



HAL
open science

Planification adaptative d'expériences numériques par paquets en contexte non stationnaire pour une étude de fissuration mécanique

Sébastien Marmin, Jean Baccou, Frédéric Péralès, David Ginsbourger,
Jacques Liandrat

► To cite this version:

Sébastien Marmin, Jean Baccou, Frédéric Péralès, David Ginsbourger, Jacques Liandrat. Planification adaptative d'expériences numériques par paquets en contexte non stationnaire pour une étude de fissuration mécanique. CFM 2017 - 23ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2017, Lille, France. hal-03465802

HAL Id: hal-03465802

<https://hal.science/hal-03465802>

Submitted on 3 Dec 2021

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.

Planification adaptative d'expériences numériques par paquets en contexte non-stationnaire pour une étude de fissuration mécanique

S. MARMIN^{a,c,e}, J. BACCOU^{a,b}, F. PERALES^{a,b}, D. GINSBOURGER^{d,c},
J. LIANDRAT^e

- a. Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, B.P. 3, 13115 Saint-Paul-Lez-Durance, France,
{sebastien.marmin, jean.baccou, frederic.perales}@irsn.fr
- b. Laboratoire de Micromécanique et d'Intégrité des Structures, IRSN-CNRS-UM, B.P. 3, 13115
Saint-Paul-Lez-Durance, France
- c. IMSV, Dép. de Mathématiques et de Statistiques, Alpeneggstrasse 22, 3012 Berne, Suisse
- d. IDIAP, Centre du Parc, rue Marconi 19, PO Box 592, CH - 1920 Martigny, Suisse,
ginsbourger@idiap.ch
- e. Centrale Marseille, I2M, UMR 7373, CNRS, Université Aix-Marseille, 13453 Marseille, France,
jacques.liandrat@centrale-marseille.fr

Résumé : *La prise en compte des incertitudes fait aujourd'hui partie intégrante des analyses de risque industriel, en particulier dans le domaine de la mécanique des matériaux et des structures. Il s'agit notamment de savoir si les variations des paramètres d'entrée d'un code de calcul ne peuvent pas faire basculer le système vers un comportement très différent de celui obtenu quand les paramètres sont fixés à leur valeur de référence (présence de saut ou de forts gradients dans la réponse). Pour cela, des méthodes de planification d'expériences à base de processus gaussiens peuvent être utilisées. Toutefois, elles reposent le plus souvent sur une hypothèse de stationnarité et sur un critère de planification qui ne dépend pas de la réponse, conduisant à une exploration globale de l'espace d'entrée sans favoriser les régions de fortes variations. Afin de contourner ces limitations, un nouveau modèle de processus gaussien non stationnaire a été développé dans [1]. Il est rappelé ici et couplés avec une stratégie d'ajout de points par paquet dans l'algorithme de planification afin de réduire le coût numérique pour des applications industrielles. Ces nouvelles méthodes sont validées et comparées avec des approches classiques sur la fissuration d'un matériau biphasé dans le cadre des activités de l'IRSN au sein du laboratoire commun MIST.*

Abstract : *Taking uncertainties into account is a key step in industrial risk analysis, especially in problems involving complex mechanical computer codes. It is for example crucial to ensure that the modifications of input parameter values cannot move a system towards conditions that are very different from reference ones (presence of discontinuity or strong gradients in the code response). Design of experiments coupled with Gaussian process models can be used to get quantitative insight on the behavior of a system response. However, standard approaches rely on stationary Gaussian process*

modeling and on response-independent infill criteria that lead to a global exploration of the input space without favouring regions of high variations. To circumvent these limitations, a new gaussian process model has been introduced in [1]. It is recalled in this paper and coupled with a numerical strategy to add batch of points in the design in order to reduce the computational cost for industrial studies. These new developments are finally applied and compared with classical approaches on a mechanical test case in the frame of the IRSN-CNRS-UM MIST lab activity.

Mots clefs : plans d'expériences numériques, processus gaussiens, parallélisation, matériaux bi-phasé.

