité de la variabilité temporelle de l'amplitude des rejets. Autrement dit, le rejet peut varier très fortement d'une heure à une autre, ou bien varier peu pendant plusieurs jours.

Dans ce cas de figure, avoir une fonction à pas non constants et non réguliers permet d'utiliser des pas de temps adaptés à la variabilité d'un moment. Grossièrement, cela permet

- d'utiliser des pas de temps courts pour les moments de forte variabilité, ce qui permet une bonne représentation ;
- d'utiliser des pas de temps longs pour les moments de faible variabilité, ce qui permet
 - de ne pas surinterpréter les données. De manière générale, les moments de faible variabilité sont souvent associés à un manque d'information, et chercher à modéliser trop finement ces moments serait surinterpréter le peu d'informations dont nous disposons ;
 - d'économiser du temps de calcul.

Le principe a été démontré par Y. Liu et al. 2017.

La figure 6.2, déjà présentée dans le chapitre 3 donne un exemple de représentation d'une fonction continue avec une fonction en escalier à pas plus ou moins fins.

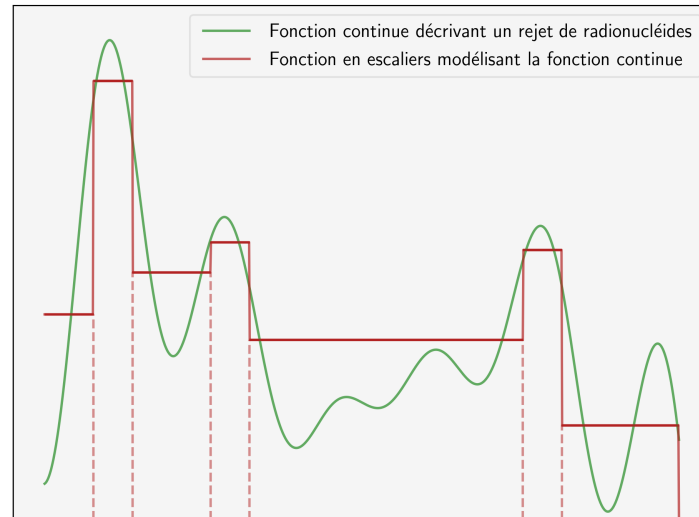


Figure 6.2 – Fonction de l'évolution temporelle du rejet (en vert) et sa représentation par une fonction en escalier (en rouge).

Il est intéressant de noter que la fonction continue (en vert) de la figure 6.2 peut correspondre à deux choses :

- la véritable fonction du rejet si l'on suppose que l'ensemble d'observations et les modélisations du problème sont parfaits ;
- ou la fonction du rejet optimale en fonction de nos observations et de nos a priori, certainement biaisée par rapport à la véritable fonction du rejet.

Le phénomène de surinterprétation est celui de trop essayer de calquer notre fonction en escalier sur la courbe verte correspondant à la seconde définition, qui est forcément biaisée par nature.

Par ailleurs, il peut aussi être intéressant de noter que le travail réalisé dans cette partie traite une autre forme d'incertitudes : celles liées à la représentation de la fonction de l'évolution temporelle du rejet comme indiqué en figure 6.3.

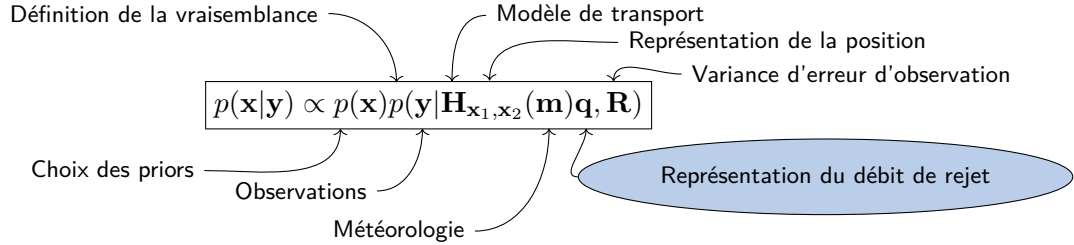


Figure 6.3 – Description des sources d'incertitudes dans la formule de Bayes appliquée au cas de la reconstruction de sources. On se concentre sur la représentation du vecteur de débits de rejet.

6.1.3.2 Caractérisation transdimensionnelle du vecteur de débits de rejet

La variable dont nous souhaitons avoir une représentation complexe est donc celle décrivant l'évolution temporelle du rejet. Comme indiqué précédemment, nous souhaitons décrire la fonction continue du rejet comme une fonction en escalier à pas de temps non constants et non réguliers.

Il se trouve que cette série de pas de temps suffit à définir entièrement notre fonction en escalier. On comprend alors que le problème d'échantillonner une fonction du débit de rejet correspond au problème d'échantillonner cette série de pas de temps. Or, celle-ci n'a pas de dimension précise. Pour l'échantillonner, il nous faut donc recourir à des algorithmes capables d'explorer et de comparer plusieurs possibilités de diverses dimensions.

Plus précisément, la recherche de la meilleure ou des meilleures séries de pas de temps modélisant notre problème peut se faire à l'aide de techniques de sélection de modèles, ou à l'aide d'algorithmes d'échantillonnage transdimensionnels. L'algorithme doit en effet être capable de sélectionner la meilleure variable modélisante parmi plusieurs de dimensions différentes.

Dans la prochaine sous-partie, nous définissons de manière rigoureuse la série de pas de temps évoquée à l'aide du concept de frontière.

6.1.3.3 Frontières et impulsions

Considérons $\ln \mathbf{q}$ le vecteur des logarithmes des débits de rejet en $\text{Bq}\cdot\text{s}^{-1}$. La fonction qui décrit l'évolution du débit de rejet au cours du temps est donc une fonction en escalier

où chaque marche définit un débit de rejet constant au cours d'un intervalle de temps. Précédemment, ces intervalles de temps étaient prédéfinis et réguliers.

L'objectif est maintenant de définir ces intervalles de temps, ainsi que leur nombre, c'est-à-dire le nombre d'impulsions. On rappelle qu'une impulsion est un intervalle temporel pendant lequel le débit de rejet est supposé constant. Autrement dit, l'objectif est de trouver la meilleure partition de débits de rejet.

Pour ça, nous avons recours au concept de frontière : une frontière est un instant qui sépare deux impulsions. Pour N_{imp} impulsions, il existe $N_{\text{imp}} + 1$ frontières notées $(\lambda_0, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}})$: cette partition de frontières est l'objet modélisant (la série de pas de temps) que nous allons chercher à échantillonner avec notre algorithme transdimensionnel du Reversible-Jump MCMC. La partition de frontières est l'objet qui définit le modèle.

La taille d'une impulsion est bornée inférieurement par la taille minimale d'une impulsion définie par le modèle physique. Nous rappelons que chaque colonne de l'opérateur d'observation \mathbf{H} correspond à la propagation d'un terme source unitaire défini sur une certaine impulsion. L'ensemble des colonnes de \mathbf{H} correspond à l'ensemble des impulsions pour lesquelles ont été calculées les prédictions associées. Autrement dit, les impulsions de taille minimale sont les impulsions pour lesquelles ont été calculées et stockées dans \mathbf{H} les prédictions associées. Nous appelons impulsion de taille minimale, impulsion minimale, dans la suite.

Cette durée minimale peut être par exemple une heure, ce qui sera le cas dans l'application sur l'accident de Fukushima-Daiichi de ce chapitre en section 6.3. Nous définissons aussi une borne de temps inférieure et supérieure à notre accident : on estime que le rejet ne peut avoir eu lieu en dehors de ces bornes.

Puisque nous disposons d'un ensemble d'impulsions minimales, nous avons donc un nombre d'impulsions maximum. Ceci veut aussi dire qu'il existe un nombre de frontières maximum. On note $N_{b,\text{max}}$ le nombre de frontières maximum qui ne compte que des frontières intérieures. Ce nombre de frontières maximum est lié au nombre d'impulsions minimales $N_{\text{imp},m}$ par la relation $N_{\text{imp},m} = N_{b,\text{max}} + 1$.

En conséquence, une frontière est définie par une position (un entier) dans $[1, N_{b,\text{max}}]$. Sur la figure 6.4, nous avons un exemple avec $N_{b,\text{max}} = 25$, et $N_{\text{imp},m} = 26$. Dans l'exemple de la figure 6.4, λ_0 et λ_6 sont des frontières extérieures fixes et ne sont donc pas des variables.

On peut remarquer que pour $(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1})$ la partition de frontières courante qui modélise notre vecteur des débits de rejet, l'espace d'états associé Ω décrit dans la section 6.1.2 constitue l'ensemble des valeurs que peut prendre le vecteur des débits de rejet configuré par $(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1})$.

À partir de maintenant, nous considérons que la partition de frontières intérieures

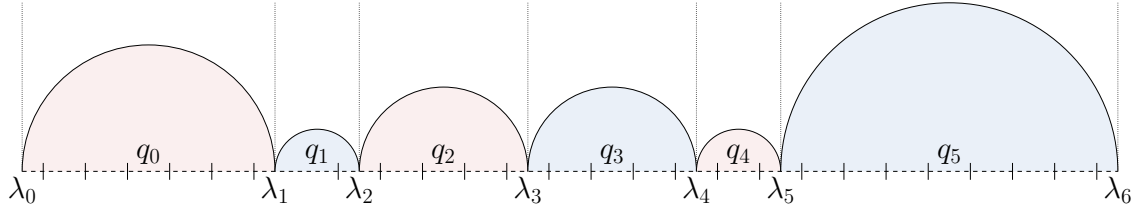


Figure 6.4 – Paramétrisation de l’espace des débits de rejet en impulsions de différentes tailles, délimitées par des frontières. Ici, $N_{b,\max} = 25$ positions (ce nombre est limité par le nombre d’impulsions minimales défini par le modèle physique) sont possibles pour une frontière. Nous avons donc $N_{\text{imp},m} = 26$ impulsions minimales, $N_{\text{imp}} = 6$ impulsions courantes, et donc 6 débits de rejet différents.

$(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1})$ est incluse dans le vecteur des variables décrivant la source \mathbf{x} . Comme ces variables décrivent le modèle, nous désignons désormais par \mathbf{x} ce que nous notions $(\mathcal{M}, \mathbf{x}_{\mathcal{M}})$. Plus précisément, nous avons :

$$\mathbf{x} = (\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1}, \ln \mathbf{q}, \mathbf{R}, \dots) \quad (6.17)$$

où les autres variables d’intérêt sont définies en fonction de la modélisation. D’autre part, nous notons $\Lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1})$ le vecteur de frontières.

6.1.3.4 Définition des processus transdimensionnels

Pour rechercher les meilleures partitions de frontières, il faut dans le cadre MCMC procéder à des marches aléatoires. Le RJ-MCMC est fondamentalement équivalent à un algorithme MH sauf que certaines itérations de l’algorithme ne sont pas des marches aléatoires intra-modèle (c’est-à-dire, à Λ constant), mais des sauts aléatoires éventuellement transdimensionnels (c’est-à-dire, à Λ non constant).

Nous souhaitons implémenter trois types de processus qui auront pour rôle de régir la position des frontières : naissance, mort, et déplacement. Pour ces trois processus, nous nous inspirons du travail de Green 1995, D. I. Hastie et Green 2012, Y. Liu et al. 2017, et surtout Bodin et Sambridge 2009.

Nous considérons donc :

- le processus de déplacement d’une frontière de position λ_i vers la position $\lambda_i - 1$ ou la position $\lambda_i + 1$ (seules positions autorisées). On confond ici la frontière et sa position. Ce processus est décrit sur la figure 6.5.

Cette frontière λ_i est aléatoirement choisie parmi les $N_{\text{imp}} - 1$ frontières intérieures définies au moment courant.

Les débits de rejet avant et après la frontière déplacée doivent alors être déterminés. Il existe plusieurs solutions. Si on définit q_{i-1} et q_i comme les débits de rejet avant et après la frontière λ_i qui se déplace, alors la façon la plus simple de procéder est de garder ces quantités constantes.

Plus précisément, nous choisissons d'assigner :

$$\ln q'_{i-1} = \ln q_{i-1}, \quad (6.18)$$

$$\ln q'_i = \ln q_i, \quad (6.19)$$

comme décrit par la figure 6.5 : le rejet change donc pour une seule impulsion minimale. C'est une marche de type $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'$ avec $\dim(\mathbf{x}) = \dim(\mathbf{x}')$.

On pourrait aussi utiliser un processus aléatoire gaussien qui calcule la portée du déplacement, mais nous avons décidé de travailler avec des frontières discrètes.

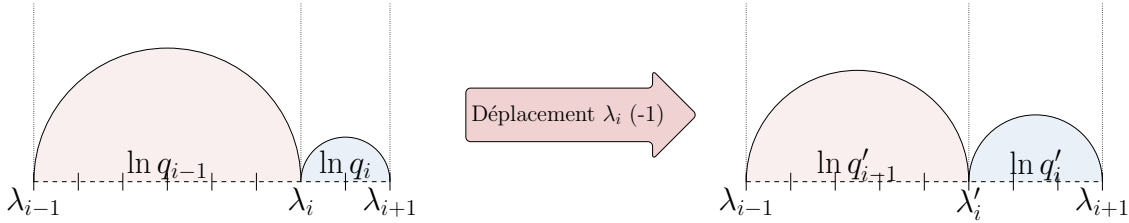


Figure 6.5 – Exemple de processus : déplacement d'une frontière (ici, la frontière λ_i se déplace).

- le processus décrit par la figure 6.6 de création-naissance d'une frontière à une position disponible, c'est-à-dire non déjà occupée par une frontière.

Cette frontière est ainsi choisie parmi $N_{b,\max} - N_{\text{imp}} + 1$ positions libres possibles. On crée dans le processus deux nouveaux débits de rejet (et on en détruit un) qui doivent être déterminés. Pour déterminer les deux nouveaux débits de rejet, on procède de la manière suivante :

- tirer $u \sim \mathcal{N}(0, \sigma)$ avec σ une variance choisie en avance ;
- assigner

$$\ln q'_{i-1} = \ln q_{i-1} - u; \quad (6.20)$$

$$\ln q'_i = \ln q_{i-1} + u. \quad (6.21)$$

De plus : $\ln q'_{i+1} = \ln q_i$.

- le processus de destruction-mort d'une frontière parmi $N_{\text{imp}} - 1$ frontières intérieures. On crée dans le processus un débit de rejet, et on en détruit deux, comme montré sur la figure 6.7. Une solution pour le logarithme de débit de rejet créé consiste à



Figure 6.6 – Exemple de processus : naissance d’une frontière.

assigner :

$$\ln q'_{i-1} = \frac{\ln q_{i-1} + \ln q_i}{2}. \quad (6.22)$$

Une autre solution serait d’assigner une somme des deux débits de rejet proportionnellement aux durées des deux impulsions pré-mort de la frontière correspondante. Nous avons opté pour la première solution pour raisons de simplicité.

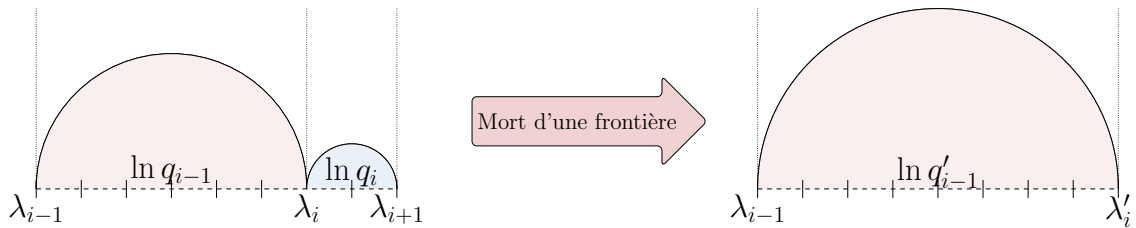


Figure 6.7 – Exemple de processus : mort d’une frontière.

Il convient de noter que ces trois types de perturbation s’ajoutent aux transitions classiques de Metropolis-Hastings. Ainsi, trois des quatre types de perturbation que l’on utilisera dans notre algorithme modifient la paramétrisation (ou modèle, configuration, ou partition de frontières), et un autre modifie les valeurs de débits de rejet à l’intérieur du cadre de la paramétrisation courante. C’est grâce à ces différentes perturbations aléatoires que l’on va être capable d’engendrer un large éventail de modèles de rejet, de quelques degrés de liberté à de nombreux degrés de liberté, avec des échelles spatiales multiples.

6.1.4 La question des priors

L’ajout d’un cadre transdimensionnel a deux conséquences sur la question de l’assignation de priors :

- il demande d’imposer certains priors sur les variables transdimensionnelles qui définissent nos modèles : la partition de frontières ;
- il affecte les priors sur les logarithmes des débits de rejet que l’on avait utilisé dans les précédents chapitres 3, 4, 5 dans un cadre intra-modèle.

Pour ce qui est des priors sur les coordonnées, sur les hyperparamètres r et b , leur taille ne varie pas, et il n'y a donc pas lieu de les modifier. La complexité du modèle (i.e., $N_{\text{imp}} - 1$ la taille de la partition de frontières intérieures, ou le nombre d'impulsions N_{imp}) n'apparaît pas dans la définition de la vraisemblance, et donc la vraisemblance n'a pas à être modifiée. On réutilisera donc les priors et les vraisemblances définis dans les chapitres précédents.

Nous nous intéressons dans les deux prochaines sections aux priors sur les logarithmes des débits de rejet en section 6.1.5 et la partition des frontières en section 6.1.6.

6.1.5 Prior sur les logarithmes des débits de rejet

Dans cette partie, nous nous intéressons au prior à imposer sur les logarithmes des débits de rejet :

- nous rappelons en section 6.1.5.1 la définition du prior gaussien, adaptée au cas où N_{imp} est une variable ;
- en section 6.1.5.2, nous étudions le cas du prior gaussien replié ;
- en section 6.1.5.3, nous proposons une modélisation simple de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche utilisée pour définir les priors gaussien et gaussien replié ;
- enfin, en section 6.1.5.4, nous définissons le prior uniforme sur les logarithmes des débits de rejet.

6.1.5.1 Prior gaussien

Nous redéfinissons le prior gaussien sur les logarithmes des débits de rejet dans le cadre d'un nombre d'impulsions N_{imp} variable :

- avec un paramètre d'échelle commun nommé b ,
- et un paramètre de position commun, l'ébauche, nommé $\ln q_b$.

Nous avons :

$$p(\ln \mathbf{q} | N_{\text{imp}}) = \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi b}} e^{-\frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b}}, \quad (6.23)$$

c'est-à-dire,

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\text{prior}(\ln q)} &= \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{1}{2} \ln(2\pi b) + \frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b} \right) \\ &= \frac{N_{\text{imp}}}{2} \ln(2\pi) + \frac{N_{\text{imp}}}{2} \ln(b) + \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Le nombre d'impulsions N_{imp} étant maintenant une variable, les quantités dépendantes de N_{imp} seulement ne sont plus des constantes de normalisation.

6.1.5.2 Prior gaussien replié

Nous redéfinissons le prior gaussien replié sur les logarithmes des débits de rejet dans le cadre d'un nombre d'impulsions N_{imp} variable :

- avec un paramètre d'échelle commun nommé b ,
- un paramètre de position commun, l'ébauche, nommé $\ln q_b$,
- la position du pliage k .

Nous avons :

$$p(\ln \mathbf{q} | N_{\text{imp}}) = \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi b}} \left(e^{-\frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b}} + e^{-\frac{(\ln q_i - 2k + \ln q_b)^2}{2b}} \right). \quad (6.25)$$

Le coût associé à cette probabilité est aisé à calculer si on impose $k = \ln q_b$:

$$\begin{aligned} p(\ln \mathbf{q} | N_{\text{imp}}) &= \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi b}} \left(e^{-\frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b}} + e^{-\frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b}} \right) \\ &= \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \sqrt{\frac{2}{\pi b}} \left(e^{-\frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b}} \right) \end{aligned}$$

et ainsi :

$$\mathcal{J}_{\text{prior}(\ln q)} = \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\pi b}{2} \right) + \frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b} \right). \quad (6.26)$$

Avec la définition classique de la loi normale repliée à l'origine, $k = \ln q_b = 0$:

$$\mathcal{J}_{\text{prior}(\ln q)} = \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\pi b}{2} \right) + \frac{(\ln q_i)^2}{2b} \right). \quad (6.27)$$

6.1.5.3 Problème des impulsions non-contraintes avec $\mathbf{B} = b\mathbf{I}$

Dans cette section, nous nous intéressons au problème émergent dans le cas où on définit $\mathbf{B} = b\mathbf{I}$, puis nous proposons une meilleure modélisation de cette matrice de covariance d'ébauche.

