

MÉTAMODÉLISATION D'UN PHÉNOMÈNE COUPLÉ

Sophie Marque-Pucheu^{1,2}, Guillaume Perrin¹, and Josselin Garnier³

¹ *CEA DAM DIF, F-91297, Arpajon, France*

² *Laboratoire de Probabilités et Modèles Aléatoires, Laboratoire Jacques-Louis Lions, Université Paris Diderot, 75205 Paris Cedex 13, France*

³ *Centre de Mathématiques Appliquées, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, France*

sophie.marque-pucheu@cea.fr

guillaume.perrin2@cea.fr

josselin.garnier@polytechnique.edu

Résumé.

Profitant de l'accroissement des puissances de calcul disponibles et de progrès importants en modélisation des phénomènes physiques, la simulation numérique s'impose actuellement comme un outil majeur pour la conception, l'optimisation et la certification de systèmes mécaniques de plus en plus complexes. Pour garantir un rôle prédictif pour la simulation, il est alors primordial de pouvoir associer à tout résultat de simulation une confiance de prédiction, qui intègre l'ensemble des sources d'incertitudes. Cette problématique a déjà fait l'objet de travaux qui concernent principalement le cas d'un unique phénomène. Dans cette présentation nous nous intéressons principalement au cas de deux phénomènes couplés. Deux phénomènes sont couplés lorsque la sortie du premier phénomène est une entrée du second phénomène. Cette sortie peut être scalaire, vectorielle ou de grande dimension.

Des méthodes de métamodélisation d'un phénomène couplé sont proposées pour le cas d'un couplage par une variable scalaire. Les résultats obtenus sont ensuite étendus au cas d'un couplage par une variable fonctionnelle.

Les méthodes proposées sont finalement appliquées à des exemples numériques.

Mots-clés. Sortie fonctionnelle, entrée fonctionnelle, processus gaussien, métamodélisation, inférence bayésienne, plans d'expériences, propagation d'incertitudes, codes couplés

Abstract.

Simulation has an increasing role for the conception, the optimization and the risk analysis of complex systems. Computer codes modelling the complex system are thus introduced. However the computational cost of a single run of the computer code can be high. Surrogate models are therefore introduced.

In this work the aim is to analyse the behaviour of a complex phenomenon which can be decomposed in two nested phenomena, that means that the output of the first

phenomenon is an input of the second phenomenon. This output can be a scalar, a vector or a functional.

We propose methods to surrogate a nested code coupled by a scalar. The results are then generalized to the case of a nested phenomenon coupled by a functional.

The proposed methods are then applied to examples.

Keywords. Functional output, functional input, Gaussian process, metamodelling, Bayesian inference, computer experiments, uncertainty quantification, nested computer models

1 Métamodélisation d'un phénomène couplé par une variable scalaire

Les phénomènes modélisés par la simulation numérique sont de plus en plus complexes et font parfois intervenir des phénomènes multiphysiques. Dans ce travail on s'intéresse plus particulièrement au cas de deux phénomènes couplés. On parle de phénomènes couplés lorsque la sortie du premier phénomène est une entrée du second phénomène. Cette sortie peut être scalaire, vectorielle ou de grande dimension.

La métamodélisation d'un code à sortie scalaire a fait l'objet de nombreux travaux (Sacks et al. [1989], Santner et al. [2003]), mais les résultats présentés concernent généralement un unique phénomène.

Dans le cadre de ce travail, nous présentons dans un premier temps les résultats obtenus concernant la métamodélisation d'un phénomène couplé par une variable scalaire. En particulier, l'intérêt de prendre en compte la structure emboîtée du phénomène couplé est illustrée par une comparaison avec le cas où le phénomène couplé est considéré comme un unique phénomène. Trois méthodes sont proposées : la première est basée sur l'agrégation de deux métamodèles construits séparément pour les phénomènes 1 et 2, les deux suivantes sont basées sur une linéarisation du phénomène couplé avant ou après construction du métamodèle du phénomène 1. Les méthodes linéarisées permettent d'obtenir un métamodèle de type processus gaussien pour le phénomène couplé.

Concernant les observations disponibles elles peuvent être de trois types : les observations des phénomènes 1, 2 ou couplé. Les méthodes linéarisées permettent de prendre en compte tous les types d'observations possibles. Des méthodes d'amélioration séquentielle sont donc proposées pour enrichir le jeu d'observations initial tout en optimisant le budget calcul. Ces méthodes consistent à rajouter des observations sur les phénomènes 1 ou 2 dans le but d'améliorer la performance de prédiction du phénomène couplé, exploitant ainsi la structure emboîtée du phénomène étudié.