1 Introduction

Nous nous intéressons à la planification d'expériences pour des codes de calculs à évaluation coûteuse et ayant un comportement très hétérogène sur leur espace de variation. Le traitement de telles données intervient dans la compréhension de beaucoup de phénomènes en analyse de risques. C'est le cas par exemple en mécanique du vieillissement de matériaux hétérogènes tels que les bétons des centrales nucléaires quand il s'agit de prendre en compte les incertitudes intervenant dans les codes de calcul complexes utilisés. En effet, la modification des valeurs prises par certains paramètres d'entrée (relatifs à la géométrie des phases de la microstructure ou à leur propriété mécanique par exemple) peut faire basculer le système dans un état où le comportement de la réponse mécanique d'intérêt est très différent de celui de référence. La figure 1 en donne une illustration issue du cas d'étude traité dans ce papier et décrit dans la section 4.

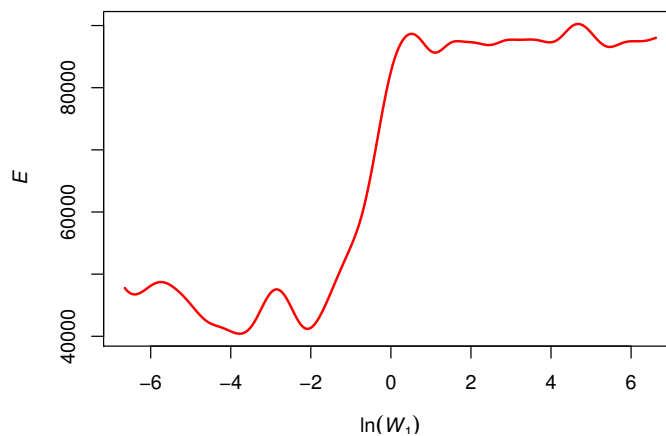


FIGURE 1 – Exemple d'évolution de l'énergie de rupture en fonction d'un paramètre mécanique contrôlant le trajet d'une fissure au sein d'un matériau bi-phasé soumis à une traction verticale.

On observe que la réponse varie de manière abrupte sur l'intervalle $[-2, 1]$ comparé aux variations observées dans les autres régions du domaine.

Parmi les méthodes de construction de plans d'expériences, les approches à base de processus gaussiens ont démontré leur efficacité pour approximer des codes de calculs dans des problèmes à budget de simulations limité ([2], [3]). En effet, elles conduisent à une sélection de nouvelles expériences dans des

zones pertinentes de l'espace de variation de la réponse du code via l'optimisation d'un critère de planification. Ces approches s'opposent à des planifications plus directes, « non adaptative », qui répartiraient dans l'espace d'entrée tous les points d'évaluations disponibles *avant* de commencer les expériences.

L'approximation par Processus Gaussien (PG) est le plus souvent basée sur l'hypothèse que les données à modéliser sont issues d'une réalisation d'un processus stationnaire (i.e. le comportement de la fonction est supposé homogène sur l'espace des variables). Si le comportement de la réponse est très hétérogène, cette hypothèse peut altérer la qualité de l'approximation, et notamment des (co)variances de prédiction associées. De plus, bien que les critères classiques de type MSE et IMSE [4], basés sur la variance du PG, favorisent l'évaluation dans des zones de l'espace qui ont été moins explorés (dans un sens défini par le noyau de covariance), ils ne permettent pas de concentrer les évaluations dans les zones où la réponse varie fortement.

Pour contourner ces limitations, des développements méthodologiques ont été réalisés e.g. dans [1]. Ils consistent entre autres à introduire une nouvelle classe de modèles de processus gaussiens non stationnaires. À partir de ces développements, ce papier vise d'une part à étendre cette méthode dans le cas multipoint, c'est à dire à évaluer la fonction par paquet de points pour pouvoir bénéficier des avantages du calcul parallèle, et d'autre part à comparer différentes stratégies de planification dans un contexte industriel avec des expériences coûteuses.

Après un bref résumé sur la méthodologie, c'est-à-dire la planification d'expériences à l'aide de processus gaussiens (section 2), et la nouvelle classe de processus gaussiens non stationnaires, nous exposerons les tests mis en œuvres. Dans la section section 3, la stratégie de parallélisation employée basée sur un critère d'entropie se calculant en termes de déterminant de la matrice de covariance conditionnelle permet de réduire le temps de calcul de l'étude. Tous ces développements sont enfin appliqués dans la section 4 à la prise en compte des incertitudes dans un problème de fissuration mécanique d'un matériau hétérogène.