Tout d'abord, on rappelle qu'une impulsion non-contrainte est définie comme un intervalle temporel pendant lequel une émission de radionucléides ne va activer aucune observation. Autrement dit, c'est un intervalle temporel pendant lequel nous ne disposons pas d'information sur un potentiel rejet.

C'est donc un intervalle temporel i tel que, pour un vecteur des débits de rejet nul partout sauf à cet intervalle temporel :

$$\mathbf{q}^i = (0, \dots, 0, q_i, 0, \dots, 0) \quad (6.28)$$

avec q_i un important débit de rejet, et $\epsilon_{\mathbf{c}}$ un vecteur de petites valeurs :

$$\mathbf{y}_S = \mathbf{H}\mathbf{q}^i < \epsilon_{\mathbf{c}}. \quad (6.29)$$

Le rôle principal du prior sur les logarithmes des débits de rejet est de régulariser les rejets qui ne sont pas contraints par les observations. Autrement dit, l'imposition d'un prior gaussien replié de variance d'ébauche $\mathbf{B} = b\mathbf{I}$ avec un terme de position égal à 0, a pour but de contraindre le logarithme du débit de rejet à être proche de la valeur 0 s'il n'est pas contraint par des observations.

Plus b est grand, moins cette contrainte va être forte, et plus les logarithmes des débits de rejet non contraints par les observations vont être échantillonnés à des valeurs très différentes du terme de position. Or, quand b est commun à toutes les impulsions, il est commun entre :

- des impulsions qui sont contraintes par les observations. Du fait de cette contrainte, certaines de ces impulsions vont être associées à un débit de rejet important ;
- des impulsions qui ne sont pas contraintes par les observations.

Pour diminuer le coût associé aux débits de rejet importants de certaines impulsions contraintes par les observations, l'hyperparamètre b commun atteint des valeurs importantes.

Puisqu'il est commun à toutes les impulsions, l'hyperparamètre commun b est donc aussi de valeur importante pour les impulsions non contraintes par les observations. Il ne contraint alors plus suffisamment les débits de rejet associés, qui peuvent à leur tour atteindre des valeurs très importantes : ces variables ne sont ainsi pas contraintes. Ce phénomène est analysé par Y. Liu et al. 2017.

Pour éviter ce problème, nous allons modéliser \mathbf{B} à l'aide de deux hyperparamètres :

- un coefficient diagonal b_c associé aux impulsions contraintes par les observations ;
- un coefficient diagonal b_{nc} associé aux impulsions non contraintes par les observations.

Dans le cas où la partition des frontières est constante (i.e., dans le cas intra-modèle classique), \mathbf{B} est une matrice diagonale de taille $N_{\text{imp},m} \times N_{\text{imp},m}$ et qui a pour forme :

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_c & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & b_{nc} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & b_{nc} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & b_c & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & b_{nc} \end{bmatrix} \quad (6.30)$$

où l'indice (i, i) de \mathbf{B} correspond au paramètre de variance associé à l'impulsion minimale i . Ici, $N_{\text{imp},m}$ est le nombre d'impulsions minimales égal à $N_{b,\text{max}} + 1$ le nombre de frontières.

Déterminer alors la forme de \mathbf{B} , c'est-à-dire déterminer quels coefficients diagonaux - quelles impulsions minimales - sont non-contraints (ou très peu contraints) par les observations, est un travail qui peut être réalisé avant l'application de l'algorithme MCMC, simplement à l'aide de l'opérateur d'observation \mathbf{H} et du vecteur d'observations \mathbf{y} .

Dans le cas du RJ-MCMC, les impulsions utilisées sont de tailles différentes et variables. Une impulsion dans ce cas est en fait un agrégat de plusieurs impulsions minimales, où on rappelle qu'une impulsion minimale correspond à une ligne-colonne de \mathbf{B} ou une colonne de \mathbf{H} . Ainsi, on peut définir la variance associée à une impulsion en fonction des variances associées aux impulsions minimales qui la composent.

Plus précisément, nous avons

$$(q_{m,0}, \dots, q_{m, N_{\text{imp},m}-1}) \quad (6.31)$$

les $N_{\text{imp},m}$ débits de rejet minimaux (les débits de rejet définis sur les impulsions minimales). Et nous avons

$$(q_0, \dots, q_{N_{\text{imp}}-1}) \quad (6.32)$$

les débits de rejet échantillonnés à une étape du RJ-MCMC, avec N_{imp} le nombre d'impulsions courant à cette étape.

Par définition, $N_{\text{imp}} < N_{\text{imp},m}$ et chaque débit de rejet q_i est l'agrégat de plusieurs débits de rejet minimaux $q_{m,i}$ consécutifs. Il s'ensuit que la variance de régularisation b_i correspondant à q_i est un agrégat des variances de régularisation des débits de rejet minimaux qui composent q_i .

Par exemple, supposons qu'une impulsion minimale correspond à un temps Δ_t (typiquement, une heure), et supposons que q_i est le débit de rejet sur l'impulsion définie entre t_i et $t_i + k_i \Delta_t$ avec $t_i, t_i + k_i \Delta_t \in [0, N_{\text{imp},m}]$ et k_i un entier. Alors, q_i est l'agrégat des débits de rejet minimaux

$$(q_{m,t_i}, \dots, q_{m,t_i+k_i \Delta_t}) \cdot \quad (6.33)$$

Il nous reste à choisir la façon dont nous souhaitons définir la variance associée au débit de rejet q_i en fonction des variances associées aux débits de rejet minimaux correspondant à q_i . Nous choisissons simplement de la définir par somme pondérée :

$$b_i = \frac{\sum_{j=t_i}^{t_i+k_i \Delta_t} \mathbf{B}_{j,j}}{k_i \Delta_t} \quad (6.34)$$

$$= \frac{n_{c,i} b_c + (k_i \Delta_t - n_{c,i}) b_{nc}}{k_i \Delta_t} \quad (6.35)$$

$$= w_{c,i} b_c + w_{nc,i} b_{nc} \quad (6.36)$$

avec $\mathbf{B}_{j,j}$ le j -ème coefficient diagonal de \mathbf{B} , et avec $w_{c,i}$ et $w_{nc,i}$ les nombre d'impulsions minimales comprises dans l'impulsion i , contraintes et non contraintes, respectivement, divisées par le nombre total d'impulsions minimales dans l'impulsion i .

Cette définition se retranscrit nécessairement dans les définitions des priors. Par exemple pour le prior gaussien replié sur son terme de position, et en pliant à $k = \ln q_b$, on a :

$$\mathcal{J}_{\text{prior } \ln q} = \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\pi b_i}{2} \right) + \frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2b_i} \right) \quad (6.37)$$

$$= \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\pi(w_{c,i}b_c + w_{nc,i}b_{nc})}{2} \right) + \frac{(\ln q_i - \ln q_b)^2}{2(w_{c,i}b_c + w_{nc,i}b_{nc})} \right). \quad (6.38)$$

6.1.5.4 Prior uniforme

Enfin, un dernier prior intéressant est le prior uniforme sur les logarithmes des débits de rejet. Il faut définir un logarithme minimum (par exemple $\ln q_{\min} = 0$) et un logarithme maximum (par exemple $\ln q_{\max} = 30$). Puis, on a :

$$p(\ln \mathbf{q}) = \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{\ln q_{\max} - \ln q_{\min}} \quad (6.39)$$

et donc

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\text{prior } \ln q} &= \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \ln (\ln q_{\max} - \ln q_{\min}) \\ &= N_{\text{imp}} \ln (\ln q_{\max} - \ln q_{\min}). \end{aligned} \quad (6.40)$$

6.1.6 Prior sur la partition de frontières

On s'intéresse maintenant au prior sur la partition de frontières :

- nous proposons en section 6.1.6.1 d'étudier un prior uniforme a priori anodin, qui a en fait des conséquences inattendues ;
- en section 6.1.6.2, nous proposons un prior réellement uniforme sur l'ensemble des partitions de frontières ;
- en section 6.1.6.3, nous proposons le prior exponentiel que nous utiliserons dans l'application en section 6.3, après avoir constaté que le prior uniforme ne contraignait pas suffisamment le nombre d'informations.

6.1.6.1 Priors uniformes sur le nombre de frontières et les partitions associées

Dans cette section, nous étudions le prior uniforme sur le nombre de frontières proposé par Bodin et Sambridge 2009. Cette hypothèse en apparence anodine a pourtant des conséquences inattendues.

On considère $(\lambda_0, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}})$ (N_{imp} étant le nombre d'impulsions) l'ensemble des $N_{\text{imp}} + 1$ frontières (et donc incluant les $N_{\text{imp}} - 1$ frontières intérieures qui sont de vraies variables). Le prior sur la partition de frontières peut se décomposer comme suit :

$$p(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1}) = p(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1} | N_{\text{imp}} - 1) p(N_{\text{imp}} - 1). \quad (6.41)$$

On définit alors un prior uniforme sur le nombre de frontières :

$$p(N_{\text{imp}} - 1) = \begin{cases} \frac{1}{N_{b,\text{max}}}, & \text{si } N_{\text{imp}} - 1 \in [1, N_{b,\text{max}}]; \\ 0, & \text{sinon;} \end{cases} \quad (6.42)$$

où nous rappelons que $N_{b,\text{max}}$ est le nombre maximum de frontières intérieures possible. Le prior sur le nombre de frontières étant choisi, il faut définir le prior $p(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1} | N_{\text{imp}} - 1)$. Un choix raisonnable est d'avoir pour préjugé que toutes les partitions pour un nombre donné d'impulsions soient équiprobables.

Pour $N_{\text{imp}} - 1$ frontières, il y a

$$\binom{N_{b,\text{max}}}{N_{\text{imp}} - 1} = \frac{N_{b,\text{max}}!}{(N_{\text{imp}} - 1)! (N_{b,\text{max}} - N_{\text{imp}} + 1)!} \quad (6.43)$$

partitions possibles de ces frontières. Donc :

$$p(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1} | N_{\text{imp}} - 1) = \begin{cases} \left[\frac{N_{b,\text{max}}!}{(N_{\text{imp}} - 1)! (N_{b,\text{max}} - N_{\text{imp}} + 1)!} \right]^{-1}, & \text{si } \forall i \lambda_i \in [\lambda_0, \lambda_{N_{b,\text{max}}}], \\ 0, & \text{sinon;} \end{cases} \quad (6.44)$$

comme noté par Bodin et Sambridge 2009. Ainsi, le coût associé à ce prior sur une partition de frontières $(\lambda_0, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}})$ s'écrit

$$\mathcal{J}_{\text{prior}}(\lambda_0, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}}) = \ln(N_{b,\text{max}}) + \ln(N_{b,\text{max}}!) - \ln((N_{\text{imp}} - 1)! (N_{b,\text{max}} - N_{\text{imp}} + 1)!), \quad (6.45)$$

et donc, puisque $N_{b,\text{max}}$ est une constante de normalisation :

$$\mathcal{J}_{\text{prior}}(\lambda_0, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}}) = -\ln((N_{\text{imp}} - 1)!) - \ln((N_{b,\text{max}} - N_{\text{imp}} + 1)!). \quad (6.46)$$

A partir de cette équation, on peut tracer en figure 6.8 le coût du prior sur une partition de frontières en fonction de sa taille, et en prenant par exemple $N_{b,\text{max}} = 312$.

On observe ainsi que les modèles privilégiés sont les modèles de basse ou de très haute complexité, devant les modèles de complexité moyenne. Cela revient à imposer un prior qui favorise les modèles trop peu ou trop complexes en comparaison aux modèles moyennement complexes. Ce prior supposément uniforme est en fait

- pour la première partie une sorte de prior gaussien,
- et pour la seconde partie (la décroissance à partir d'un nombre d'impulsions égal à $N_{b,\text{max}}/2$), un prior qui favorise les modèles plus complexes (ce qui revient à contredire le principe du rasoir d'Ockham).

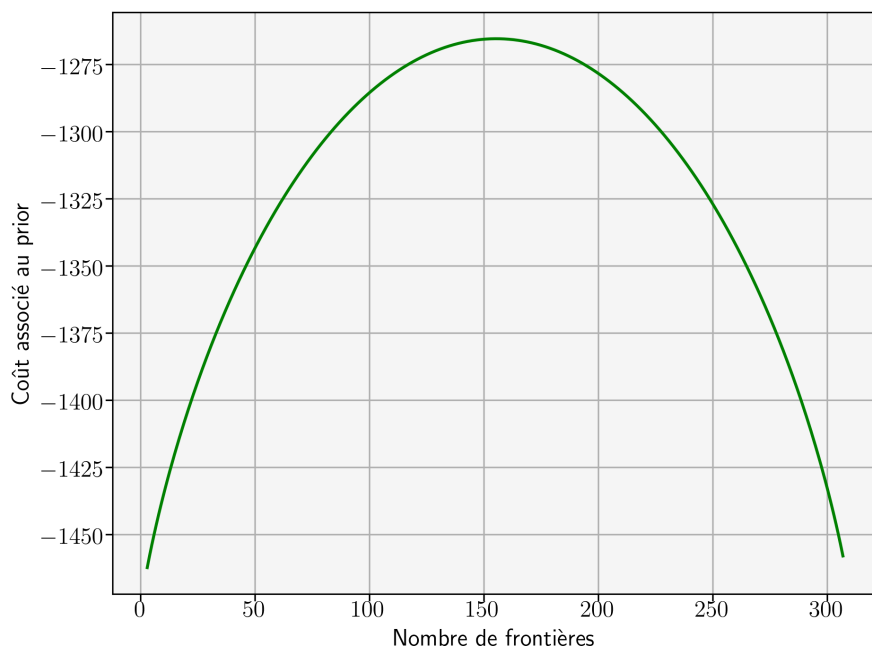


Figure 6.8 – Coût du prior sur une partition de frontières selon sa taille pour $N_{b,\max} = 312$. Les nombres de frontières favorisés sont ceux associés à un moindre coût. Ainsi, les modèles à faible nombre de frontières et ceux à grand nombre de frontières sont favorisés devant ceux à nombre de frontières moyen.

6.1.6.2 Prior uniforme sur l'ensemble des partitions

Dans cette section, nous proposons un prior uniforme sur l'ensemble des partitions possibles de frontières. On peut en effet considérer l'ensemble des partitions possibles de frontières $\{\Lambda_0, \dots, \Lambda_{N_p}\}$ de taille $N_p + 1$ et imposer un prior sur le choix de la partition parmi cet ensemble discret :

$$p(\Lambda_k) = p(\lambda_0, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}}) = \begin{cases} \frac{1}{N_p + 1}, & \text{si } k \in [0, N_p]; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.47)$$

Et donc :

$$\mathcal{J}_{\text{prior}}(\Lambda_k) = \ln(N_p + 1), \quad (6.48)$$

qui disparaît en tant que constante de normalisation. En effet, N_p est uniquement une fonction de $N_{b, \text{max}}$ la taille maximum d'une partition.

6.1.6.3 Prior exponentiel

On peut aussi imposer un prior de type exponentiel sur l'ensemble des partitions en suivant le même principe que pour le prior uniforme de la section 6.1.6.2 précédente. C'est-à-dire, on peut imposer un prior à l'ensemble des partitions de frontières sans s'intéresser à leur taille.

L'idée est de pénaliser les partitions qui possèdent trop de frontières, sans passer par la hiérarchisation

$$p(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1}) = p(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1} | N_{\text{imp}} - 1) p(N_{\text{imp}} - 1). \quad (6.49)$$

On souhaite imposer un prior du type :

$$p(\lambda_1, \dots, \lambda_k) = \lambda e^{-\lambda k}, \quad (6.50)$$

où l'on choisira $\lambda = 1$ pour simplifier. Autrement dit, le coût d'une partition à k frontières est k . C'est un prior qui permet de pénaliser les partitions à trop grand nombre de frontières.

Ce prior est une distribution discrète sur l'ensemble des partitions que l'on peut normaliser. En effet, avec N_p le nombre total de partitions, et $N_{b, \text{max}}$ le nombre de frontières maximum :

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N_p} p(\Lambda_j) &= 1 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_{b, \text{max}}} \sum_{k=1}^{\binom{N_{b, \text{max}}}{i}} p(\Lambda_{k,i}) &= 1 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_{b, \text{max}}} \sum_{k=1}^{\binom{N_{b, \text{max}}}{i}} \frac{e^{-i}}{Z} &= 1 \end{aligned} \quad (6.51)$$

avec le cardinal de l'ensemble des partitions de taille i étant égal à $\binom{N_{b,\max}}{i}$, et Z une constante à déterminer. Cela donne :

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^{N_{b,\max}} \binom{N_{b,\max}}{i} e^{-i} &= 1 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_{b,\max}} \binom{N_{b,\max}}{i} e^{-i} &= Z \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_{b,\max}} \frac{N_{b,\max}!}{i!(N_{b,\max} - i)!} e^{-i} &= Z. \end{aligned} \tag{6.52}$$

Cela nous permet de définir le prior dit exponentiel :

$$p(\lambda_1, \dots, \lambda_k) = \begin{cases} \frac{e^{-k}}{Z}, & \text{si } k \in [1, N_{b,\max}]; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \tag{6.53}$$

On peut noter que le prior sur les logarithmes des débits de rejet aura aussi un effet contraignant sur la complexité des modèles. Si on choisit un prior uniforme sur l'ensemble des partitions, il n'y a plus que le prior sur les logarithmes de rejets qui s'assure que le modèle ne devienne pas trop complexe.

6.1.6.4 Discussion autour de la légitimité des priors

On souhaiterait que le nombre de frontières soit seulement établi par la résolution du dilemme biais-variance, c'est-à-dire, par le problème de l'arbitrage décrit en section 6.1.1.3. Si l'on impose un autre prior qu'un prior non-informatif sur l'ensemble des partitions, on empêche le modèle de résoudre cet arbitrage naturellement. Il peut alors sembler judicieux de s'en tenir à des priors non-informatifs.

Nous verrons dans l'application de nos méthodes sur l'évènement de Fukushima-Daiichi en section 6.3 que l'arbitrage fait par le formalisme bayésien avec un prior uniforme n'est pas approprié. Un prior exponentiel informatif sur les logarithmes des débits de rejet sera utilisé et résoudra le dilemme biais-variance adéquatement, au vu des informations dont nous disposons.

6.1.7 Description de la probabilité de transition

Dans cette partie, nous déterminons les distributions de probabilité de proposition liées aux nouveaux types de transitions introduits dans ce chapitre, c'est-à-dire les déplacements, naissances, et morts.

6.1.7.1 Distribution de probabilité de transition du déplacement

Le processus de déplacement est intra-dimensionnel. Sous réserve que le déplacement soit un mouvement symétrique, la distribution de transition g associée est symétrique,

c'est-à-dire :

$$\frac{g(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j)}{g(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i)} = 1. \quad (6.54)$$

6.1.7.2 Distribution de probabilité de transition de la naissance

Pendant l'étape de naissance décrite en section 6.1.3.4 : une nouvelle frontière est engendrée, et nous passons de \mathbf{x}_i un vecteur composé de n frontières à \mathbf{x}_j un vecteur composé de $n + 1$ frontières.

Plus précisément, en engendrant une nouvelle frontière, une impulsion est détruite et deux nouvelles impulsions émergent à partir de cette destruction. On assigne deux nouveaux débits de rejet $\ln q'_{k-1} = \ln q_{k-1} - u_{\ln q}$ et $\ln q'_k = \ln q_{k-1} + u_{\ln q}$ avec $u_{\ln q}$ un bruit gaussien. La probabilité de transition est définie de la manière suivante :

$$\begin{aligned} g(\Lambda_i, \ln \mathbf{q}_i | \Lambda_j, \ln \mathbf{q}_j) &= g(\Lambda_i | \Lambda_j, \ln \mathbf{q}_j) g(\ln \mathbf{q}_i | \Lambda_i, \Lambda_j, \ln \mathbf{q}_j) \\ &= g(\Lambda_i | \Lambda_j) g(\ln \mathbf{q}_i | \ln \mathbf{q}_j, \Lambda_i) \end{aligned} \quad (6.55)$$

Ici, $\ln \mathbf{q}_i$ engendrée ne dépend que de $\ln \mathbf{q}_j$ à l'état précédent, et de la partition de frontières courante. On considère que l'amplitude des nouveaux débits de rejet est engendrée indépendamment de l'engendrement de la nouvelle frontière. Les deux parties de la transition sont séparées (Bodin et Sambridge 2009). Autrement dit, l'information de l'engendrement de la frontière est contenue dans $g(\Lambda_i | \Lambda_j)$ tandis que l'information de l'engendrement de l'amplitude est contenue dans $g(\ln \mathbf{q}_i | \ln \mathbf{q}_j, \Lambda_i)$.

