



HAL
open science

Modélisation de simulateurs industriels multifidélités : apport d'une approche bayésienne globale.

Céline Helbert

► **To cite this version:**

Céline Helbert. Modélisation de simulateurs industriels multifidélités : apport d'une approche bayésienne globale.. Journée de Statistique de la SFDS, May 2013, France. pp.75. hal-00967489

HAL Id: hal-00967489

<https://hal.science/hal-00967489>

Submitted on 28 Mar 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

MODELISATION DE SIMULATEURS INDUSTRIELS « MULTIFIDELITES » : APPORT D'UNE APPROCHE BAYESIENNE GLOBALE.

Céline Helbert

Ecole Centrale de Lyon, 36 av. Guy De Collongue, 69100 Ecully , celine.helbert@ec-lyon.fr

Résumé. Les grands codes de calcul industriels sont aujourd'hui largement utilisés pour représenter des systèmes physico-chimiques complexes. La compréhension du phénomène réel passe alors par l'étude de ces simulateurs industriels. La difficulté vient alors de la complexité de ces codes et de leur coût élevé en temps calcul. Dans notre travail, nous nous intéressons à des sorties de code de calcul qui peuvent être obtenues avec différents niveaux de fidélités. Des simulations peu coûteuses en temps calcul mais potentiellement moins représentatives du phénomène modélisé peuvent par exemple être obtenues en dégradant le schéma numérique. L'objectif de cet exposé est de présenter deux modélisations différentes qui permettent d'intégrer plusieurs niveaux de fidélité de la réponse étudiée. Nous commencerons par montrer sur un exemple comment l'information apportée par des simulations dégradées peut être intégrée au sein de la loi a priori du krigeage et permettre une nette amélioration de la qualité de la prédiction. Plus généralement, nous montrerons que l'approche bayésienne est plus pertinente que l'approche classique pour des études de propagation d'incertitude, d'analyse de sensibilité ou d'optimisation globale basée sur la variance. Ce point sera illustré sur 3 études de cas issues de domaines industriels différents. Ensuite, nous présenterons l'approche « multifidélités » alternative basée sur le modèle de co-krigeage de Kennedy et O'Hagan et largement développée ces dernières années. De plus, nous proposerons quelques pistes d'amélioration du modèle. Enfin nous comparerons ces deux modélisations « multifidélités » sur une étude de cas issue du domaine pétrolier.

Mots-clés. Plans d'expériences numériques, krigeage, co-krigeage, krigeage bayésien, propagation d'incertitude.

Summary. Large industrial design codes are widely used today to represent complex physical systems. The understanding of the real phenomenon then passes through the study of these industrial simulators. The difficulty comes from the complexity of these codes and their high cost in computation time. In our work, we focus on the outputs of computer code that can be obtained with different levels of fidelity. Cheap simulations but potentially less representative can for example be obtained by degrading the numerical scheme. The objective of this paper is to present two different models that integrate multiple levels of fidelity of the studied response. We start by showing an example of how the information provided by degraded simulations can be integrated within the prior kriging and allow a significant improvement in the quality of the prediction. More generally, we show that the Bayesian approach is more relevant than the classical approach for uncertainty quantification, sensitivity analysis and global optimization. This point will be illustrated in three case studies from different industrial fields. Then we present the alternative model based on cokriging extensively developed in recent years. We suggest some ways to improve the model and we compare these two models on a petrol case study.

Keywords. Computer experiments, Kriging, Co-kriging, Bayesian kriging, uncertainty quantification.

1 Introduction

Le modèle de krigeage ([1]) ou encore modèle par processus Gaussiens, est très largement utilisé pour représenter la réponse de simulateurs numériques. En effet, d'une part il s'agit d'un modèle d'interpolation qui correspond bien à une réponse numérique, le plus souvent sans variance de répétabilité et d'autre part la variance de krigeage quantifie bien l'absence ou la présence d'observations dans la zone prédiction en question. L'article de Helbert et al ([2]) montre cependant que la variance de krigeage universel est souvent sous estimée. Ceci s'explique par la non prise en compte de l'incertitude due à l'estimation des paramètres de portée. Or les études de propagation d'incertitudes, d'analyse de sensibilité ([3]) ou encore d'optimisation globale de type EGO ([4]) se basent directement sur la variance de krigeage. Une mauvaise estimation de la variance n'est pas anodine.