2 Métamodélisation d'un phénomène à sortie temporelle et entrée scalaires et/ou fonctionnelles

Concernant le cas d'un code à sortie multidimensionnelle, Higdon et al. [2008] proposent dans un premier temps de réduire la dimension de la sortie à l'aide d'une analyse en composantes principales puis de construire un prédicteur pour chacun des éléments de la sortie de dimension réduite. Bayarri et al. [2007] utilisent une base d'ondelettes pour modéliser une sortie temporelle. Conti et O'Hagan [2010] comparent plusieurs méthodes de métamodélisation par processus gaussien pour une sortie temporelle. Morris [2012] propose une méthode pour construire des métamodèles par processus gaussien dans le cas d'un code à entrée et sortie temporelles.

Dans le cas d'un couplage entre deux phénomènes, le fait de réduire la dimension de la variable intermédiaire par projection sur une base de composantes principales ou d'ondelettes n'est pas forcément une approche adéquate car les composantes considérées comme négligeable peuvent être celles qui ont le plus d'impact sur la sortie du second code et l'incertitude associée à cette projection n'est pas quantifiée. Ce type d'approche ne sera donc pas retenue dans notre cadre de travail.

L'approche proposée par Conti et O'Hagan [2010] répond mieux à cette problématique car elle choisit d'utiliser une métamodélisation par processus gaussien qui permet de quantifier les incertitudes de prédiction du métamodèle. Toutefois la méthode proposée nécessite, pour avoir des matrices de covariance définies positives, que le nombre d'observations en temps soit inférieur au nombre d'observations sur l'espace d'entrée du code à sortie temporelle. Cette condition n'est pas remplie lorsqu'il y a peu de réalisations d'une sortie temporelle : dans ce cas le nombre d'observations temporelles est très largement supérieur au nombre d'observations sur l'espace d'entrée. Cette dernière configuration correspondant plus à notre problématique, cette méthode de calcul de la matrice de covariance ne sera donc pas retenue.

Dans le cadre de ce travail nous proposons une approche de type métamodélisation par processus gaussien d'un code à entrées scalaires et sortie fonctionnelle. L'approche proposée s'attache en particulier à définir une structure de covariance qui soit définie positive et qui permette de réduire les coûts de calcul liés à la grande dimension de la sortie du code.

Dans le cas d'un code à entrée et sortie temporelles, l'approche proposée par Morris [2012] repose également sur la métamodélisation par processus gaussien, mais elle nécessite la construction d'un métamodèle distinct pour chaque temps.

Par un choix adapté pour la définition de la distance entre deux entrées fonctionnelles et de la structure de covariance, nous proposons une méthode pour construire un unique métamodèle par processus gaussien d'une sortie temporelle d'un code à entrées scalaires et temporelle.

3 Métamodélisation d'un phénomène couplé par une variable de grande dimension

Après avoir proposé des méthodes de métamodélisation par processus gaussien pour chacun des deux phénomènes couplés par une variable fonctionnelle, nous proposons une approche pour étendre les résultats obtenus précédemment pour deux phénomènes couplés par une variable scalaire au cas d'un couplage de deux phénomènes par une variable fonctionnelle.

Les méthodes proposées sont ensuite appliquées sur des exemples analytiques et un cas test consistant en un couplage d'un code d'hydrodynamique avec un code de balistique.

Références

- Bayarri, M. J. et Berger, J. O. et Cafeo, J. et Garcia-Donato, G. et Liu, F. et Palomo, J. et Parthasarathy, R. J. et Paulo, R. J. S. , et Walsh, D. . Computer model validation with functional output. *The Annals of Statistics*, 35(5) :1874–1906, 2007.
- Conti, S. et O'Hagan, A. . Bayesian emulation of complex multi-output and dynamic computer models. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 140 :640–651, 2010.
- Higdon, D. et Gattiker, J. et Williams, B. , et Rightley, M. . Computer model calibration using high-dimensional output. *journal of the american statistical association*. 103 : 570–583, 2008.
- Morris, M. D. . Gaussian surrogates for computer models with time-varying inputs and outputs. *Technometrics*, 54(1) :42–50, 2012.
- Sacks, J. et Welch, W. et Mitchell, T. J. , et Wynn, H. P. . Design and Analysis of Computer Experiments. *Stat. Sci.*, 4 :409–435, 1989.
- Santner, T. J. et Williams, B. J. , et Notz, W. . *The design and analysis of computer experiments*. Springer series in statistics. Springer, New York, 2003.