On peut donc décrire séparément ces deux distributions. La probabilité d'une naissance à une certaine position parmi $N_{b,\max} - N_{\text{imp}} + 1$ position non occupées par des frontières est :

$$g(\Lambda_i | \Lambda_j) = \frac{1}{N_{b,\max} - N_{\text{imp}} + 1}. \quad (6.56)$$

Par ailleurs, la probabilité d'engendrement des nouveaux débits de rejet est gaussienne :

$$\begin{aligned} g(\ln \mathbf{q}_i | \Lambda_i, \ln \mathbf{q}_j) &= g(\ln q'_{k-1}, \ln q'_k | \ln q_{k-1}, u_{\ln q}) \\ &= p_{u_{\ln q} \sim \mathcal{N}(0, \sigma)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{u_{\ln q}^2}{2\sigma^2}}. \end{aligned} \quad (6.57)$$

où la nouvelle frontière est ici engendrée au niveau de l'impulsion $k - 1$.

6.1.7.3 Distribution de probabilité de transition de la mort

La probabilité de mort d'une parmi $N_{\text{imp}} - 1$ frontières intérieures est :

$$g(\Lambda_j | \Lambda_i) = \frac{1}{N_{\text{imp}} - 1} \quad (6.58)$$

c'est-à-dire un choix uniforme parmi $N_{\text{imp}} - 1$ possibilités.

D'autre part, la probabilité $g(\ln \mathbf{q}_j | \Lambda_j, \Lambda_i, \ln \mathbf{q}_i)$ de détruire le rejet associé à cette position est de 1, puisque la mort de la frontière implique automatiquement la mort d'un des rejets associés.

6.1.8 Symétrisation des probabilités de transition dans le taux d'acceptation

Dans cette section, nous décrivons dans le cadre d'un saut transdimensionnel la quantité de symétrisation des probabilités de transition

$$\frac{g(\Lambda_i, \ln \mathbf{q}_i | \mathbf{x}_j)}{g(\Lambda_j, \ln \mathbf{q}_j | \mathbf{x}_i)} \quad (6.59)$$

que l'on retrouve dans la définition du taux d'acceptation de l'équation (6.15) de l'algorithme du RJ-MCMC décrit en section 6.1.2. On ne tient compte que de la variable logarithmes des débits de rejet, le reste des variables n'étant pas affectées par une transition transdimensionnelle.

Pour un processus de naissance :

$$\begin{aligned} \frac{g(\Lambda_i, \ln \mathbf{q}_i | \mathbf{x}_j)}{g(\Lambda_j, \ln \mathbf{q}_j | \mathbf{x}_i)} &= \frac{g(\Lambda_i | \Lambda_j) g(\ln \mathbf{q}_i | \Lambda_i, \ln \mathbf{q}_j)}{g(\Lambda_j | \Lambda_i) g(\ln \mathbf{q}_j | \Lambda_j, \ln \mathbf{q}_i)} \\ &= \frac{\frac{1}{N_{\text{imp}} - 1}}{\frac{1}{N_{b, \text{max}} - N_{\text{imp}} + 1}} \frac{1}{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{u_{\ln q}^2}{2\sigma^2}}} \\ &= \frac{N_{b, \text{max}} - N_{\text{imp}} + 1}{N_{\text{imp}} - 1} \sqrt{2\pi\sigma} e^{\frac{u_{\ln q}^2}{2\sigma^2}}. \end{aligned} \quad (6.60)$$

Pour un processus de mort :

$$\frac{g(\Lambda_j, \ln \mathbf{q}_j | \mathbf{x}_i)}{g(\Lambda_i, \ln \mathbf{q}_i | \mathbf{x}_j)} = \frac{N_{\text{imp}} - 1}{N_{b, \text{max}} - N_{\text{imp}} + 1} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{u_{\ln q}^2}{2\sigma^2}} \quad (6.61)$$

ce qui est logiquement l'inverse de la symétrisation écrite dans le cas du processus de naissance.

6.1.9 Calcul du jacobien

Dans cette section, nous calculons la valeur absolue du jacobien de la fonction de passage. Cette quantité est présente dans la définition du taux d'acceptation (6.15) lié à un changement de modèle. Pour calculer cette quantité, il est nécessaire d'avoir une matrice carrée, donc un nombre de variables égal au départ et à l'arrivée, c'est-à-dire avant et après les différents processus.

Pour des processus intra-dimensionnels comme le déplacement d'une frontière, le jacobien est constant et égal à 1.

Pour la naissance d'une frontière λ'_k , la transformation bijective $g_{i,j}$ utilisée pour passer de \mathbf{x}_i à \mathbf{x}_j s'écrit

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i &= (\Lambda_i, \ln \mathbf{q}_i, u_c, u_{\ln q}) \leftrightarrow (\Lambda_i, \lambda'_k, \ln \mathbf{q}_j) = \mathbf{x}_j \\ (\lambda_0, \dots, \lambda_n, \ln q_0, \dots, \ln q_k, \dots, u_c, u_{\ln q}) &\leftrightarrow (\lambda_0, \dots, \lambda'_k, \dots, \lambda_n, \ln q_0, \dots, \ln q_k - u_{\ln q}, \ln q_k + u_{\ln q}, \dots) \end{aligned} \quad (6.62)$$

où $n + 1$ est le nombre de frontières de l'état \mathbf{x}_i . La variable aléatoire u_c correspond au tirage aléatoire d'une nouvelle frontière λ'_k à partir d'une distribution discrète uniforme définie sur les entiers $[0, 1, \dots, N_{b,\max} - N_{\text{imp}} + 1]$. Elle est donc univariée. $u_{\ln q}$ est le bruit associé à la création de deux nouveaux débits de rejet (et à la destruction d'un) et est aussi une variable univariée.

On a alors :

$$\dim(\Lambda_i) + \dim(\mathbf{q}_i) + \dim(u_c) + \dim(u_{\ln q}) = n + n + 1 + 1; \quad (6.63)$$

$$\dim(\Lambda_i) + \dim(\lambda'_k) + \dim(\ln \mathbf{q}_j) = n + 1 + (n + 1). \quad (6.64)$$

Le nombre de variables de $g_{i,j}$ est égal au départ et à l'arrivée.

Il convient de noter que notre espace d'états est divisé en un espace discret (position des frontières) et un espace continu (logarithmes des débits de rejet). u_c est une variable discrète utilisée pour la transformation entre les espaces discrets, et $u_{\ln q}$ est une variable continue utilisée pour la transformation entre les espaces continus. Le jacobien est toujours l'unité pour les transformations discrètes. Par conséquent, le jacobien ne tient en fait réellement compte que de la variation des variables suivantes :

$$\begin{aligned} (\ln \mathbf{q}_i, u_{\ln q}) &\leftrightarrow \ln \mathbf{q}_j \\ (\ln q_0, \dots, \ln q_k, \dots, \ln q_n, u_{\ln q}) &\leftrightarrow (\ln q_0, \dots, \ln q_k - u_{\ln q}, \ln q_k + u_{\ln q}, \dots, \ln q_n). \end{aligned} \quad (6.65)$$

On a par conséquent deux nouvelles variables créées à partir de deux anciennes variables :

$$\ln q'_{k-1} = \ln q_k - u_{\ln q} = f_1(\ln q_k, u_{\ln q}); \quad (6.66a)$$

$$\ln q'_k = \ln q_k + u_{\ln q} = f_2(\ln q_k, u_{\ln q}). \quad (6.66b)$$

On peut alors calculer le jacobien de cette transformation :

$$\begin{aligned} |\mathbf{J}|_{\text{naissance}} &= \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial f_1(\ln q_k, u_{\ln q})}{\partial \ln q_k} & \frac{\partial f_1(\ln q_k, u_{\ln q})}{\partial u_{\ln q}} \\ \frac{\partial f_2(\ln q_k, u_{\ln q})}{\partial \ln q_k} & \frac{\partial f_2(\ln q_k, u_{\ln q})}{\partial u_{\ln q}} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial(\ln q_k - u_{\ln q})}{\partial \ln q_k} & \frac{\partial(\ln q_k - u_{\ln q})}{\partial u_{\ln q}} \\ \frac{\partial(\ln q_k + u_{\ln q})}{\partial \ln q_k} & \frac{\partial(\ln q_k + u_{\ln q})}{\partial u_{\ln q}} \end{array} \right| \\ &= \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 2. \end{aligned} \quad (6.67)$$

Le processus de mort est alors l'inverse de cette transition, c'est-à-dire,

$$(\ln q_k, u_{\ln q}) = \left(\frac{\ln q'_k + \ln q'_{k-1}}{2}, \frac{\ln q'_k - \ln q'_{k-1}}{2} \right). \quad (6.68)$$

Le jacobien est l'inverse du jacobien précédemment obtenu (Bodin et Sambridge 2009), c'est-à-dire,

$$|\mathbf{J}|_{\text{mort}} = 1/2. \quad (6.69)$$

6.1.10 Résumé des taux d'acceptation

Dans cette partie, nous décrivons pour chaque processus de marche aléatoire unidimensionnel ou transdimensionnel, le coût associé au taux d'acceptation de cette marche aléatoire. La formule générale s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(i, j) &= -\ln \alpha_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j) \\ &= -\ln (p(\mathbf{x}_j)p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j)g(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j)) + \ln (p(\mathbf{x}_i)p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i)g(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i)) - \ln |\mathbf{J}| \\ &= \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_j) + \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_i) - \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i) \\ &\quad + \mathcal{J}_{\text{transition}}(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{transition}}(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i) - \ln |\mathbf{J}|. \end{aligned} \quad (6.70)$$

Nous rappelons que le coût lié au taux d'acceptation est la quantité effectivement calculée dans l'algorithme.

Taux d'acceptation d'un déplacement intra-modèle

En l'absence de changement de modèle $\Lambda_i = \Lambda_j$, c'est-à-dire, dans le cas d'une transition classique de Metropolis-Hastings, le coût d'un déplacement $i \rightarrow j$ est simplement la différence entre la somme du prior et de la vraisemblance sur la source \mathbf{x}_j avec la somme du prior et de la vraisemblance sur la source \mathbf{x}_i .

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(i, j) &= + \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_j) + \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j) \\ &\quad - \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_i) - \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i) \end{aligned} \quad (6.71)$$

Dans le cas d'un déplacement intra-modèle : la matrice jacobienne est égale à 1, et les transitions sont réversibles. De plus, $\Lambda_i = \Lambda_j$ donc $\mathcal{J}_{\text{prior}}(\Lambda_j) = \mathcal{J}_{\text{prior}}(\Lambda_i)$.

Taux d'acceptation d'un déplacement intra-dimensionnel

Le taux d'acceptation du processus de déplacement de frontière correspond à celui du déplacement intra-modèle. En effet, d'une part nos transitions sont réversibles. D'autre part, nos priors sur les partitions de frontières ne pénalisent qu'en fonction du nombre de frontières. Or, lors du déplacement de frontière intra-dimensionnel $\Lambda_i \rightarrow \Lambda_j$: $\dim(\Lambda_i) = \dim(\Lambda_j)$ et donc $\mathcal{J}_{\text{prior}}(\Lambda_i) = \mathcal{J}_{\text{prior}}(\Lambda_j)$.

Taux d'acceptation d'une naissance

Le taux d'acceptation d'une naissance dépend de la différence des vraisemblances, des priors, de la symétrisation des termes de transition, et du jacobien.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}(i, j) &= + \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_j) + \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_i) - \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i) \\
 &\quad + \mathcal{J}_{\text{transition}}(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{transition}}(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i) - \ln |2| \\
 &= + \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_j) + \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_i) - \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i) \quad (6.72) \\
 &\quad - \ln \left(\frac{N_{b,\max} - N_{\text{imp}} + 1}{N_{\text{imp}} - 1} \right) - \frac{1}{2} \ln(2\pi) - \ln \sigma - \frac{u_{\ln q}^2}{2\sigma^2} - \ln |2|.
 \end{aligned}$$

Taux d'acceptation d'une mort

Le taux d'acceptation d'une mort dépend de la différence des vraisemblances, des priors, de la symétrisation des termes de transition, et du jacobien.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}(i, j) &= + \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_j) + \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_i) - \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i) \\
 &\quad + \mathcal{J}_{\text{transition}}(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{transition}}(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i) + \ln |2| \\
 &= + \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_j) + \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_j) - \mathcal{J}_{\text{prior}}(\mathbf{x}_i) - \mathcal{J}_{\text{vraisemblance}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i) \quad (6.73) \\
 &\quad - \ln \left(\frac{N_{\text{imp}} - 1}{N_{b,\max} - N_{\text{imp}} + 1} \right) + \frac{1}{2} \ln(2\pi) + \ln(\sigma) + \frac{u_{\ln q}^2}{2\sigma^2} + \ln |2|.
 \end{aligned}$$

6.2 Mélange de mesures

Dans cette courte section, nous introduisons une méthode pour prendre en compte différents types de données dans la résolution du problème inverse bayésien. Dans des évènements de rejet de radionucléides, il est en effet courant d'avoir accès à plusieurs types de mesures. Celles-ci ont été introduits dans le chapitre 2 en section 2.1.2. Trois types de mesures peuvent généralement être disponibles : des mesures d'activité volumique, des mesures de dépôt au sol, et des débits de dose.

Il est souhaitable d'être capable d'assimiler et de prendre en compte dans le cadre bayésien plusieurs types de mesures car :

- toute nouvelle mesure est une information supplémentaire, et plus nous disposons d'information, plus les incertitudes sont faibles ;
- certains types d'observation comme les mesures cumulées que sont les mesures de dépôt donnent une information incomplète. En effet, le dépôt total étant une somme des dépôts successifs, seule une information de l'amplitude est disponible : l'information sur les moments des dépôts n'est pas disponible. Ainsi, des mesures diversifiées peuvent éventuellement apporter des informations complémentaires, ou au moins renforcer des connaissances.

Plusieurs problèmes apparaissent lors de l'intégration de méthodes de mélange de mesures :

- les mesures sont souvent d'ordres de grandeur très différents. Ce sujet est en fait déjà traité dans le chapitre 5 :
 - non seulement, des vraisemblances qui quantifient une différence relative entre les observations et les prédictions associées peuvent être utilisées, comme présenté dans la section 5.1 du chapitre 5 ;
 - mais aussi, différentes variances d'erreur d'observation peuvent être utilisées pour les différents types de mesures. C'est très cohérent avec le fait que l'on s'attend à détecter des écarts significativement différents entre les activités volumiques et leurs prédictions associées, et les dépôts et leurs prédictions associées.
- par ailleurs, les mesures peuvent être redondantes. Ceci est un faux problème car, sous l'hypothèse d'indépendance des observations, qui est en général une hypothèse acceptable (Y. Liu et al. 2017), la redondance ne fragilise pas nos distributions a posteriori et apporte bien de l'information supplémentaire qui doit être prise en compte.

Dans l'application de ce chapitre à la section 6.3, on utilisera des mesures de dépôt ainsi que des mesures d'activité volumique dans l'air. Pour modéliser \mathbf{R} dans ce cas, on utilise

deux variances : r_c la variance des mesures d'activité volumique, et r_d la variance des mesures de dépôt. Cela donne :

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_c & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & r_c & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & r_c & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & r_d & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & r_d \end{bmatrix}. \quad (6.74)$$

Par ailleurs, la matrice \mathbf{R} est mise à jour un peu différemment selon les algorithmes appliqués :

- si l'algorithme de tri des observations pertinentes et non-pertinentes est utilisé, alors il semble n'y avoir aucune raison de ne pas l'appliquer à la fois sur les mesures d'activité volumique et les mesures de dépôt. De fait, puisque la variance r_{np} définie en section 5.2.2.2 du chapitre 5 est construite de telle manière qu'elle tende vers 0 quelle que soit la nature de la mesure utilisée, alors on peut se contenter d'une seule variance r_{np} , et pour les mesures de dépôt, et pour les mesures d'activité volumiques :

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_c & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & r_c & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & r_d & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & r_{np} \end{bmatrix}; \quad (6.75)$$

- si un algorithme de regroupement spatial comme décrit dans la section 5.2.4 du chapitre 5 est appliqué, il faut nécessairement choisir sur quel type d'observation on applique l'algorithme (ou choisir les deux types d'observations, mais appliquer l'algorithme indépendamment deux fois). Nous ne pouvons regrouper des observations de natures différentes entre elles.

6.3 Reconstruction du terme source de ^{137}Cs rejeté lors de l'accident de Fukushima-Daiichi

Dans cette partie, nous appliquons la méthode d'échantillonnage transdimensionnel décrite dans ce chapitre à la reconstruction des rejets de ^{137}Cs pendant l'accident de Fukushima-Daiichi. Plus précisément :

- dans une première section 6.3.1, une description du contexte de l'accident de Fukushima-Daiichi, des travaux passés, et du jeu de données sont fournis ;
- ensuite, nous décrivons la paramétrisation du modèle physique et des chaînes de Markov utilisées pour l'échantillonnage en section 6.3.2 ;
- enfin, le terme source de ^{137}Cs est reconstruit en section 6.3.3.

6.3.1 Description du rejet de ^{137}Cs de l'accident de Fukushima-Daiichi

Dans cette partie, nous commençons par décrire le contexte de l'accident de Fukushima-Daiichi dans la partie 6.3.1.1. Ensuite, une description des travaux réalisés sur l'évaluation des rejets est proposée dans le point 6.3.1.2. Finalement, le jeu de données que nous utilisons est présenté en partie 6.3.1.3.

6.3.1.1 Contexte

Le 11 mars 2011, un tremblement de terre sous l'océan Pacifique au large du Japon est à l'origine d'un tsunami extrêmement destructeur qui frappe les côtes japonaises environ une heure plus tard et cause la mort de 18 000 personnes. Ces événements entraînent l'arrêt automatique de quatre centrales nucléaires japonaises.

À la centrale nucléaire de Fukushima-Daiichi, dans les heures qui suivent, la situation devient rapidement critique. Le tsunami consécutif au séisme met hors service le système de refroidissement principal des réacteurs ainsi que les alimentations électriques de secours de la centrale. Cela a deux conséquences (IRSN 2012) :

- le combustible nucléaire se dégrade ce qui entraîne la fusion des cœurs des réacteurs 1,2, et 3, suivie de décompressions des enceintes de confinement et d'explosions d'hydrogène ;
- faute d'alimentation électrique, les piscines de désactivation des réacteurs 1 à 4 dans lesquelles le combustible usé est entreposé montent en température au fur et à mesure que le niveau d'eau dans les piscines baisse. Ceci entraîne des incendies et de nouveaux rejets de produits radioactifs.

L'accident de la centrale de Fukushima-Daiichi est la seconde plus importante catastrophe nucléaire de l'histoire, classée au niveau 7. Les impacts de l'accident, tout aussi bien environnementaux que sanitaires, sont majeurs. Les populations locales ont été affectées, ainsi que l'approvisionnement électrique. Néanmoins, il n'a pas été démontré de décès provoqués par les rejets radioactifs issus de l'accident (UNSCEAR 2013).

Nous avons décidé de travailler sur cet évènement pour deux raisons :

- les différentes conséquences des rejets continuent d'être étudiées et discutées en 2020, et l'amélioration de l'évaluation du terme source reste un enjeu majeur ;
- ce rejet massif et complexe de radionucléides est un cas très intéressant sur lequel appliquer et évaluer nos méthodes. L'accident de Fukushima-Daiichi est en effet caractérisé par plusieurs épisodes de rejets d'intensités variables, et a duré plusieurs semaines. Reconstruire l'évolution temporelle du débit de rejet de ^{137}Cs signifie donc retrouver un débit de rejet très variable évoluant sur plusieurs centaines d'heures. L'intérêt majeur du RJ-MCMC est son aptitude à reconstruire un rejet très variable en minimisant les erreurs de biais et de variance. Ceci en fait un algorithme tout à fait adapté dans cette situation.

6.3.1.2 Travaux passés

Depuis 2011, plusieurs approches ont été considérées pour évaluer les rejets de radionucléides liés à l'accident de Fukushima-Daiichi.