D'autre part, les simulateurs industriels étant de plus en plus complexes, le nombre de simulations disponibles est de plus en plus réduit, la prédiction est alors très approximative. Depuis 10 ans les travaux, notamment ceux de Kennedy et O'Hagan [5] et Forrester et al [6], portent sur l'intégration de simulations à différents niveaux de fidélités. Des simulations « basse fidélité », c'est-à-dire potentiellement moins représentatives du phénomène modélisé, peuvent être obtenues en dégradant le schéma numérique. Ces simulations sont alors beaucoup moins onéreuses en tant de calcul. L'intégration de ces simulations permet de diminuer la variance de krigeage.

L'objectif de ce travail est de montrer que l'approche bayésienne « globale », intégrant notamment une loi a priori sur les paramètres de portées, permet de prendre en compte toutes les sources d'incertitudes, l'intervalle de prédiction annoncé est alors beaucoup plus fiable. Cette approche permet également d'intégrer l'information apportée par des simulations dégradées et rapides. Cette approche bayésienne sera comparée au modèle autorégressif de Kennedy permettant également de prendre en compte l'information apportée par des simulations dégradées.

2 L'approche bayésienne globale pour des simulations multifidélités

L'approche bayésienne globale du krigeage permet de voir le modèle comme un mélange de processus gaussiens selon la loi a posteriori des paramètres. La loi a posteriori de la réponse n'est alors plus gaussienne, l'intervalle de prédiction à 95% n'a plus aucune raison d'être symétrique. Dans ce travail, nous mettons en place le krigeage bayésien sur trois études de cas où nous quantifions l'apport du bayésien sur la qualité de prédiction :

- La première étude concerne la sûreté nucléaire lors du transport d'un assemblage de battons d'uranium. Le problème contient 3 variables d'entrées. La réponse est scalaire, il s'agit du coefficient de criticité neutronique. Le plan d'expériences est un « space filling design » à 100 points. Le plan de test est une grille à 1331 points. L'information a priori est non informative. Dans ce cas d'étude, aucune information d'expert ou d'information liée à des simulations dégradées n'est disponible.
- La deuxième étude concerne la conception d'un filtre optique à fines couches. Les variables d'entrée sont les indices optiques des 13 couches et la variable de sortie correspond à la distance à un profil spectral de transmission théorique. Le plan d'expériences est un plan de type « space filling design » à 260 points et le plan de test contient 1500 points. Dans ce cas d'étude, aucune information d'expert n'est disponible.
- La dernière étude est issue de l'ingénierie de réservoir dans le domaine pétrolier. Les entrées sont la porosité et deux coefficients de perméabilités. La réponse est la production total d'hydrocarbure. Le plan d'expériences est constitué d'une vingtaine de points et le plan test de 1331 points. Dans cette étude, le schéma numérique peut être dégradé pour diminuer le temps de simulation. Nous disposons donc d'une potentielle information a priori apportée par les simulations dégradées ([2]).

Dans la première étude, nous pouvons visualiser sur la Figure 1 la loi a posteriori des paramètres de corrélation du noyau gaussien utilisé pour le krigeage. Cette loi a posteriori est trimodale. La loi a priori étant non informative les trois modes, centres des sous populations représentées en différentes couleurs sur la Figure 2, correspondent aux minima locaux de la vraisemblance. L'information apportée par cette distribution est donc beaucoup plus riche que le theta « plug in » utilisé habituellement.

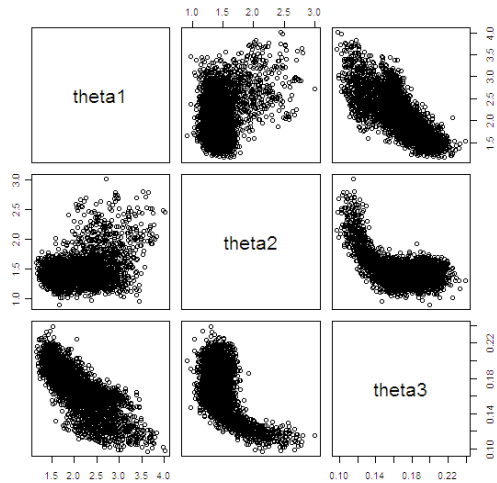


Figure 1 Projection en 2D d'un échantillon de la loi a posteriori des paramètres de corrélation du noyau gaussien. Cas d'étude numéro 1, sureté nucléaire.