En premier lieu, des méthodes directes basées sur la simple comparaison entre les observations et les prédictions simulées ont été utilisées (Chino et al. 2011 ; Katata et al. 2012 ; Mathieu et al. 2012 ; Terada et al. 2012 ; Hirao et al. 2013 ; Kobayashi et al. 2013 ; Katata et al. 2015). Nommément :

- Chino et al. 2011 considèrent chaque station de mesure indépendamment des autres. Sur une base empirique, les émissions qui peuvent expliquer les observations à chaque station sont estimées. La somme de toutes les émissions constitue le terme source. L'inconvénient de cette approche résulte de la non prise en compte des erreurs liées au vecteur d'observations et à la modélisation de la dispersion et de la météorologie ;
- Mathieu et al. 2012 utilisent une méthode basée sur la correction des simulations du modèle direct à l'aide des observations pour estimer les termes sources des différents radionucléides en utilisant divers types de données (informations sur les installations et mesures sur site).

Dans un second temps, des méthodes de modélisation inverse plus ambitieuses ont été développées (Stohl et al. 2012 ; Winiarek et al. 2012 ; Saunier et al. 2013 ; Winiarek et al. 2014 ; Yumimoto et al. 2016). En particulier :

- Winiarek et al. 2012, 2014 utilisent des mesures d'activité et des mesures de dépôt pour estimer le terme source de ^{137}Cs en estimant rigoureusement les erreurs des différents jeux de données et de l'ébauche ;
- Stohl et al. 2012 estiment les termes sources de ^{137}Cs et de ^{133}Xe par modélisation inverse en utilisant des mesures d'activité dans l'air et des mesures de dépôt dans tout l'hémisphère nord. Leur estimation est néanmoins fortement dépendante de leur ébauche ;
- Saunier et al. 2013 évaluent le terme source par modélisation inverse avec des mesures de dose équivalente de rayonnement gamma. Les mesures de dose équivalente de rayonnement gamma sont généralement abondantes et bien distribuées. Cependant, elles rendent compte de l'influence de plusieurs radionucléides contenus dans le panache et déposés sur le sol, ce qui rend leur assimilation plus délicate.

Enfin, récemment, des méthodes de modélisation inverse basées sur un formalisme bayésien ont été utilisées. Y. Liu et al. 2017 appliquent plusieurs méthodes dont un algorithme MCMC pour estimer l'évolution temporelle du rejet de ^{137}Cs , accompagnées d'une estimation objective de l'incertitude associée.

6.3.1.3 Jeu de données

Dans cette partie, nous décrivons le vecteur d'observations que nous utilisons dans les applications de ce chapitre. La figure 6.9 décrit les positions spatiales du jeu de données d'activité volumique utilisé dans les sections 6.3.3.1 et 6.3.3.2.

Le vecteur de mesures d'activité volumique de ^{137}Cs est constitué de $N_{\text{obs}} = 14248$ mesures liées à 105 stations. C'est un nombre très important d'observations, qui nous permet d'évaluer la pertinence de nos méthodes et de reconstruire précisément les incertitudes du problème. De plus, la majorité de ces observations sont horaires, ce qui peut permettre une reconstruction fine du terme source de ^{137}Cs .

D'autre part, nous utilisons dans la section 6.3.3.2 des mesures de dépôt décrites par Winiarek et al. 2014. Au total, 1507 mesures de dépôt sont utilisées. Elles correspondent à des positions situées à moins de 300km de la centrale nucléaire de Fukushima-Daiichi. Ces mesures représentent les moyennes de chaque maille d'un champ d'observations de dépôt en Bq.m^{-2} mesurées depuis un vol aérien.

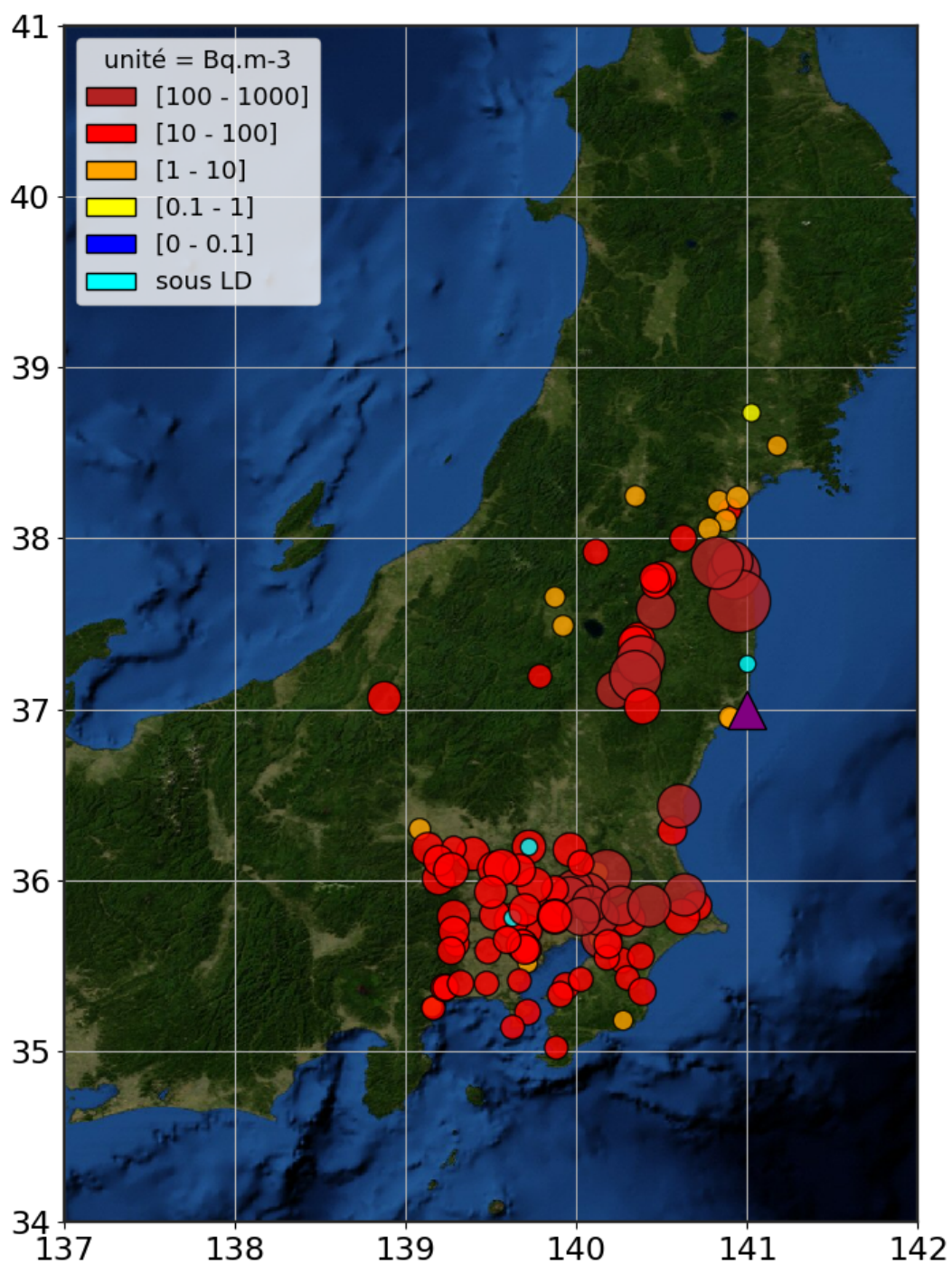


Figure 6.9 – Activités volumiques maximales de ^{137}Cs en $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$ mesurées au Japon en Mars 2011. Les points bleu clair correspondent à des concentrations inférieures à la limite de détection.

6.3.2 Paramétrisation

La dispersion atmosphérique des rejets de ^{137}Cs est simulée à l'aide du modèle eulérien IdX décrit dans le chapitre 1. Pour réaliser les simulations, nous utilisons des données météorologiques provenant d'ECWMF.

	ECMWF
Résolution horizontale	$0.125^\circ \times 0.125^\circ$
Résolution verticale	11 couches réparties de 0 à 4400m
Résolution temporelle	3 heures
Mélange vertical	Diffusion suivant la paramétrisation de Louis (Louis 1979) et (Troen et Mahrt 1986) en conditions instables dans la couche limite
Mélange horizontal	Coefficient de diffusion des tourbillons horizontaux nul $\lambda = \Lambda_0 p_0$ (below-cloud) où $\Lambda_0 = 5.10^{-5} \text{h.}(\text{mm.s})^{-1}$,
Lessivage	et $\lambda = \Lambda_1 p_0^{0.64}$ (in-cloud) où $\Lambda_1 = 5.10^{-4} \text{h.}(\text{mm.s})^{-1}$; et p_0 est l'intensité des précipitations (Baklanov et Sørensen 2001)
Dépôt sec	Vitesse de dépôt sec $v_d = 1.10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$

Table 6.1 – Principales caractéristiques de configuration des simulations de rejet de ^{137}Cs de la centrale nucléaire Fukushima-Daiichi.

Les radionucléides, et en particulier le ^{137}Cs , ont été principalement déposés dans la préfecture de Fukushima, au nord-ouest de la centrale nucléaire de Fukushima-Daiichi. La majeure partie des rejets se sont produits sur une période de deux semaines à partir du 11 mars.

De fait, les simulations du modèle commencent le 11 mars 2011 à 00.00 UTC et se terminent le 24 mars 2011, ce qui correspond à 312 impulsions horaires minimales. Le rejet est modélisé comme dilué sur les trois premiers niveaux verticaux du modèle. La hauteur de rejet a un impact faible car les prédictions du modèle sont comparées à des observations suffisamment éloignées de la centrale de Fukushima-Daiichi (Girard et al. 2014).

On suppose que tous les paramètres décrivant la source (composition des nucléides, hauteur du rejet, coordonnées du rejet) sont connus, à l'exception du terme source \mathbf{q} .

6.3.2.1 Choix des priors

Un prior exponentiel est appliqué sur les partitions de frontières pour augmenter la contrainte sur le nombre de frontières. Nous expliquons dans la section 6.3.3 pourquoi nous ne pouvons nous contenter d'un prior uniforme.

Un prior gaussien est appliqué aux logarithmes des débits de rejet pour à la fois

- contraindre le nombre de frontières,

- et contraindre l’ampleur des débits de rejet.

Nous choisissons d’imposer une ébauche $\ln q_b = 0$, afin de régulariser les impulsions non contraintes par les observations. La matrice de variance d’ébauche \mathbf{B} est définie à l’aide de deux hyperparamètres b_c et b_{nc} comme décrit en section 6.1.5.3. Sur les 312 impulsions minimales, les impulsions non-contraintes sont

- les 17 premières heures du 11 mars (impulsions 0 à 16) ;
- les journées du 16 et du 17 mars (impulsions 116 à 165) ;
- les 18 dernières heures du 23 mars (impulsions 294 à 311).

Par ailleurs, parce qu’aucune information a priori n’est disponible, les priors sur les coefficients de la matrice de covariance d’erreur d’observation sont supposés uniformes et le prior sur la variance de l’erreur d’ébauche est supposé de Jeffreys.

6.3.2.2 Paramètres de l’algorithme MCMC

L’algorithme appliqué est le Reversible-Jump MCMC et aucune méthode de tempering n’est utilisée. Les deux raisons pour ceci sont :

- l’absence d’importants minima locaux, car la position du rejet est connue, qui retarderaient trop la convergence de la chaîne de Markov ;
- l’incompatibilité pratique entre l’algorithme du parallel tempering et le RJ-MCMC. En effet, nous avons vu dans les sections 6.1.7 et 6.1.8 que les probabilités de transition de naissance ou de mort d’une frontière n’étaient pas symétriques et donc devaient être incluses dans le calcul du taux d’acceptation.

Dans le cadre du RJ-MCMC basé sur le Metropolis-Hastings, nous nous contentons dans nos transitions transdimensionnelles à la naissance ou la mort d’une seule frontière à la fois. Si nous souhaitions intégrer un algorithme du parallel tempering, alors nous ajouterions la possibilité de transitions transdimensionnelles à multiples naissances ou morts de frontières à la fois. En effet, le parallel tempering implique des échanges d’états entre deux chaînes de Markov qui peuvent être totalement différents, i.e., qui peuvent avoir un nombre et une répartition de frontières très différents.

Dans ce cas, pour rendre le processus de marche aléatoire, il faudrait disposer des formules analytiques décrivant les probabilités de marche aléatoire entre tous les types d’états possibles, c’est-à-dire de tout nombre et toute répartition de frontières, ceci pour l’intégrer dans le calcul du taux d’acceptation afin de symétriser le processus. En regard du faible intérêt du parallel tempering dans ce cas d’étude, nous avons choisi de ne pas chercher à retrouver ces formules analytiques.

La vraisemblance est définie comme une loi log-normale de seuil y_t égal à 1 mBq.m^{-3} , ce qui est un choix classique.

Les probabilités de transition utilisées pour la marche aléatoire de la chaîne de Markov sont définies indépendamment pour chaque variable et basées sur la distribution normale repliée telle que décrite par Dumont Le Brazidec et al. 2020 ou dans le chapitre 3 en section 3.3.2.

Les variances des probabilités de transition sont choisies sur la base d'expérimentations et sont fixées à $\sigma_{\ln q} = 0.3$, $\sigma_r = 0.01$. La valeur de la variance σ_r est adaptative et recalculée toutes les 1000 itérations. De plus, la variance de transition σ_r n'est pas uniforme pour les différentes variables qui décrivent la diagonale de \mathbf{R} (elle doit dépendre de la valeur de la variance r associée). On peut noter que puisque chaque variance a un effet de levier sur le taux d'acceptation final, de nombreuses combinaisons de $(\sigma_x, \sigma_q, \sigma_r)$ satisfont ce taux d'acceptation optimal. Le choix ci-dessus a été fait à partir d'expérimentations pour accélérer la convergence (de sorte à se rapprocher du taux d'acceptation théorique optimal évalué à 0.234). Toutes les variables d'intérêt décrivant \mathbf{x} sont toujours initialisées de manière aléatoire.

Pour la première application, en section 6.3.3.1, les mesures d'activité volumique sont divisées en deux groupes spatiaux grâce à un algorithme de k-moyennes :

- un premier groupe correspond aux observations mesurées sur des stations de latitude supérieures à 37°N ,
- et un deuxième groupe correspond aux observations mesurées sur des stations de latitude inférieures à 37°N .

Deux variances d'erreur d'observation (r_1, r_2) sont associées à ces deux groupes et utilisées pour représenter \mathbf{R} la matrice d'échelle, comme décrit en section 5.2.4.

Par ailleurs, l'algorithme de discrimination des observations pertinentes présenté dans la section 5.2 est utilisé dans les deux applications. De plus, nous considérons qu'une concentration et une prédiction correspondante peuvent être considérées comme égales si leur différence est inférieure à $\epsilon_d = 0.1 \text{ Bq.m}^{-3}$. Pour les mesures de dépôt, nous utilisons $\epsilon_d = 0.1 \text{ Bq.m}^{-2}$. Dans les deux applications, un peu moins de la moitié des observations sont considérées non-pertinentes.

L'algorithme fonctionne initialement comme un algorithme MH classique pendant 10^4 itérations. Autrement dit, seules des marches aléatoires classiques intra-modèles sont proposées pendant les 10^4 premières itérations. En effet, nous avons remarqué que les chaînes de Markov pouvaient rester bloquées dans des minima locaux à bas débits de rejet quand des sauts transdimensionnels sont proposés dès le début de la procédure MCMC.

Un nombre de 2×10^6 itérations est utilisé pour l'algorithme du RJ-MCMC. C'est un nombre d'itérations important qui correspond à environ une journée de calcul pour un cluster de douze coeurs, et qui nous assure de la convergence et du bon échantillonnage de l'algorithme. En effet, en l'absence de l'utilisation de l'algorithme du parallel tempering, nous souhaitons nous assurer que nos chaînes de Markov ne restent pas bloquées dans des minima locaux. Le burn-in est égal à 10^6 itérations.

Finalement, il doit être noté que nous avons rencontré un problème de convergence dans le cas où b_{nc} est échantillonné pour lequel nous ne pouvons présenter une explication complètement satisfaisante. Plus précisément, nous avons observé lors des premières applications de l'algorithme du RJ-MCMC que sous la configuration de la matrice \mathbf{B} proposée en section 6.1.5.3, les logarithmes des débits de rejet des impulsions non-contraintes n'étaient pas régularisés correctement avec le prior gaussien.

Pour nous assurer de la régularisation des impulsions non-contraintes, nous considérons donc b_{nc} fixé à 1. Cette hypothèse est pertinente puisque nous souhaitons contraindre les débits de rejet associés à des impulsions minimales non-contraintes à être de très faible amplitude.

6.3.3 Application des méthodes

Dans cette partie, nous appliquons les méthodes décrites dans ce chapitre à la reconstruction du terme source de ^{137}Cs de Fukushima-Daiichi. Plus précisément :

- en section 6.3.3.1, l'algorithme du RJ-MCMC est appliqué à l'aide des observations d'activité volumique à la reconstruction des variables décrivant la source. L'objectif de cette section est d'étudier l'intérêt du Reversible-Jump MCMC, ainsi que de reconstruire le terme source du ^{137}Cs rejeté lors de l'accident de Fukushima-Daiichi.
- en section 6.3.3.2, nous appliquons une deuxième fois l'algorithme du RJ-MCMC, mais avec cette fois-ci deux types d'observations :
 - des mesures d'activité volumique ;
 - des mesures de dépôt.

L'objectif de cette deuxième partie est d'étudier l'apport de l'intégration de mesures de dépôt à la résolution du problème inverse, et la pertinence de notre méthode.

6.3.3.1 Reconstruction des variables avec les mesures d'activité volumique

Dans cette section, nous reconstruisons le terme source de ^{137}Cs rejeté dans l'atmosphère pendant l'accident de Fukushima-Daiichi.

Nous présentons les résultats de l'application de l'algorithme du Reversible-Jump MCMC avec une loi de vraisemblance log-normale de seuil y_t égal à $1 \text{ mBq}\cdot\text{m}^{-3}$. L'objectif de cette section est double. Nous souhaitons à la fois

- proposer une nouvelle estimation du terme source lié aux rejets de ^{137}Cs pendant l'accident de Fukushima-Daiichi. Plus précisément, nous souhaitons proposer une reconstruction des distributions liées aux débits de rejet et aux incertitudes associées ;
- étudier l'intérêt de la méthode du Reversible-Jump MCMC, et son potentiel.

Nous reconstruisons le vecteur

$$\mathbf{x} = \left(\ln \mathbf{q}, r_1, r_2, r_{\text{np}}, b_c, (\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}-1}) \right), \quad (6.76)$$

mais on se permettra dans la suite de cette section de parler d'échantillonnage de débits de rejet (plutôt que logarithmes des débits de rejet) pour faciliter la lecture.

Dans un premier temps, nous présentons sur la figure 6.10 le graphe de l'évolution temporelle du débit de rejet médian avec la variance associée. Plus précisément, la ligne rouge correspond au débit de rejet médian échantillonné et l'aire rouge pâle correspond à la zone comprise entre la moyenne et \pm l'écart-type des échantillons de débits de rejet horaires : $[\mu_{\ln q} - \sigma_{\ln q}, \mu_{\ln q} + \sigma_{\ln q}]$, où la moyenne et l'écart-type sont notés $\mu_{\ln q}$ et $\sigma_{\ln q}$.

Plus précisément, le graphe 6.10 représente l'évolution des échantillons de débits de rejet à chaque impulsion minimale. En effet, le débit de rejet d'une impulsion minimale est bien échantillonné en tant que débit de rejet d'une impulsion qui contient cette impulsion minimale. Autrement dit, à chaque itération du RJ-MCMC, N_{imp} débits de rejet sont échantillonnés et contiennent les 312 débits de rejet des impulsions minimales, c'est-à-dire les 312 débits de rejet horaires. On peut donc, à partir de nos échantillons, reconstruire ce qu'il s'est passé en médiane à chaque heure avec la variance associée.

De plus, l'évolution temporelle du débit de rejet median est comparée à un terme source reconstruit à partir d'une méthode de descente de gradient déterministe (Saunier et al. 2013). Le terme source de Saunier et al. 2013 a été construit à partir de mesures de débit de dose, mais à partir des mêmes données météorologiques et à partir du même modèle de transport.

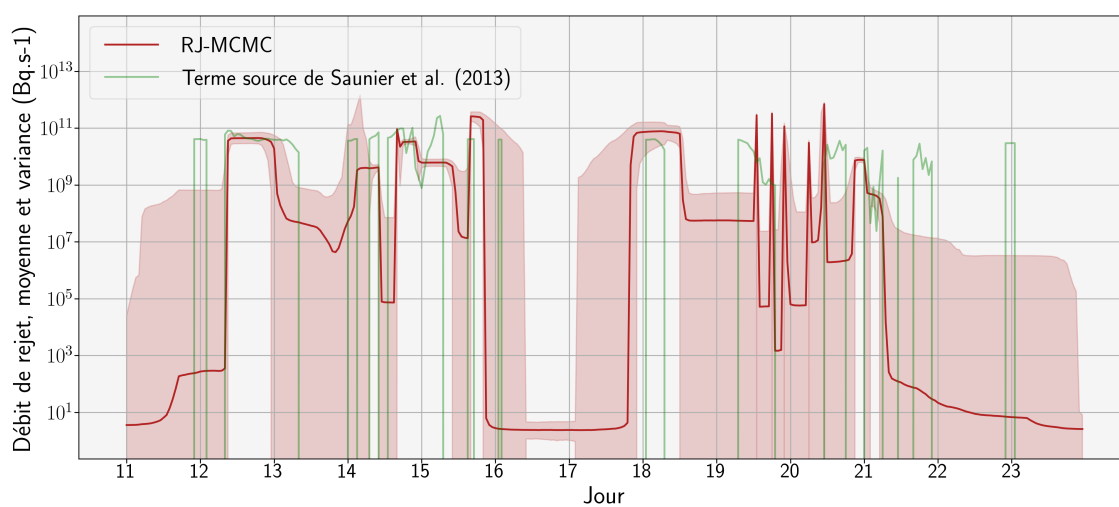


Figure 6.10 – Evolution du débit de rejet en Bq.s^{-1} décrivant la source des rejets de ^{137}Cs échantillonné selon l'algorithme du RJ-MCMC avec les mesures d'activité volumique. La ligne rouge correspond au débit de rejet médian échantillonné. L'aire rouge pâle correspond à la zone comprise entre la moyenne et \pm l'écart-type des échantillons de débits de rejet horaires : $[\mu_{\ln q} - \sigma_{\ln q}, \mu_{\ln q} + \sigma_{\ln q}]$, où la moyenne et l'écart-type sont notés $\mu_{\ln q}$ et $\sigma_{\ln q}$. Comparaison avec le terme source optimal de Saunier et al. 2013 obtenu par des méthodes déterministes.

Plusieurs choses peuvent être considérées :

- premièrement, nous obtenons une bonne correspondance entre notre rejet médian et le rejet optimal de Saumier et al. 2013. C'est d'autant plus notable que le rejet médian n'est pas le rejet optimal, et est un agrégat de plusieurs rejets. Le rejet médian est en effet un vecteur de débits de rejet, où chaque débit de rejet associé à une heure est la médiane des débits de rejet associés à cette même heure sur l'ensemble des échantillons ;
- deuxièmement, on observe que les débits de rejet sont soumis à de larges variations de leur variabilité. En effet :
 - on peut remarquer qu'il existe des périodes de large variabilité temporelle du débit de rejet : entre le 19 et le 21 mars, par exemple ;
 - on peut aussi remarquer qu'il existe des périodes de faible variabilité temporelle du débit de rejet : entre le 11 et le 13 mars par exemple.

C'est pour traiter ce genre de situations que l'on a choisi d'utiliser un algorithme d'échantillonnage transdimensionnel. On ne pouvait découper notre vecteur de débits de rejet selon un pas de temps temporel d'une heure, car alors le problème aurait été numériquement coûteux et sous-contraint :

- il y aurait eu trop de variables pour que le MCMC puisse converger rapidement ;
- il y aurait eu des intervalles temporels beaucoup trop finement décrits par rapport à la quantité d'informations disponible (voir section 6.1.1.3).

Néanmoins, il existe des intervalles temporels où il est nécessaire de décrire l'évolution du débit de rejet avec une précision horaire. C'est le rôle de l'algorithme du Reversible-Jump de décrire chaque intervalle temporel avec la précision nécessaire ;

- enfin, on peut observer l'évolution du rejet de Fukushima-Daiichi avec plusieurs épisodes complexes :
 - un épisode de rejet entre le 12 et le 13 mars à 10^{11} Bq.s $^{-1}$;
 - plusieurs pics de rejets entre le 14 et le 16 mars qui atteignent aussi 10^{11} Bq.s $^{-1}$;
 - un épisode de rejet au jour du 18 mars à 10^{11} Bq.s $^{-1}$;
 - plusieurs pics de rejets entre le 19 et le 21 mars dépassant 10^{11} Bq.s $^{-1}$;
 - des rejets peu ou non-contraints et évalués quasi-nuls en médiane sur trois périodes de temps : au début des simulations entre le 11 et le 13 mars, entre le 16 et le 18 mars, et enfin à la fin des simulations à partir du 21 mars.

À présent, nous nous intéressons à la reconstruction d'autres quantités. Sur la figure 6.11, nous traçons différentes courbes :

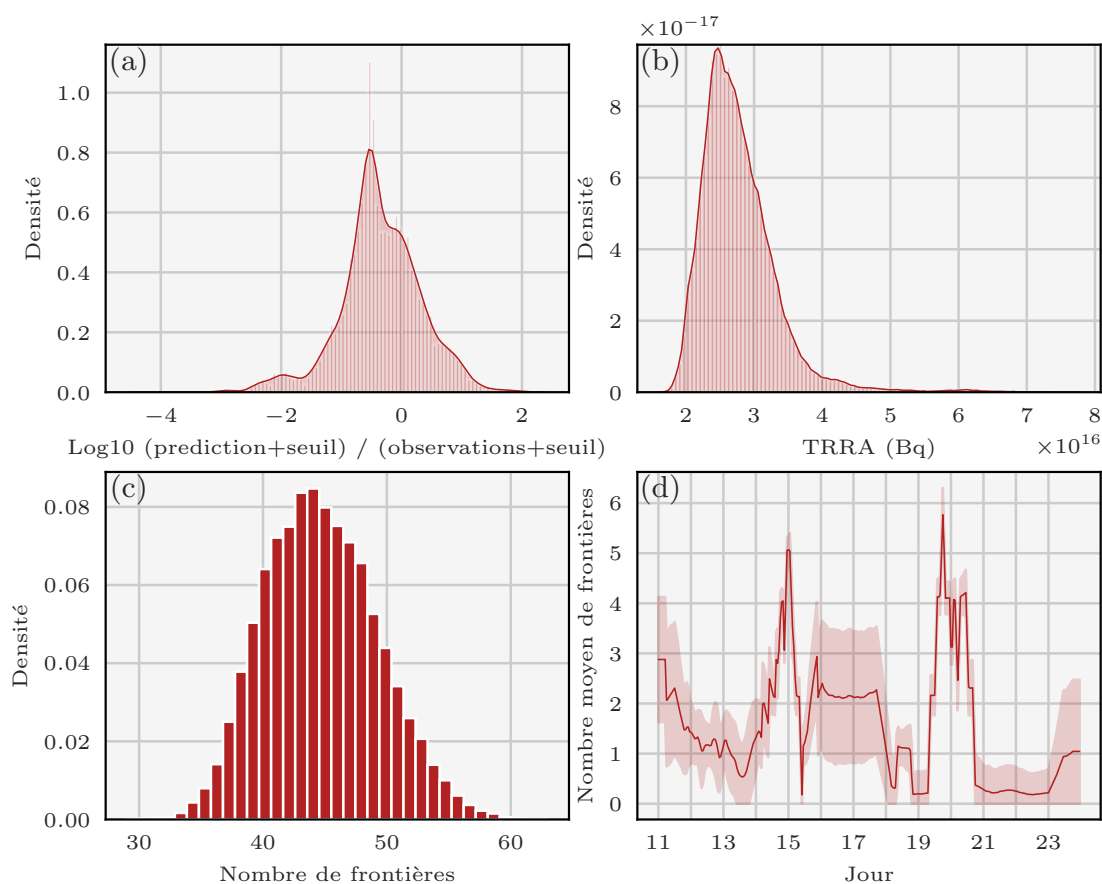


Figure 6.11 – Densités de probabilité ou moyennes des variables décrivant la source des rejets de ¹³⁷Cs échantillonnées selon l’algorithme du RJ-MCMC avec les mesures d’activité volumique seulement.

Densité de probabilité des différences relatives en log₁₀ entre les observations et les prédictions (a). Densité de probabilité du rejet total de ¹³⁷Cs pendant l’accident de Fukushima-Daiichi en Bq (b). Histogramme du nombre de frontières (c). Moyenne (et variance) du nombre de frontières selon l’impulsion minimale considérée (d).

- le premier graphe 6.11.a décrit l'histogramme des différences relatives en \log_{10} entre les observations et les prédictions. Une valeur de -1 correspond donc à une observation 10 fois plus importante qu'une observation.

Seules les observations non-nulles sont utilisées. Le vecteur de prédictions utilisé est le dernier vecteur échantillonné par l'algorithme, c'est-à-dire le vecteur de prédictions correspondant aux variables échantillonnées à la dernière itération du RJ-MCMC.

On remarque que les observations sont globalement sous-évaluées par les prédictions.

- le deuxième graphe 6.11.b décrit la distribution du rejet total en Bq. On observe d'après cette distribution que le rejet total est compris entre 10 et 70 PBq. Une majeure partie de la masse de la distribution est concentrée entre 10 et 30 PBq.

Ceci est cohérent avec les précédents travaux qui estiment le rejet entre 5 et 30 PBq de manière générale (Chino et al. 2011 ; Terada et al. 2012 ; Winiarek et al. 2012, 2014 ; Saunier et al. 2013 ; Katata et al. 2015 ; IAEA 2015 ; Yumimoto et al. 2016 ; Y. Liu et al. 2017) ;

- le troisième graphe 6.11.c décrit la distribution du nombre de frontières échantillonné par l'algorithme. Dans le cas de l'évènement de Fukushima-Daiichi, on rappelle qu'on avait un maximum de 312 frontières. Ici, le minimum de la distribution décrit 30 frontières et le maximum 60 avec un pic à 45 frontières ;
- le quatrième graphe 6.11.d décrit l'évolution du nombre de frontières échantillonné ainsi que la variance associée. La variance est calculée de la même manière que pour le graphe 6.10. Plus précisément,
 - l'axe des abscisses correspond aux 312 impulsions minimales modélisées, c'est-à-dire aux 312 impulsions horaires considérées à partir du 11 mars 2011 ;
 - l'axe des ordonnées correspond au nombre de frontières compté : pour x une impulsion horaire donnée, on a en ordonnée :

$$E[\text{Card}\{\lambda_i \in [x - 5, x + 5] | \lambda_i \in (\lambda_0, \dots, \lambda_{N_{\text{imp}}})\}] \quad (6.77)$$

c'est-à-dire la moyenne sur tous les échantillons du nombre de frontières compté autour de notre impulsion horaire x .

Grossièrement, ce graphe trace le nombre de frontières nécessaire pour modéliser le rejet à un certain moment. Autrement dit, le graphe représente la variabilité du rejet selon l'algorithme :

- plus nous avons de frontières à une impulsion horaire donnée, plus il y a de variabilité ;
- moins nous avons de frontières, moins il y a de variabilité.

On peut remarquer plusieurs choses sur la variabilité du rejet à partir du graphe 6.11.d :

- on note une large variabilité entre le 14 et le 15 mars, et entre le 19 et le 21 mars : ceci est très bien corrélé avec les résultats observables du graphe 6.10. En effet, on observe de larges variabilités temporelles reconstruites, avec plusieurs pics dans ces fines périodes temporelles, surtout entre le 19 et le 21 mars. On observe aussi que ce sont des périodes avec de forts rejets, ce qui est cohérent avec notre observation générale qu'il existe de fortes variabilités quand les rejets sont importants.

Cette observation confirme encore une fois l'intérêt de l'utilisation de l'algorithme du RJ-MCMC : les périodes de forte variabilité peuvent être reconstruites finement ;

- on note une variabilité non négligeable à trois périodes temporelles : dans la première partie de la journée du 11 mars (début des simulations), du 16 au 18 mars, et à la fin de la simulation.

Nous remarquons qu'il s'agit très précisément des périodes non contraintes, c'est-à-dire, des périodes où nous ne disposons pas d'information sur un éventuel rejet. Il semble donc paradoxal d'avoir une forte variabilité sur cette période : puisque nous ne disposons d'aucune information, par application du principe du rasoir d'Ockham, nous souhaiterions avoir une variabilité minimale. En effet, une forte variabilité implique une dépense de temps de calcul qui n'est dans ce cas pas justifié par l'assimilation d'information.

Ce résultat est en fait un artefact dû à la façon dont nous contraignons le nombre de frontières, qui est expliqué ci-dessous.

On rappelle que l'échantillonnage du nombre de frontières, qui représente la résolution du compromis biais-variance décrit en section 6.1.1.3 dépend de trois critères :

- le gain en probabilité dû à l'ajout d'une nouvelle frontière lié à l'amélioration de la correspondance observations-prédictions associées, c'est-à-dire le gain en vraisemblance $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$. En effet, on ne peut que gagner en ajustement aux observations en augmentant le nombre de frontières ;
- la perte due à l'ajout d'une nouvelle frontière liée au prior sur les logarithmes de débits de rejet $p(\ln \mathbf{q})$;
- la perte due à l'ajout d'une nouvelle frontière liée au prior sur l'ensemble des partitions de frontières $p(\Lambda)$.

Prenons une période non-contrainte (par exemple, les premières heures du 11 mars) :

- le gain en probabilité $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ dû à l'ajout d'une nouvelle frontière est nul sur cette période de temps.

En effet, ce gain est lié à la division d'un seul débit de rejet, constant sur toute une période, en deux débits de rejet. Cela permet de diviser une période de temps en

deux épisodes de rejet différents, dans le but de mieux reproduire les observations avec ces deux épisodes plutôt qu'avec un seul sur toute la période.

Or, nous savons que le vecteur de prédictions \mathbf{y}_S est indépendant de la définition des débits de rejet sur cette première période de temps non contrainte. Ceci veut dire que la correspondance observations-prédictions $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ ne peut être affecté par l'ajout d'une nouvelle frontière dans cette première période de temps. Donc, nous ne pouvons pas avoir de gain ;

- la perte liée au prior sur l'ensemble des frontières $p(\Lambda)$, qui dépend dans notre cas du nombre de frontières, est constante quel que soit la période de temps ;
- la perte liée au prior sur les logarithmes de débits de rejet $p(\ln \mathbf{q})$ ici est nulle. Elle est nulle car le débit de rejet est très faible grâce justement à ce même prior. Or, diviser un débit de rejet très faible en deux débits de rejet très faibles ne va provoquer qu'une perte extrêmement petite.

C'est ce troisième point qui explique pourquoi nous avons plus de frontières à des moments où nous n'avons aucune contrainte. Dans une période de temps contrainte par les observations, le débit de rejet sera très souvent non nul. En conséquence, diviser un débit de rejet non nul en deux débits de rejet via la création d'une nouvelle frontière sera coûteux : ce sera un mouvement non accepté s'il ne génère pas de gain suffisant, c'est-à-dire, d'ajustement aux observations suffisant. Il n'y a pas ce besoin-là pour l'apparition d'une frontière dans un espace de temps non contraint par les observations.

Nous pouvons de plus à présent expliquer pourquoi un prior exponentiel, plutôt qu'un prior uniforme, est utilisé. Avec un prior uniforme, le nombre de frontières échantillonné en moyenne était de 80. La plupart de ces 35 frontières supplémentaires (par rapport aux 45 dans ce cas d'application, avec un prior exponentiel) apparaissaient au niveau des impulsions non contraintes. Autrement dit, la plupart de ces frontières supplémentaires ajoutait de la complexité à notre modèle, sans ajouter aucun gain en reproduction des observations. C'était une dépense d'énergie (de temps de calcul) inutile. Cela veut aussi dire que le reste du modèle, c'est-à-dire les débits de rejet sur les impulsions contraintes, était suffisamment complexe.

Dans la prochaine partie, nous proposons une application où nous utilisons les méthodes de mélange des mesures.

6.3.3.2 Reconstruction des variables avec les mesures d'activité volumique et les mesures de dépôt

Dans cette partie, nous appliquons maintenant :

- l'algorithme du RJ-MCMC défini en section 6.1.2 et appliqué dans la section précédente 6.3.3.1 ;
- la méthode de mélange de mesures introduite en section 6.2, où des mesures de dépôt et des mesures d'activité volumique, déjà utilisées en section 6.3.3.1, sont mêlées et utilisées.

L'objectif de cette partie est d'étudier

- la pertinence de la méthode proposée ;
- l'apport de l'intégration de mesures de dépôt. Ce second objectif est néanmoins limité par le ratio du nombre de mesures de dépôt par le nombre de mesures d'activité volumique. Nous rappelons que 1500 mesures de dépôt sont utilisées dans cette étude et ajoutées aux 14000 mesures d'activité volumique.

Nous reconstruisons le vecteur

$$\mathbf{x} = \left(\ln \mathbf{q}, r_1, r_{np}, b_c, (\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{imp}-1}) \right), \quad (6.78)$$

Dans un premier temps, nous reconstruisons plusieurs graphes dans deux cas :

- le cas où seules les mesures d'activité volumiques sont utilisées ;
- le cas où les mesures d'activité volumiques et de dépôt sont utilisées de manière conjointe.

Plus précisément, nous reconstruisons l'évolution de la médiane et de la variance associée des débits de rejet sur la figure 6.12.a, la densité de probabilité du TRRA sur la figure 6.12.b, la densité de probabilité du nombre de frontières sur la figure 6.12.c, et enfin l'évolution de la moyenne et la variance associée du nombre de frontières selon l'heure sur la figure 6.12.d. Les variances sont calculées de la même manière que dans la section précédente.

Nous observons des différences mineures entre les deux reconstructions sauf sur la reconstruction du TRRA :

- sur la figure 6.12.a, les fonctions médianes des deux reconstructions sont très similaires, sauf sur la fin de la journée du 11 mars où un débit de rejet de 10^{11}Bq.s^{-1} est atteint pour la reconstruction avec les deux types de mesure. Il est probable que les autres différences entre les deux reconstructions soient dues à la variance de l'échantillonnage ;
- sur la figure 6.12.b, le TRRA reconstruit à l'aide des mesures d'activité volumique et de dépôt est plus important que celui reconstruit avec les mesures d'activité volumiques seules. L'écart entre les deux moyennes est d'environ 10 PBq.

D'autre part, la densité reconstruite avec les deux types de mesures a une variance plus élevée que la densité de probabilité du TRRA reconstruit à l'aide des mesures d'activité volumique seules.