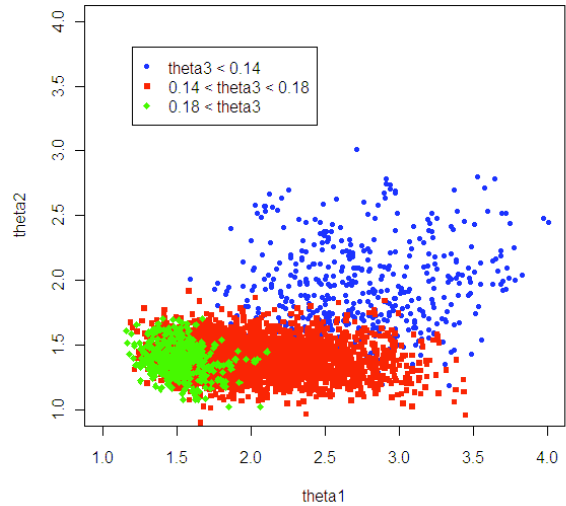


Figure 2 Projection sur (theta1, theta2) d'un échantillon de la loi a posteriori des paramètres de corrélation du noyau gaussien. Cas d'étude numéro 1, sureté nucléaire.

Les résultats sont les suivants :

- Dans les trois cas, avec une loi a priori non informative, le niveau effectif de l'intervalle de prédiction à 95%, toujours inférieur à 95%, est plus proche du niveau attendu avec une approche bayésienne.
- Dans le dernier cas, la loi a priori informative obtenue à l'aide des simulations dégradées permet d'améliorer la qualité globale de la prédiction et également le niveau effectif de l'intervalle de prédiction.

3 Le modèle autorégressif

Une approche alternative pour intégrer l'information apportée par les simulations dégradées consiste à supposer explicitement un modèle de dépendance entre la réponse haute fidélité et celle basse fidélité.

Le modèle largement utilisé ces dernières années, et qui a connu de nombreuses améliorations et complexifications, est le modèle suivant proposé par Kennedy ([5]) :

$$Y_h(x) = rY_b(x) + Z(x)$$

- où « h » caractérise la réponse à haute fidélité, « b » la réponse à basse fidélité,
- où $Z(x)$ et $Y_b(x)$ sont des processus gaussiens indépendants ayant leur propre moyenne et covariance.
- où r est un paramètre scalaire

Ce modèle permet d'exprimer que Y_h peut être expliquée en partie avec un terme linéaire en Y_b complété par un terme indépendant de Y_b .

L'estimation des paramètres de ce modèle a été largement développée par plusieurs auteurs (Qian et al [7], Le Gratiet [8]), chacun apportant quelques améliorations permettant d'assouplir l'utilisation du modèle.

Dans ce travail nous proposons d'estimer le modèle ci-dessus sur les simulations d'écoulement présentées dans la section précédente. Nous montrons notamment comment rendre l'estimation des paramètres possibles quand les plans d'expériences ne coïncident pas entre les deux niveaux de fidélités des réponses. Enfin nous comparons l'approche bayésienne globale à cette approche autorégressive.

Bibliographie

- [1] Santner, T. (2003), *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Berlin: Springer. ISBN 0-387-95420-1.
- [2] Helbert, C., Dupuy, D., Carraro, L. , Assessment of uncertainty in computer experiments, from Universal to Bayesian Kriging , *Applied Stochastic Models for Business and Industry*, 25 (2), 2009, 99-113.
- [3] Saltelli, A.; Ratto, M.; Andres, T.; Campolongo, F.; Cariboni, J.; Gatelli, D.; Saisana, M.; Tarantola, S., *Global sensitivity analysis. The primer*. John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, 2008. xii+292 pp. ISBN: 978-0-470-05997-5.
- [4] Ginsbourger, D., Helbert, C., Carraro, L. , Discrete Mixtures of Kernels for Kriging-based optimization , *Quality and Reliability Engineering International*, 24 (6), 2008, 681-691.
- [5] Kennedy, M. and O'Hagan, A. (2000). Predicting the output from a complex computer code when fast approximations are available. *Biometrika*, (87):1-13.
- [6] Forrester, A. I. J., Bressloff. N. W., and Keane, A. J. (2006), Optimization using surrogate models and partially converged computational uid dynamics simulations. *Proc. R. Soc. A*, 462(2071).
- [7] Qian, Z., Seepersad, C. C., Joseph, V. R., Allen, J. K. and Wu, C. F. J. (2006), Building Surrogate Models Based on Detailed and Approximate Simualtions, *ASME Journal of Mechanical Design*, 128, 668-677.
- [8] Loic Le Gratiet. Bayesian analysis of hierarchical multi-_delity codes. *Proceedings of the Royal Society A* , pages RSPA2011, 0742, December 2011.