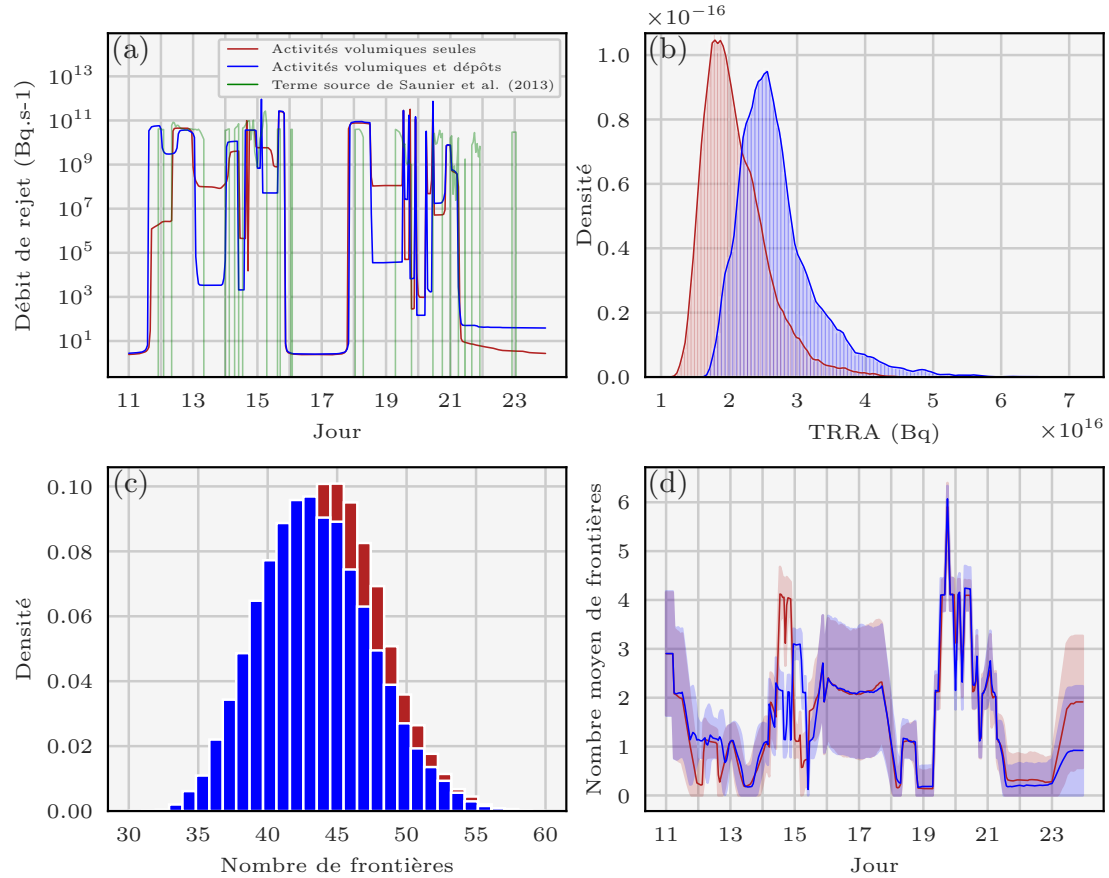


Figure 6.12 – Densités de probabilité ou moyennes des variables décrivant la source des rejets de ^{137}Cs échantillonnées selon l’algorithme du RJ-MCMC avec les mesures d’activité volumique et les mesures de dépôt. Médianes et écart-types des débits de rejet horaires (a) : les courbes rouges et bleues correspondent aux débits de rejet médians échantillonnés. Les aires rouges et bleus pâles correspondent aux zones comprises entre la moyenne et \pm l’écart-type des échantillons de débits de rejet horaires pour chaque reconstruction : $[\mu_{\ln q} - \sigma_{\ln q}, \mu_{\ln q} + \sigma_{\ln q}]$, où la moyenne et l’écart-type sont notés $\mu_{\ln q}$ et $\sigma_{\ln q}$. Comparaison avec le terme source optimal de Saunier et al. 2013 obtenu par des méthodes déterministes. Densité de probabilité du rejet total de ^{137}Cs pendant l’accident de Fukushima-Daiichi en Bq (b). Histogramme du nombre de frontières (c). Moyenne (et variance) du nombre de frontières selon l’impulsion minimale considérée (d).

- avec les mêmes configurations, on peut noter sur la figure 6.12.c que la distribution du nombre de frontières est de moyenne légèrement moins grande dans le cas de l'utilisation des deux types de mesure ;
- enfin, la seule réelle différence notable entre les descriptions de la moyenne et de la variance du nombre de frontières décrites sur la figure 6.12.d est un nombre de frontières estimé deux fois moins important sur la journée du 14 mars lors de l'utilisation conjointe des deux types de mesures, mais estimé plus important sur la journée du 15 mars. Ces différences sont plutôt surprenantes dans la mesure où on ne note pas de disparité flagrante entre les médianes des débits de rejet pour les deux reconstructions en figure 6.12.a sur ces journées.

Sur le graphe 6.13, nous reconstruisons les densités de probabilité des termes d'erreurs d'observation dans le cas où l'algorithme du RJ-MCMC est appliqué avec les mesures d'activité volumique et les mesures de dépôt conjointes. Plus précisément, les densités de probabilité de la variance d'erreur d'observation liée aux mesures d'activités volumiques ainsi que de la variance d'erreur d'observation liée aux mesures de dépôts sont présentées.

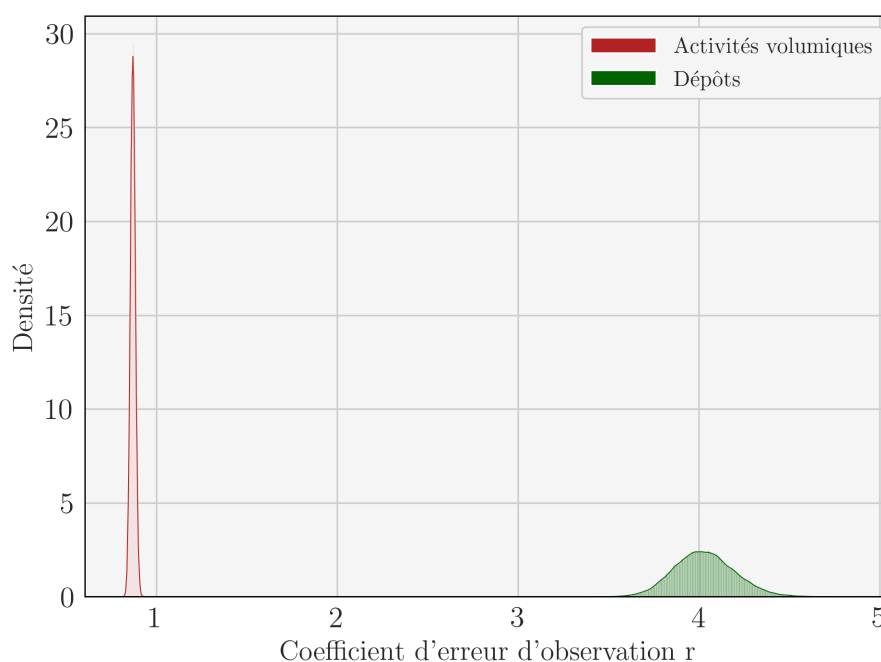


Figure 6.13 – Densités de probabilité des variances d'erreur d'observation liées à la source des rejets de ^{137}Cs échantillonnés selon l'algorithme du RJ-MCMC avec les mesures d'activité volumique et les mesures de dépôt. La variance d'erreur de mesure de dépôt est comparé avec la variance d'erreur de mesure d'activité volumique.

Nous observons que la variance d'erreur d'observation liée aux dépôts a une valeur

beaucoup plus importante (de moyenne égale à 4) que celle liée aux mesures d'activité volumique (de moyenne égale à 0.75). Autrement dit, les mesures de dépôt pertinentes sont en moyenne moins bien reconstruites que les mesures d'activité volumique pertinentes. Nous rappelons en effet que l'algorithme de tri des observations est appliqué et que nous ne considérons ainsi que les observations pertinentes dans la reconstruction de la figure 6.13.

D'autre part, les scores de FAC2, de FAC5, et de FAC10 sont reconstruits dans le tableau 6.2 ci-dessous.

Échantillonnage	FAC2	FAC5	FAC10
Avec activités volumiques seulement			
Activités volumiques	0.29	0.67	0.85
Dépôts	0.31	0.60	0.75
Avec activités volumiques et dépôt			
Activités volumiques	0.28	0.67	0.86
Dépôts	0.40	0.72	0.83

Table 6.2 – Comparaison des mesures observées et simulées à partir des prédictions reconstruites avec les mesures d'activités volumiques seulement, ou les mesures d'activités volumiques et de dépôt. Les FAC2, FAC5, FAC10 sont la proportion des mesures pour lesquelles les valeurs observées et modélisées concordent avec un facteur 2, un facteur 5, ou un facteur 10. Le tableau se lit de la façon suivante : les prédictions obtenues avec un échantillonnage réalisé à partir des activités volumiques seulement, obtiennent par rapport aux mesures de dépôt un score FAC5 de 0.60.

Plusieurs choses peuvent être déduites. Cette différence entre les deux variances d'erreur d'observation semble incohérente avec l'observation à partir du FAC2 que les mesures de dépôt sont mieux reproduites que les mesures d'activités volumiques. En effet, on note que le FAC2 correspondant aux mesures de dépôt est de 0.40 contre 0.28 pour les mesures d'activités volumique.

Ce qu'il se passe en réalité est qu'il existe des valeurs aberrantes de dépôt qui sont très mal reproduites. On observe d'ailleurs que le score FAC10 des mesures d'activités volumiques est supérieur au FAC10 des mesures de dépôt. Des scores supérieurs au FAC10 confirmeraient cette tendance. Certaines mesures de dépôt étant très mal reproduites, elles augmentent en moyenne la valeur de la variance d'erreur d'observation correspondante.

Le tableau 6.2 donne aussi l'information qu'il y a une différence significative dans la reproduction des mesures de dépôt entre l'échantillonnage avec les mesures d'activités volumiques seulement et les deux types de mesure. Plus simplement dit, et de manière peu

surprenante, le problème inverse résolu avec les mesures de dépôt permet de produire des prédictions qui les reproduisent mieux que si l'on prenait en compte les mesures d'activités volumique seulement.

6.3.3.3 Conclusions

Dans cette toute dernière section, nous concluons sur les différents objectifs de ce chapitre.

D'abord, nous avons proposé un échantillonnage du terme source de ^{137}Cs de Fukushima-Daiichi dont la médiane est très corrélée avec un autre terme source proposé par Saunier et al. 2013. Nous observons que les prédictions reconstruites reproduisent bien les observations d'activité volumique et de dépôt. De manière générale, le terme source reconstruit est cohérent avec les précédentes évaluations, avec le vecteur d'observation et avec les connaissances des experts acquises sur l'accident de Fukushima-Daiichi.

Cet échantillonnage a été réalisé grâce à l'algorithme transdimensionnel du Reversible-Jump MCMC. Cet algorithme a permis de reconstruire avec efficacité et finesse les périodes de grande variabilité des rejets de ^{137}Cs lors de l'accident de Fukushima-Daiichi. Il a aussi permis de reconstruire plus grossièrement, ce qui permet d'éviter des erreurs de variance et d'économiser du temps de calcul, les périodes de faible variabilité temporelle. Les priors utilisés ont permis de régulariser efficacement à la fois le nombre de frontières et les logarithmes de débit de rejet non contraints.

Enfin, l'utilisation de méthodes de mélanges de mesure a eu un impact sur la reconstruction de la distribution du TRRA, dont la moyenne a augmenté de 10 PBq. De plus, la méthode de mélange des mesures a montré être tout à fait pertinente et pouvant être facilement mise en œuvre.

Conclusions et perspectives

Ce travail s'inscrit dans le cadre de l'amélioration des méthodes de gestion de crise de l'IRSN (Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire) afin de pouvoir conseiller les autorités en cas d'éventuelles dispersions accidentelles de matières radioactives dans l'atmosphère.

En cas de rejet atmosphérique accidentel, la dispersion des radionucléides, leur dépôt dans l'environnement et les mesures de radioactivité, sont des éléments essentiels pour évaluer les conséquences environnementales et sanitaires et ainsi émettre des recommandations appropriées vers les autorités. L'évaluation de la dispersion est obtenue à partir d'un modèle de transport qui dépend de la qualité des champs météorologiques et de l'estimation de la source du rejet. La caractérisation de la source comprend la localisation, l'évolution temporelle des débits de rejet des radionucléides ainsi que leur forme physico-chimique. Les méthodes de modélisation inverse qui consistent à combiner les modèles de transport avec les mesures dans l'environnement ont prouvé leur efficacité dans l'évaluation du terme source. Des méthodes de modélisation inverse de type déterministe sont déjà utilisées à l'IRSN.

Ces travaux de thèse proposent de résoudre le problème inverse dans un formalisme probabiliste. Des méthodes bayésiennes sont mises en œuvre afin de reconstruire non pas une source optimale mais une distribution de probabilité des variables décrivant la source, détaillant l'ensemble des possibles et quantifiant ainsi les incertitudes associées aux erreurs d'observation et de modélisation.

Dans ces travaux, nous avons tout d'abord cherché à retrouver l'origine et le terme source du rejet de ^{106}Ru en Europe à l'automne 2017. Une méthode MCMC classique, l'algorithme de Metropolis-Hastings, a été appliquée afin d'échantillonner les distributions des coordonnées, du vecteur des débits de rejet, ainsi que la variance de l'erreur d'observation. Des problèmes de minima locaux bloquant la convergence des chaînes de Markov nous ont poussés vers l'utilisation de méthodes d'échantillonnage plus avancées.

L'algorithme du parallel tempering, une méthode MCMC d'échantillonnage basée sur le principe de température qui permet aux chaînes de Markov de s'échapper des minima locaux, a été développée puis appliquée. Cet algorithme consiste à utiliser des chaînes dites chaudes capables d'explorer l'espace d'états complet et de transmettre de l'information à des chaînes dites froides et ainsi leur permettre d'échapper à des minima locaux. La

méthode nous a mené à l'échantillonnage des variables décrivant la source du ^{106}Ru . Les chaînes de Markov convergeant vers la distribution a posteriori, les densités de probabilité ont pu être reconstruites : le TRRA a été évalué entre 100 et 200 TBq et la distribution de la position de la source décrit une zone dans le sud de l'Oural. Les résultats obtenus sont cohérents avec les autres travaux sur le sujet, mais vont au delà en permettant une quantification des incertitudes.

Néanmoins, la variance de la distribution des coordonnées de la source était trop faible et n'incluait pas le seul site nucléaire de la région, celui de Mayak. Ceci nous a amené à conclure que les incertitudes du problème, estimées au sein de l'échantillonnage bayésien, n'étaient pas adéquatement quantifiées.

Par ailleurs, une deuxième méthode a été développée dans le but d'accélérer l'échantillonnage : l'algorithme de descente de Stein à gradient variable. Cet algorithme récent consiste en une descente de gradient d'un ensemble de particules se repoussant mutuellement afin de reconstruire la distribution à échantillonner. Les particules de cet algorithme, lors de l'application au cas du ^{106}Ru , restant bloquées dans des minima locaux de coordonnées, nous avons décidé de ne pas poursuivre avec cette méthode.

Par la suite, des méthodes pour améliorer la quantification des incertitudes au sein de l'échantillonnage MCMC ont été mises en œuvre et évaluées sur le cas du ^{106}Ru .

Dans un premier temps, l'impact du choix de la vraisemblance qui définit en grande partie la distribution a posteriori quand les priors choisis sont non-informatifs a été examiné. Plusieurs vraisemblances, à partir d'une liste de critères, ont été sélectionnées : les distributions log-normales, log-Laplace, et log-Cauchy qui quantifient relativement l'écart entre observations et prédictions.

Dans un second temps, nous nous sommes intéressés à la modélisation de la matrice de covariance de la vraisemblance \mathbf{R} qui mesure les incertitudes d'observation et de modélisation. Une méthode pour modéliser cette matrice de covariance à partir d'un tri des observations en deux groupes pertinent et non-pertinent a été proposée. Cette technique permet de réduire l'impact lié à la représentation de la matrice de covariance \mathbf{R} .

Finalement, afin d'incorporer à l'intérieur du processus d'échantillonnage les incertitudes liées aux champs météorologiques et au modèle de transport, des méthodes d'ensemble ont été mises en œuvre. Un ensemble d'opérateurs d'observation, construit à partir de l'EDA ERA5 ECMWF et d'une perturbation des paramètres de dépôt sec, hauteur de rejet, et coefficient de turbulence verticale du modèle de transport ldX de l'IRSN, a été utilisé en lieu et place d'un opérateur d'observation déterministe.

Les mérites de ces différentes méthodes ont été démontrés sur le cas du ^{106}Ru , améliorant à chaque fois la quantification des incertitudes.

Premièrement, des échantillonnages MCMC indépendants réalisés à partir des trois

vraisemblances examinées ont montré que la forme et le support des distributions des coordonnées étaient fortement impactés par le choix de la vraisemblance. Ceci révèle que les incertitudes ne sont pas correctement estimées lors de l'utilisation d'une seule vraisemblance.

Deuxièmement, l'intérêt de la modélisation de \mathbf{R} selon le critère de la pertinence des observations a été démontré suite à une application du *parallel tempering*. Du fait de l'utilisation de l'algorithme de tri, l'écart-type de la densité de la longitude reconstruite dans une certaine configuration a été multiplié par trois. L'algorithme de tri permet concrètement d'éviter une sous-estimation de la variance d'erreur d'observation.

Finalement, l'incorporation des incertitudes des champs météorologiques et de transport à l'aide de l'ensemble d'opérateurs d'observation a surtout impacté la distribution conditionnelle du TRRA, augmentant la variance de l'amplitude et du moment du rejet. Nous avons aussi montré que cette méthode permet de reconstruire les paramètres du modèle de transport comme la vitesse de dépôt sec ou la hauteur de rejet.

Les algorithmes développés ont ensuite été utilisés en quasi temps réel dans le cas de la reconstruction des rejets de radionucléides lors de l'épisode des feux de Tchernobyl en avril 2020. Cohérentes avec les résultats des méthodes déterministes, les distributions du terme source et des variances de vraisemblance sont échantillonnées à l'aide d'une modélisation spatiale des observations, et décrivent un rejet entre 250 GBq et 2000 GBq.

Finalement, nous avons développé une méthode d'échantillonnage bayésienne adaptée aux cas de rejets massifs et complexes, c'est-à-dire de rejets longs et de grande variabilité temporelle. L'algorithme du *Reversible-Jump MCMC*, une méthode transdimensionnelle permettant d'échantillonner un vecteur de variables de dimension non constante, a été appliqué à la reconstruction des rejets de ^{137}Cs lors de l'accident de Fukushima-Daiichi.

Des mesures d'activité volumique et de dépôt et une modélisation de la matrice de covariance de la vraisemblance adaptée sont utilisées. La distribution des débits de rejet est échantillonnée et la variabilité temporelle de la cinétique du rejet en particulier peut être évaluée grâce à l'application du *RJ-MCMC*. Ainsi, les périodes de rejets importants sont reconstruites finement, tandis que les périodes peu contraintes par les observations sont reconstruites grossièrement afin d'économiser du temps de calcul et d'éviter des erreurs dites de variance ou *overfitting*. La distribution de la différence relative entre les observations et les prédictions montre un bon accord modèle-mesure qui souligne la fiabilité de la méthode, du terme source reconstruit, et de la quantification des incertitudes.

Une spécificité de notre approche est d'intégrer les différentes sources d'incertitudes au processus d'échantillonnage. D'ailleurs, une autre source d'incertitudes liée à la représentation du terme source en un vecteur de débits de rejet est traitée avec l'algorithme du

RJ-MCMC. Pour que les différentes sources d'incertitudes puissent être estimées au sein de l'échantillonnage, il faut qu'elles soient intégrées par exemple sous forme de variables à reconstruire. C'est le principe qui a été suivi pour inclure les incertitudes venant de la modélisation de \mathbf{R} , de la météorologie, du modèle de dispersion, et de la représentation de \mathbf{q} .

Cette méthodologie pourrait être étendue en prenant en compte les sources d'incertitudes non traitées dans ce paradigme : le choix des distributions a priori, le vecteur des observations, la représentation de la position et le choix des vraisemblances. L'ajout d'incertitudes venant du choix des distributions de probabilité définissant le problème ou du vecteur des observations pose un réel défi car de leur choix peut dépendre la distribution de probabilité invariante que l'on cherche à échantillonner. Cela amènerait peut-être à devoir réévaluer la définition du problème.

Il pourrait être très intéressant de développer les méthodes d'ensemble en intégrant plus de paramètres. L'ensemble d'opérateurs d'observation pourrait être construit à partir de la perturbation d'autres paramètres physiques, de différents modèles de transport, voir de méta-modèles simulant le transport. En effet, plutôt que par la résolution de l'équation de transport, la dispersion des radionucléides pourrait être représentée par une fonction entraînée à l'aide de méthodes d'apprentissage automatique à simuler le transport sur des cas synthétiques.

Par ailleurs, l'utilisation de méthodes d'apprentissage automatique pourrait permettre le calcul en temps du réel du transport pour chaque position, et ainsi réduire les incertitudes liées à la représentation de la position du rejet. Ces méthodes pourraient aussi favoriser l'utilisation des méthodes transdimensionnelles ou d'ensemble, en réduisant les temps de calcul des opérations linéaires réalisées lors de l'échantillonnage pour ces deux types de méthodes.

Une autre perspective intéressante serait l'expansion de la méthode bayésienne à la prise en compte de sources multiples. Cela pourrait permettre de mieux évaluer le terme source d'évènements à sources multiples comme par exemple celui des feux de Tchernobyl. Plusieurs directions pourraient être prises. Une solution économique pourrait consister, pour un ensemble fini de sources, à considérer un ensemble d'opérateurs d'observation, chaque membre correspondant à une position différente. Chaque colonne de chaque opérateur d'observation serait pondérée et l'ensemble de ces poids serait intégré au vecteur de variables à reconstruire. Une solution plus générale mais plus coûteuse serait de multiplier par autant de sources possibles considérées le nombre de variables à reconstruire. Un algorithme transdimensionnel inspiré de Yee 2008 pourrait éventuellement être utilisé dans le cas où le nombre de sources n'est pas connu.

Mais ce qui à mon avis incarne le cœur du problème d'estimation des incertitudes et

donc le cœur de cette thèse, et là où les plus grands progrès devraient pouvoir être réalisés, est l'amélioration de la modélisation de la matrice de covariance \mathbf{R} . La quantification des incertitudes repose en effet en grande partie sur l'évaluation de \mathbf{R} . Des études théoriques supplémentaires sont nécessaires pour déterminer comment évaluer cette matrice de manière optimale : combien de paramètres devraient être utilisés et comment quantifier chacun de ces paramètres. On peut envisager au moins deux grandes catégories de méthodes pour améliorer son évaluation.

D'abord, des modélisations physiques peuvent être envisagées. Une corrélation pas seulement spatiale mais spatio-temporelle pourrait être utilisée pour diviser les observations en différents groupes. D'autre part, un critère pourrait être dérivé de l'opérateur d'observation, permettant de regrouper les observations à partir de corrélations de leurs prédictions associées.

Des modélisations mathématiques peuvent aussi être considérées. Celles-ci pourraient consister en une représentation de la matrice de covariance qui s'approche de la forme qu'elle aurait si nous pouvions la décrire avec autant d'hyperparamètres que d'observations. C'est la proposition de l'algorithme de tri général des observations décrit dans le chapitre 5 de cette thèse mais non appliqué : on tente de s'approcher de la forme qu'aurait la matrice si nous n'avions pas de limitations de temps de calcul.

Ce travail de modélisation de la matrice de covariance est central, car une bonne modélisation de \mathbf{R} réduirait très probablement les incertitudes liées aux autres sources d'erreur, comme par exemple les incertitudes liées au choix de la vraisemblance.

Enfin, une dernière perspective intéressante serait d'étendre nos travaux à d'autres problèmes inverses : la reconstruction de sources de particules ou de gaz autres que des radionucléides par exemple. Ces problèmes inverses fonctionnent avec les mêmes grands principes et nous pensons que la majorité des méthodes présentées dans cette thèse pourraient être directement transposées dans ces cadres d'application.

Bibliographie

- Altekar, G., S. Dwarkadas, J. P. Huelsenbeck et F. Ronquist (2004). « Parallel Metropolis coupled Markov chain Monte Carlo for Bayesian phylogenetic inference ». In : *Bioinformatics* 20.3, p. 407-415. DOI : 10.1093/bioinformatics/btg427 (cf. p. 86).
- Anderson, J. L. (1996). « A Method for Producing and Evaluating Probabilistic Forecasts from Ensemble Model Integrations ». In : *Journal of Climate* 9.7, p. 1518-1530. DOI : 10.1175/1520-0442(1996)009<1518:AMFPAE>2.0.CO;2 (cf. p. 147).
- Asch, M., M. Bocquet et M. Nodet (2016). *Data assimilation : methods, algorithms, and applications* (cf. p. 47).
- Atchadé, Y. F., G. O. Roberts et J. S. Rosenthal (2011). « Towards optimal scaling of metropolis-coupled Markov chain Monte Carlo ». In : *Statistics and Computing* 21.4, p. 555-568. DOI : 10.1007/s11222-010-9192-1 (cf. p. 85, 87, 93-94).
- Baklanov, A. et J. H. Sørensen (2001). « Parameterisation of radionuclide deposition in atmospheric long-range transport modelling ». In : *Physics and Chemistry of the Earth, Part B : Hydrology, Oceans and Atmosphere* 26.10, p. 787-799. DOI : 10.1016/S1464-1909(01)00087-9 (cf. p. 29, 79, 154, 174, 217).
- Baragatti, M. (2011). « Sélection bayésienne de variables et méthodes de type Parallel Tempering avec et sans vraisemblance ». Thèse de doctorat. Aix-Marseille 2 (cf. p. 85, 87, 93).
- Bardsley, J., A. Solonen, H. Haario et M. Laine (2014). « Randomize-Then-Optimize : A Method for Sampling from Posterior Distributions in Nonlinear Inverse Problems ». In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 36.4, A1895-A1910. DOI : 10.1137/140964023 (cf. p. 123).
- Bayes, T. (1763). « An essay towards solving a problem in the doctrine of chances. Communicated by Mr. Price, in a letter to John Canton. » In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 53, p. 370-418. DOI : 10.1098/rstl.1763.0053 (cf. p. 52).
- Bernardo, J. M. et A. F. M. Smith (2008). *Bayesian Theory* (cf. p. 55).

- Bocquet, M. (2005). « Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. I : Theory ». In : *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 131.610, p. 2191-2208. DOI : 10.1256/qj.04.67 (cf. p. 47, 56).
- (2012). « Parameter-field estimation for atmospheric dispersion : application to the Chernobyl accident using 4D-Var ». In : *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 138.664, p. 664-681. DOI : 10.1002/qj.961 (cf. p. 42).
- Bodin, T. et M. Sambridge (2009). « Seismic tomography with the reversible jump algorithm ». In : *Geophysical Journal International* 178.3, p. 1411-1436. DOI : 10.1111/j.1365-246X.2009.04226.x (cf. p. 194, 201-202, 206, 209).
- Bröcker, J. et L. A. Smith (2007). « Increasing the Reliability of Reliability Diagrams ». In : *Weather and Forecasting* 22.3, p. 651-661. DOI : 10.1175/WAF993.1 (cf. p. 149).
- Brouard, C. (2013). « Inférence de réseaux d'interaction protéine-protéine par apprentissage statistique ». Thèse de doctorat (cf. p. 186).
- Calvetti, D., L. Reichel et A. Shuibi (2004). « L-Curve and Curvature Bounds for Tikhonov Regularization ». In : *Numerical Algorithms* 35.2, p. 301-314. DOI : 10.1023/B:NUMA.0000021764.16526.47 (cf. p. 49).
- Celeux, G., S. Frühwirth-Schnatter et C. P. Robert (2019). « Model Selection for Mixture Models – Perspectives and Strategies ». In : *Handbook of Mixture Analysis*. 1^{re} éd., p. 117-154. DOI : 10.1201/9780429055911-7 (cf. p. 185).
- Chino, M., H. Nakayama, H. Nagai, H. Terada, G. Katata et H. Yamazawa (2011). « Preliminary Estimation of Release Amounts of 131I and 137Cs Accidentally Discharged from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant into the Atmosphere ». In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 48.7, p. 1129-1134. DOI : 10.1080/18811248.2011.9711799 (cf. p. 214, 225).
- Chow, F. K., B. Kosović et S. Chan (2008). « Source Inversion for Contaminant Plume Dispersion in Urban Environments Using Building-Resolving Simulations ». In : *Journal of Applied Meteorology and Climatology* 47.6, p. 1553-1572. DOI : 10.1175/2007JAMC1733.1 (cf. p. 56, 130).
- Craiu, R. V., J. Rosenthal et C. Yang (2009). « Learn From Thy Neighbor : Parallel-Chain and Regional Adaptive MCMC ». In : *Journal of the American Statistical Association* 104.488, p. 1454-1466. DOI : 10.1198/jasa.2009.tm08393 (cf. p. 84-85).

-
- Davoine, X. et M. Bocquet (2007). « Inverse modelling-based reconstruction of the Chernobyl source term available for long-range transport ». In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 7.6, p. 1549-1564. DOI : 10.5194/acp-7-1549-2007 (cf. p. 48).
- Defforge, C. (2019). « Data assimilation for micrometeorological applications with the fluid dynamics model Code_Saturne ». Thèse de doctorat. Paris Est (cf. p. 19, 21).
- Delle Monache, L. et R. B. Stull (2003). « An ensemble air-quality forecast over western Europe during an ozone episode ». In : *Atmospheric Environment* 37.25, p. 3469-3474. DOI : 10.1016/S1352-2310(03)00475-8 (cf. p. 144).
- Delle Monache, L. et al. (2008). « Bayesian inference and markov chain monte carlo sampling to reconstruct a contaminant source on a continental scale ». In : *Journal of Applied Meteorology and Climatology* 47.10, p. 2600-2613. DOI : 10.1175/2008JAMC1766.1 (cf. p. 56, 59, 123, 130).
- Delle Monache, L., J. P. Hacker, Y. Zhou, X. Deng et R. B. Stull (2006). « Probabilistic aspects of meteorological and ozone regional ensemble forecasts ». In : *Journal of Geophysical Research* 111.D24. DOI : 10.1029/2005JD006917 (cf. p. 147).
- Duchi, J., E. Hazan et Y. Singer (2011). « Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization ». In : *The Journal of Machine Learning Research* 12, p. 2121-2159 (cf. p. 111).
- Dumont Le Brazidec, J., M. Bocquet, O. Saunier et Y. Roustan (2020). « MCMC methods applied to the reconstruction of the autumn 2017 Ruthenium-106 atmospheric contamination source ». In : *Atmospheric Environment : X* 6, p. 100071. DOI : 10.1016/j.aeaoa.2020.100071 (cf. p. 16, 59, 77, 123, 153, 155, 219).
- (2021). « Quantification of the modelling uncertainties in atmospheric release source assessment and application to the reconstruction of the autumn 2017 Ruthenium 106 source ». In : *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, p. 1-28. DOI : 10.5194/acp-2020-1129 (cf. p. 16, 120, 123).
- Earl, D. J. et M. W. Deem (2005). « Parallel tempering : Theory, applications, and new perspectives ». In : *Physical Chemistry Chemical Physics* 7.23, p. 3910. DOI : 10.1039/b509983h (cf. p. 85).
- Enting, I. G. (2002). *Inverse problems in atmospheric constituent transport*. Cambridge ; New York (cf. p. 45).

- Farchi, A. (2019). « On the localisation of ensemble data assimilation methods ». Thèse de doctorat (cf. p. 47).
- George, E. I. et M. Clyde (2004). « Model Uncertainty ». In : *Statistical Science* 19.1, p. 81-94. DOI : 10.1214/088342304000000035 (cf. p. 183).
- Gilks, W. R., S. Richardson, D. Spiegelhalter, S. Richardson et D. Spiegelhalter (1995). *Markov Chain Monte Carlo in Practice*. DOI : 10.1201/b14835 (cf. p. 70, 85).
- Girard, S., I. Korsakissok et V. Mallet (2014). « Screening sensitivity analysis of a radionuclides atmospheric dispersion model applied to the Fukushima disaster ». In : *Atmospheric Environment* 95, p. 490-500. DOI : 10.1016/j.atmosenv.2014.07.010 (cf. p. 145, 152-153, 217).
- Golub, G., M. Heath et G. Wahba (1979). « Generalized Cross-Validation as a Method for Choosing a Good Ridge Parameter ». In : *Technometrics* 21, p. 215-223. DOI : 10.1080/00401706.1979.10489751 (cf. p. 49).
- Grech, R., T. Cassar, J. Muscat, K. P. Camilleri, S. G. Fabri, M. Zervakis, P. Xanthopoulos, V. Sakkalis et B. Vanrumste (2008). « Review on solving the inverse problem in EEG source analysis ». In : *Journal of NeuroEngineering and Rehabilitation* 5.1, p. 25. DOI : 10.1186/1743-0003-5-25 (cf. p. 47, 49).
- Green, P. J. (1995). « Reversible jump Markov chain Monte Carlo computation and Bayesian model determination ». In : *Biometrika* 82.4, p. 711-732. DOI : 10.1093/biomet/82.4.711 (cf. p. 187, 194).
- Haario, H., M. Laine, A. Mira et E. Saksman (2006). « DRAM : Efficient adaptive MCMC ». In : *Statistics and Computing* 16.4, p. 339-354. DOI : 10.1007/s11222-006-9438-0 (cf. p. 84).
- Haario, H., E. Saksman et J. Tamminen (2001). « An Adaptive Metropolis Algorithm ». In : *Bernoulli* 7.2, p. 223. DOI : 10.2307/3318737 (cf. p. 84).
- Hadamard, M. (1907). « Les problèmes aux limites dans la théorie des équations aux dérivées partielles ». In : *Journal de Physique Théorique et Appliquée* 6.1, p. 202-241. DOI : 10.1051/jphystap:019070060020200 (cf. p. 46).
- Hamill, T. M. (2001). « Interpretation of Rank Histograms for Verifying Ensemble Forecasts ». In : *Monthly Weather Review* 129.3, p. 550-560. DOI : 10.1175/1520-0493(2001)129<0550:IORHFV>2.0.CO;2 (cf. p. 148).

-
- Hanna, S. (2010). « A history of classic atmospheric dispersion field experiments ». In : Atlanta, p. 9 (cf. p. 17).
- Hansen, P. C. (1992). « Analysis of Discrete Ill-Posed Problems by Means of the L-Curve ». In : *SIAM Review* 34.4, p. 561-580. DOI : 10.1137/1034115 (cf. p. 49).
- Hasegawa, A., T. Ohira, M. Maeda, S. Yasumura et K. Tanigawa (2016). « Emergency Responses and Health Consequences after the Fukushima Accident ; Evacuation and Relocation ». In : *Clinical Oncology*. Fukushima - Five Years On 28.4, p. 237-244. DOI : 10.1016/j.clon.2016.01.002 (cf. p. 14).
- Hastie, D. I. et P. J. Green (2012). « Model choice using reversible jump Markov chain Monte Carlo : *Model choice using reversible jump MCMC* ». In : *Statistica Neerlandica* 66.3, p. 309-338. DOI : 10.1111/j.1467-9574.2012.00516.x (cf. p. 187, 194).
- Hastie, T., R. Tibshirani et J. Friedman (2009). *The Elements of Statistical Learning : Data Mining, Inference, and Prediction, Second Edition*. 2^e éd. Springer Series in Statistics. New York (cf. p. 138, 183, 185-186).
- Hastings, W. K. (1970). « Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications ». In : *Biometrika* 57.1, p. 97-109. DOI : 10.1093/biomet/57.1.97 (cf. p. 70).
- Hayakawa, M. (2016). « Increase in disaster-related deaths : risks and social impacts of evacuation ». In : *Annals of the ICRP* 45.2_suppl, p. 123-128. DOI : 10.1177/0146645316666707 (cf. p. 14).
- Hirao, S., H. Yamazawa et T. Nagae (2013). « Estimation of release rate of iodine-131 and cesium-137 from the Fukushima Daiichi nuclear power plant ». In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 50.2, p. 139-147. DOI : 10.1080/00223131.2013.757454 (cf. p. 214).
- Hudson, D. et B. Ebert (2017). *Ensemble Verification Metrics* (cf. p. 149).
- IAEA (2015). *The Fukushima Daiichi accident*. Rapp. tech. Vienna (cf. p. 225).
- IPCC (2018). « Global warming of 1.5°C. An IPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5°C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty ». In : *Press* (cf. p. 13).

- IRSN (2012). *L'analyse de l'IRSN du déroulement de l'accident de Fukushima Daiichi en mars 2011* (cf. p. 213).
- (2020). *Incendies en Ukraine dans la zone d'exclusion autour de la centrale Tchernobyl : Point de situation* (cf. p. 172-173).
- Isabelle, P.-E. (2014). « Simplification de l'estimation des taux d'évapotranspiration sur les tourbières boréales par la quasi-neutralité de l'atmosphère ». Thèse de doct. Université du Québec (cf. p. 20).
- Jacob, P., C. P. Robert et M. H. Smith (2011). « Using Parallel Computation to Improve Independent Metropolis–Hastings Based Estimation ». In : *Journal of Computational and Graphical Statistics* 20.3, p. 616-635. DOI : 10.1198/jcgs.2011.10167 (cf. p. 84).
- Janjić, T. et al. (2018). « On the representation error in data assimilation ». In : *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 144.713, p. 1257-1278. DOI : 10.1002/qj.3130 (cf. p. 48).
- Jaynes, E. T. (2003). *Probability Theory : The Logic of Science*. Sous la dir. de G. L. Bretthorst. Cambridge. DOI : 10.1017/CB09780511790423 (cf. p. 55).
- Jeffreys, H. (1946). « An invariant form for the prior probability in estimation problems ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 186.1007, p. 453-461. DOI : 10.1098/rspa.1946.0056 (cf. p. 55).
- Katata, G. et al. (2015). « Detailed source term estimation of the atmospheric release for the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station accident by coupling simulations of an atmospheric dispersion model with an improved deposition scheme and oceanic dispersion model ». In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 15.2, p. 1029-1070. DOI : 10.5194/acp-15-1029-2015 (cf. p. 214, 225).
- Katata, G., M. Ota, H. Terada, M. Chino et H. Nagai (2012). « Atmospheric discharge and dispersion of radionuclides during the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant accident. Part I : Source term estimation and local-scale atmospheric dispersion in early phase of the accident ». In : *Journal of Environmental Radioactivity* 109, p. 103-113. DOI : 10.1016/j.jenvrad.2012.02.006 (cf. p. 214).
- Keats, A., E. Yee et F.-S. Lien (2007). « Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment ». In : *Atmospheric Environment* 41.3, p. 465-479. DOI : 10.1016/j.atmosenv.2006.08.044 (cf. p. 56).

-
- Kobayashi, T., H. Nagai, M. Chino et H. Kawamura (2013). « Source term estimation of atmospheric release due to the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant accident by atmospheric and oceanic dispersion simulations ». In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 50.3, p. 255-264. DOI : 10.1080/00223131.2013.772449 (cf. p. 214).
- Kovalets, I. et A. Romanenko (2017). *Detection of ruthenium-106 in 2017 : meteorological analysis of the potential sources*. DOI : 10.13140/RG.2.2.36537.67685 (cf. p. 76).
- Kovalets, I. V., O. Romanenko et R. Synkevych (2020). « Adaptation of the RODOS system for analysis of possible sources of Ru-106 detected in 2017 ». In : *Journal of Environmental Radioactivity* 220-221, p. 106302. DOI : 10.1016/j.jenvrad.2020.106302 (cf. p. 76).
- Leadbetter, S. J. et al. (2020). « Ranking uncertainties in atmospheric dispersion modelling following the accidental release of radioactive material ». In : *Radioprotection* 55, S51-S55. DOI : 10.1051/radiopro/2020012 (cf. p. 164).
- Leith, C. E. (1974). « Theoretical Skill of Monte Carlo Forecasts ». In : *Monthly Weather Review* 102.6, p. 409-418. DOI : 10.1175/1520-0493(1974)102<0409:TSOMCF>2.0.CO;2 (cf. p. 144).
- Liu, Q. et D. Wang (2016). « Stein variational Gradient descent : a general purpose Bayesian inference algorithm ». In : *Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems*. NIPS'16. Red Hook, NY, USA, p. 2378-2386 (cf. p. 103, 105, 112).
- Liu, Y., J.-M. Haussaire, M. Bocquet, Y. Roustan, O. Saunier et A. Mathieu (2017). « Uncertainty quantification of pollutant source retrieval : comparison of Bayesian methods with application to the Chernobyl and Fukushima Daiichi accidental releases of radionuclides ». In : *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 143.708, p. 2886-2901. DOI : 10.1002/qj.3138 (cf. p. 40, 48-49, 56, 59, 62, 65, 123, 131, 182, 187, 191, 194, 199, 211, 215, 225).
- Louis, J.-F. (1979). « A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere ». In : *Boundary-Layer Meteorology* 17.2, p. 187-202. DOI : 10.1007/BF00117978 (cf. p. 29, 79, 154, 174, 217).
- Lucas, D. D., M. Simpson, P. Cameron-Smith et R. L. Baskett (2017). « Bayesian inverse modeling of the atmospheric transport and emissions of a controlled tracer release from a nuclear power plant ». In : *Atmos. Chem. Phys.* 17.22, p. 13521-13543. DOI : 10.5194/acp-17-13521-2017 (cf. p. 56).

- MacKay, D. J. C. (2003). *Information Theory, Inference and Learning Algorithms*. Cambridge, UK ; New York (cf. p. 187).
- Mallet, V. et al. (2007). « Technical Note : The air quality modeling system Polyphemus ». In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 7.20, p. 5479-5487. DOI : 10.5194/acp-7-5479-2007 (cf. p. 26).
- Mallet, V. (2010). « Ensemble forecast of analyses : Coupling data assimilation and sequential aggregation ». In : *Journal of Geophysical Research : Atmospheres* 115.D24. DOI : 10.1029/2010JD014259 (cf. p. 144).
- Mallet, V. et B. Sportisse (2006). « Ensemble-based air quality forecasts : A multimodel approach applied to ozone ». In : *Journal of Geophysical Research : Atmospheres* 111.D18. DOI : 10.1029/2005JD006675 (cf. p. 144).
- Mallet, V., G. Stoltz et B. Mauricette (2009). « Ozone ensemble forecast with machine learning algorithms ». In : *Journal of Geophysical Research : Atmospheres* 114.D5. DOI : 10.1029/2008JD009978 (cf. p. 144).
- Martino, L., V. Elvira, D. Luengo, J. Corander et F. Louzada (2016). « Orthogonal parallel MCMC methods for sampling and optimization ». In : *Digital Signal Processing* 58, p. 64-84. DOI : 10.1016/j.dsp.2016.07.013 (cf. p. 84).
- Masson, O. et al. (2019). « Airborne concentrations and chemical considerations of radioactive ruthenium from an undeclared major nuclear release in 2017 ». In : *Proceedings of the National Academy of Sciences* 116.34, p. 16750. DOI : 10.1073/pnas.1907571116 (cf. p. 77).
- Mathieu, A., I. Korsakissok, D. Quélo, J. Groëll, M. Tombette, D. Didier, E. Quentric, O. Saunier, J.-P. Benoit et O. Isnard (2012). « Atmospheric Dispersion and Deposition of Radionuclides from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident ». In : *Elements* 8.3, p. 195-200. DOI : 10.2113/gselements.8.3.195 (cf. p. 214).
- McDonald, J. B. (2008). « Some Generalized Functions for the Size Distribution of Income ». In : *Modeling Income Distributions and Lorenz Curves*. Sous la dir. de D. Chotikapanich. Economic Studies in Equality, Social Exclusion and Well-Being. New York, NY, p. 37-55. DOI : 10.1007/978-0-387-72796-7_3 (cf. p. 126).
- Murphy, A. H. (1993). « What Is a Good Forecast ? An Essay on the Nature of Goodness in Weather Forecasting ». In : *Weather and Forecasting* 8.2, p. 281-293. DOI : 10.1175/1520-0434(1993)008<0281:WIAGFA>2.0.CO;2 (cf. p. 147).

-
- Nguyên Hoang, L. (2018). *La formule du savoir : Une philosophie unifiée du savoir fondée sur le théorème de Bayes*. EDP Sciences (cf. p. 52).
- Nisbet, E. et R. Weiss (2010). « Top-Down Versus Bottom-Up ». In : *Science* 328.5983, p. 1241-1243. DOI : 10.1126/science.1189936 (cf. p. 39).
- Pailleux, J. P., J.-F. Geleyn et E. Legrand (2000). *La prévision numérique du temps avec les modèles ARPEGE et ALADIN* (cf. p. 78).
- Pinson, P. et R. Hagedorn (2011). « Verification of the ECMWF ensemble forecasts of wind speed against observations ». In : ECMWF Technical Memoranda 646. DOI : 10.21957/r7h9hxu9k (cf. p. 164).
- Quélo, D., M. Krysta, M. Bocquet, O. Isnard, Y. Minier et B. Sportisse (2007). « Validation of the Polyphemus platform on the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases ». In : *Atmospheric environment* 41.26, p. 5300-5315. DOI : 10.1016/j.atmosenv.2007.02.035 (cf. p. 26).
- Rajaona, H., F. Septier, P. Armand, Y. Delignon, C. Olry, A. Albergel et J. Moussafir (2015). « An adaptive bayesian inference algorithm to estimate the parameters of a hazardous atmospheric release ». In : *Atmospheric Environment* 122, p. 748-762. DOI : 10.1016/j.atmosenv.2015.10.026 (cf. p. 55, 58, 62, 65, 123, 130-131).
- Robert, C. P., V. Elvira, N. Tawn et C. Wu (2018). « Accelerating MCMC algorithms ». In : *Wiley Interdisciplinary Reviews : Computational Statistics* 10.5, e1435. DOI : 10.1002/wics.1435 (cf. p. 84, 86, 92-93).
- Roberts, G. O., A. Gelman et W. R. Gilks (1997). « Weak convergence and optimal scaling of random walk Metropolis algorithms ». In : *The Annals of Applied Probability* 7.1, p. 110-120. DOI : 10.1214/aoap/1034625254 (cf. p. 74).
- Roberts, G. O. et J. S. Rosenthal (2009). « Examples of Adaptive MCMC ». In : *Journal of Computational and Graphical Statistics* 18.2, p. 349-367. DOI : 10.1198/jcgs.2009.06134 (cf. p. 84).
- (2014). « Minimising MCMC variance via diffusion limits, with an application to simulated tempering ». In : *The Annals of Applied Probability* 24.1, p. 131-149. DOI : 10.1214/12-AAP918 (cf. p. 93-94).
- Roustan, Y. (2005). « Modélisation de la dispersion atmosphérique du mercure, du plomb et du cadmium à l'échelle européenne ». Thèse de doctorat. Marne-la-vallée, ENPC (cf. p. 27).

- Satchell, S. et J. Knight (2000). *Return Distributions in Finance*. Elsevier Monographs. Elsevier (cf. p. 126).
- Sato, Y. et al. (2018). « Model Intercomparison of Atmospheric ^{137}Cs From the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident : Simulations Based on Identical Input Data ». In : *Journal of Geophysical Research : Atmospheres* 123.20, p. 11748-11765. DOI : 10.1029/2018JD029144 (cf. p. 19, 144).
- Saunier, O., D. Didier, A. Mathieu, O. Masson et J. Dumont Le Brazidec (2019). « Atmospheric modeling and source reconstruction of radioactive ruthenium from an undeclared major release in 2017 ». In : *Proceedings of the National Academy of Sciences* 116.50, p. 24991. DOI : 10.1073/pnas.1907823116 (cf. p. 42, 59, 76-77, 79, 99-100, 123, 131, 153, 155, 164).
- Saunier, O., A. Mathieu, D. Didier, M. Tombette, D. Quélo, V. Winiarek et M. Bocquet (2013). « An inverse modeling method to assess the source term of the Fukushima Nuclear Power Plant accident using gamma dose rate observations ». In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 13.22, p. 11403-11421. DOI : 10.5194/acp-13-11403-2013 (cf. p. 26, 40, 42, 47, 123, 130, 215, 221-223, 225, 229, 232).
- Schmehl, K. J., S. E. Haupt et M. J. Pavolonis (2012). « A Genetic Algorithm Variational Approach to Data Assimilation and Application to Volcanic Emissions ». In : *Pure and Applied Geophysics* 169.3, p. 519-537. DOI : 10.1007/s00024-011-0385-0 (cf. p. 42).
- Seinfeld, J. H., S. N. Pandis et K. Noone (2008). « Atmospheric Chemistry and Physics : From Air Pollution to Climate Change ». In : *Physics Today* 51.10, p. 88. DOI : 10.1063/1.882420 (cf. p. 18).
- Senocak, I., N. W. Hengartner, M. B. Short et W. B. Daniel (2008). « Stochastic event reconstruction of atmospheric contaminant dispersion using Bayesian inference ». In : *Atmospheric Environment* 42.33, p. 7718-7727. DOI : 10.1016/j.atmosenv.2008.05.024 (cf. p. 59, 123).
- Shershakov, V. M., R. V. Borodin et Y. S. Tsaturov (2019). « Assessment of Possible Location Ru-106 Source in Russia in September–October 2017 ». In : *Russian Meteorology and Hydrology* 44.3, p. 196-202. DOI : 10.3103/S1068373919030051 (cf. p. 76).
- Sørensen, J. H. (2018). « Method for source localization proposed and applied to the October 2017 case of atmospheric dispersion of Ru-106 ». In : *Journal of Environmental Radioactivity* 189, p. 221-226. DOI : 10.1016/j.jenvrad.2018.03.010 (cf. p. 76).

-
- Stohl, A., P. Seibert, G. Wotawa, D. Arnold, J. F. Burkhart, S. Eckhardt, C. Tapia, A. Vargas et T. J. Yasunari (2012). « Xenon-133 and caesium-137 releases into the atmosphere from the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant : determination of the source term, atmospheric dispersion, and deposition ». In : *Atmospheric Chemistry and Physics* 12.5, p. 2313-2343. DOI : 10.5194/acp-12-2313-2012 (cf. p. 48, 215).
- Stull, R. B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Atmospheric and Oceanographic Sciences Library. DOI : 10.1007/978-94-009-3027-8 (cf. p. 18).
- Swendsen, R. H. et J.-S. Wang (1986). « Replica Monte Carlo simulation of spin glasses ». In : *Physical Review Letters* 57.21, p. 2607-2609. DOI : 10.1103/PhysRevLett.57.2607 (cf. p. 85).
- Talagrand, O., R. Vautard et B. Strauss (1997). « Evaluation of probabilistic prediction systems ». In : Shinfield Park, Reading, p. 1-26 (cf. p. 147-148).
- Tarantola, A. et B. Valette (1982). « Inverse problems - Quest for information ». In : *Journal of Geophysics*, p. 159-170 (cf. p. 55).
- Terada, H., G. Katata, M. Chino et H. Nagai (2012). « Atmospheric discharge and dispersion of radionuclides during the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant accident. Part II : verification of the source term and analysis of regional-scale atmospheric dispersion ». In : *Journal of Environmental Radioactivity* 112, p. 141-154. DOI : 10.1016/j.jenvrad.2012.05.023 (cf. p. 214, 225).
- Tichý, O., V. Šmídl, R. Hofman et A. Stohl (2016). « LS-APC v1.0 : a tuning-free method for the linear inverse problem and its application to source-term determination ». In : *Geosci. Model Dev.* 9.11, p. 4297-4311. DOI : 10.5194/gmd-9-4297-2016 (cf. p. 55, 58, 62, 100, 123, 130).
- Tichý, O., M. Hýža et V. Šmídl (2020). « Real-time measurement of radionuclide concentrations and its impact on inverse modeling of ^{106}Ru release in the fall of 2017 ». In : *Atmospheric Measurement Techniques Discussions*. DOI : 10.5194/amt-2020-205 (cf. p. 77, 100).
- Tikhonov, A. N. et V. B. Glasko (1965). « Use of the regularization method in non-linear problems ». In : *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* 5.3, p. 93-107. DOI : 10.1016/0041-5553(65)90150-3 (cf. p. 46).
- Tombette, M., E. Quentric, D. Quélo, J. Benoit, A. Mathieu, I. Korsakissok et D. Didier (2014). « C3X : a software platform for assessing the consequences of an accidental release

- of radioactivity into the atmosphere ». In : *Poster Presented at Fourth European IRPA Congress*, p. 23-27 (cf. p. 26).
- Troen, I. B. et L. Mahrt (1986). « A simple model of the atmospheric boundary layer ; sensitivity to surface evaporation ». In : *Boundary-Layer Meteorology* 37.1, p. 129-148. DOI : 10.1007/BF00122760 (cf. p. 29, 154, 174, 217).
- Tsagris, M., C. Beneki et H. Hassani (2014). « On the folded normal distribution ». In : *Mathematics* 2.1, p. 12-28. DOI : 10.3390/math2010012 (cf. p. 63).
- UNSCEAR (2013). *Sources, Effects and Risks of Ionizing Radiation, Unscar 2013 Report Levels and Effects of Radiation Exposure Due to the Nuclear Accident After the 2011 Great East-japan Earthquake ...* (Cf. p. 214).
- Vitart, F., G. Balsamo, J. Bidlot, S. Lang, I. Tsonevsky, D. Richardson et M. Balmaseda (2019). « Use of ERA5 to Initialize Ensemble Re-forecasts ». In : *ECMWF Technical Memoranda*, p. 16 (cf. p. 78).
- Wasserman, L. (2000). « Bayesian Model Selection and Model Averaging ». In : *Journal of Mathematical Psychology* 44.1, p. 92-107. DOI : 10.1006/jmps.1999.1278 (cf. p. 183-185).
- Western, L. M., S. C. Millington, A. Benfield-Dexter et C. S. Witham (2020). « Source estimation of an unexpected release of Ruthenium-106 in 2017 using an inverse modelling approach ». In : *Journal of Environmental Radioactivity* 220-221, p. 106304. DOI : 10.1016/j.jenvrad.2020.106304 (cf. p. 77, 100).
- Winiarek, V. (2014). « Dispersion atmosphérique et modélisation inverse pour la reconstruction de sources accidentelles de polluants ». Thèse de doctorat. Université Paris-Est (cf. p. 20, 22, 25, 48).
- Winiarek, V., M. Bocquet, N. Duhanyan, Y. Roustan, O. Saunier et A. Mathieu (2014). « Estimation of the caesium-137 source term from the Fukushima Daiichi nuclear power plant using a consistent joint assimilation of air concentration and deposition observations ». In : *Atmospheric Environment* 82, p. 268-279. DOI : 10.1016/j.atmosenv.2013.10.017 (cf. p. 40, 48, 62, 123, 131, 215, 225).
- Winiarek, V., M. Bocquet, O. Saunier et A. Mathieu (2012). « Estimation of errors in the inverse modeling of accidental release of atmospheric pollutant : Application to the reconstruction of the cesium-137 and iodine-131 source terms from the Fukushima Daiichi power plant ». In : *Journal of Geophysical Research : Atmospheres* 117.D5. DOI : 10.1029/2011JD016932 (cf. p. 40, 42, 62, 123, 130, 215, 225).

-
- Winiarek, V., J. Vira, M. Bocquet, M. Sofiev et O. Saunier (2011). « Towards the operational estimation of a radiological plume using data assimilation after a radiological accidental atmospheric release ». In : *Atmospheric environment* 45.17, p. 2944-2955. DOI : 10.1016/j.atmosenv.2010.12.025 (cf. p. 48, 63).
- Wu, F., S. Bo, K. Zhao et L. Sun (2013). « Analysis and Solution of Current Zero-Crossing Distortion With Unipolar Hysteresis Current Control in Grid-Connected Inverter ». In : *Industrial Electronics, IEEE Transactions on* 60, p. 4450-4457. DOI : 10.1109/TIE.2012.2217720 (cf. p. 49).
- Yang, R., R. Drive et J. O. Berger (1998). *A Catalog of Noninformative Priors*. Technical Report 42. Duke University Department of Statistical Science., p. 44 (cf. p. 54).
- Yee, E. (2008). « Theory for Reconstruction of an Unknown Number of Contaminant Sources using Probabilistic Inference ». In : *Boundary-Layer Meteorology* 127.3, p. 359-394. DOI : 10.1007/s10546-008-9270-5 (cf. p. 58, 86, 123, 187, 236).
- Yee, E., I. Hoffman et K. Ungar (2014). « Bayesian Inference for Source Reconstruction : A Real-World Application ». In : *International Scholarly Research Notices* 2014. DOI : 10.1155/2014/507634 (cf. p. 56, 58, 123).
- Yumimoto, K., Y. Morino, T. Ohara, Y. Oura, M. Ebihara, H. Tsuruta et T. Nakajima (2016). « Inverse modeling of the ¹³⁷Cs source term of the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant accident constrained by a deposition map monitored by aircraft ». In : *Journal of Environmental Radioactivity* 164, p. 1-12. DOI : 10.1016/j.jenvrad.2016.06.018 (cf. p. 215, 225).
- Zhou, B. et J. Du (2010). « Fog Prediction from a Multimodel Mesoscale Ensemble Prediction System ». In : *Weather and Forecasting* 25.1, p. 303-322. DOI : 10.1175/2009WAF2222289.1 (cf. p. 144).

Résumé

En cas de rejet de polluants radioactifs dans l'atmosphère, une des missions des autorités est d'évaluer les conséquences de ce rejet afin de mettre en œuvre, si nécessaire, des mesures de protection des populations. Il peut s'agir d'évacuation ou de mise à l'abri à très court terme et de restrictions de consommation ou de commercialisation des denrées alimentaires contaminées à plus long terme. Pour cela, des modèles numériques sont utilisés pour simuler la dispersion des radionucléides dans l'atmosphère.

La précision des résultats obtenus à partir de ces modèles dépend fortement de la connaissance du terme source, c'est-à-dire de la localisation, de la durée, de l'ampleur du rejet ainsi que de sa distribution entre radionucléides. Or, la connaissance du terme source est généralement soumise à d'importantes incertitudes. En plus du terme source, d'autres incertitudes proviennent du modèle de transport, des champs météorologiques, des données de mesure et de la représentativité du modèle par rapport aux mesures. Dans cette thèse, nous avons développé et appliqué des méthodes de modélisation inverse permettant d'améliorer l'évaluation du terme source et de quantifier les incertitudes.

Parmi les méthodes de modélisation inverse, les approches déterministes variationnelles sont efficaces pour fournir une estimation rapide du terme source, mais la quantification des incertitudes associée à cette estimation est généralement difficile.

Nous proposons donc d'aborder le problème dans le cadre probabiliste de l'inférence bayésienne qui s'inscrit dans un formalisme permettant d'obtenir une évaluation plus complète des incertitudes. Plusieurs méthodes d'échantillonnage de Monte Carlo à chaîne de Markov (MCMC) sont mises en œuvre afin de reconstruire les variables décrivant la source : l'algorithme de Metropolis Hastings, l'algorithme du parallel tempering et enfin le Reversible-Jump MCMC.

Ces algorithmes sont tout d'abord appliqués et validés sur l'évènement de détection de ruthénium 106 survenu en Europe à l'automne 2017. Les densités de probabilité des variables de la source sont reconstruites afin d'identifier l'origine géographique des détections ainsi que les quantités de ruthénium 106 rejetées dans l'atmosphère. Puis, dans un second temps, plusieurs méthodes sont développées afin d'incorporer et de quantifier différentes sources d'erreurs au sein du problème bayésien et ainsi permettre une meilleure reconstruction de la distribution du rejet.

Le second cas d'étude est dédié à l'accident de Fukushima-Daiichi qui a conduit à des rejets longs associés à une cinétique variable dans le temps. La reconstruction de ces rejets aux caractéristiques plus complexes a nécessité le développement d'un nouvel algorithme MCMC, le Reversible-Jump MCMC, qui a été adapté à partir des méthodes d'échantillonnage précédentes. Appliqué au cas de Fukushima-Daiichi, le Reversible-Jump MCMC montre sa capacité à échantillonner plus finement et plus efficacement la distribution du terme source et des incertitudes.

Mots-clés : source, bayésien, radionucléides, échantillonnage, incertitudes, dispersion, inverse

Abstract

In the event of a release of radioactive pollutants into the atmosphere, one of the missions of the authorities is to evaluate the consequences of this release in order to implement, if necessary, measures to protect the population. These may include evacuation or sheltering in the very short term, and restrictions on the consumption or marketing of contaminated foodstuffs in the longer term. For this purpose, numerical models are used to simulate the dispersion of radionuclides in the atmosphere.

The accuracy of the results obtained from these models strongly depends on the knowledge of the source term, i.e., the location, duration and magnitude of the release as well as its distribution between radionuclides. However, knowledge of the source term is generally subject to significant uncertainties. In addition to the source term, other uncertainties arise from the transport model, meteorological fields, measurement data and the representativeness of the model with respect to the measurements.

In this PhD, we have developed and applied inverse modelling methods to improve the evaluation of the source term and to quantify the uncertainties.

Among the inverse modelling methods, variational deterministic approaches are effective in providing a rapid estimate of the source term, but the quantification of uncertainties associated with this estimate is generally difficult.

We therefore propose to address the problem within the probabilistic framework of Bayesian inference, which is part of a formalism that allows a more complete assessment of uncertainties. Several Markov chain Monte Carlo (MCMC) sampling methods are implemented in order to reconstruct the variables describing the source : the Metropolis Hastings algorithm, the parallel tempering algorithm and finally the Reversible-Jump MCMC.

These algorithms are first applied and validated on the ruthenium 106 detection event that occurred in Europe in the fall of 2017. The probability densities of the source variables are reconstructed in order to identify the geographical origin of the detections as well as the quantities of ruthenium 106 released into the atmosphere. Then, in a second step, several methods are developed in order to incorporate and quantify different sources of errors within the Bayesian problem and thus enable us to obtain a better reconstruction of the distribution of the release.

The second case study is dedicated to the Fukushima-Daiichi plant accident which led to long releases associated with time-varying kinetics. The reconstruction of these releases with more complex characteristics required the development of a new MCMC algorithm, the Reversible-Jump MCMC, which was adapted from previous sampling methods. Applied to the Fukushima-Daiichi case, the Reversible-Jump MCMC shows its ability to sample more finely and efficiently the distribution of the source term and uncertainties.

Keywords : source, bayesian, radionuclides, sampling, uncertainties, dispersion, inverse