2 Processus gaussiens pour la planification séquentielle d'expériences

À partir d'une fonction objectif (un code de calcul par exemple) $f : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}$, la construction d'un plan d'expériences séquentielle nécessite ici de modéliser f avec peu d'observations dans un premier temps. Ensuite, on dépense progressivement le reste du budget en s'appuyant sur un critère de planification qui détermine au mieux les prochaines évaluations à partir du modèle (voir le pseudo algorithme 2.1).

Algorithme 2.1

- Obtenir $\mathbf{y}_{k_0} = (f(\mathbf{x}_i))_{i=1,\dots,k_0}$, les valeurs évaluées sur un plan d'expériences initial $X_{1:k_0} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k_0}\}$.
- Construire un modèle $\mathcal{M}_l \leftarrow \mathcal{M}(\mathbf{y}_{k_0}, X_{1:k_0})$ à partir de ces données.

– Déterminer un nombre d'étapes p et un nombre d'évaluation par étape q .

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pour chaque étape } i \text{ de } 0 \text{ à } p-1, \\ - \text{Trouver des nouveaux points } X_{1:q}^* \text{ qui optimisent, pour } X \in \mathcal{D}^q, \text{ le critère } J^{\mathcal{M}_i}(X) \\ - \text{Évaluer les nouvelles observations } \mathbf{y}^* \text{ en } X_{1:q}^*, \\ - \text{Mettre à jour les données : } X_{1:(k_0+q(i+1))} = X_{1:(k_0+qi)} \cup X_{1:q}^*, \mathbf{y}_{k_0+q(i+1)} = \mathbf{y}_{k_0+qi} \cup \mathbf{y}^*, \\ - \text{Mettre à jour le modèle avec les nouvelles données : } \mathcal{M}_{i+1} \leftarrow \mathcal{M}(\mathbf{y}_{k_0+q(i+1)}, X_{1:(k_0+q(i+1))}). \end{array} \right.$$

– Fin.

La modélisation s'appuie ici sur l'utilisation de processus gaussiens. Cette approche est très répandue dans la communauté des *Computer Experiments* et présente de nombreux avantages. Elle est suffisamment flexible pour intégrer des caractéristiques mathématiques de la réponse de la fonction objectif, comme la régularité, les invariances, etc. Par son cadre statistique, elle donne en outre la possibilité de mesurer a priori, i.e. avant évaluation, l'effet de l'ajout d'un point dans le plan sur la qualité d'approximation.

Un processus gaussien est le plus souvent déterminé après la paramétrisation de sa covariance, puis l'optimisation de ses hyper-paramètres selon la fonction de vraisemblance. Conditionner un processus Y , de moyenne et de covariance *a priori* $\mu(\cdot)$ et $C(\cdot)$, à un ensemble de n observations $\mathcal{A}_n = \{Y(\mathbf{x}_1) = y_1, \dots, Y(\mathbf{x}_n) = y_n\}$ donne un PG *a posteriori* $\mathcal{GP}(\mu_n, C_n)$. Les fonctions de moyennes et de covariance μ_n et C_n définissent le modèle et se calculent de manière analytique. L'approximation par processus gaussien est basée le plus souvent sur l'hypothèse que les données à modéliser sont issues d'une réalisation d'un processus à covariance stationnaire (i.e. la covariance entre $Y(\mathbf{x})$ et $Y(\mathbf{x}')$ ne dépend que de la différence $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$). Si le comportement de la réponse est très hétérogène en espace comme sur la figure 1, l'hypothèse de stationnarité peut altérer la fiabilité du modèle.

Il existe de nombreuses façons de construire un processus non stationnaire. On peut mentionner par exemple les méthodes de convolution [5] ou de processus gaussiens déformés [6]. C'est cette dernière stratégie qui a été retenue dans ce papier. Dans ce cas, la covariance non stationnaire est obtenue par composition d'une covariance stationnaire avec une transformation (ou déformation). Pour simplifier l'identification de cette transformation, cette dernière est paramétrée. Toutefois, les méthodes d'estimation des paramètres [7] requièrent beaucoup d'observations afin de capturer les non-stationnarités. Pour contourner cette limitation, des approches à base de tensorisation de la covariance ont été proposées [8] mais elles ne sont pas optimales pour s'adapter à des orientations quelconques de déformation. On renvoie à [1] pour quelques illustrations de ces limitations.

Une nouvelle classe de covariances non stationnaires a donc été construite tout en restant suffisamment générique pour ne pas privilégier des directions de comportement non stationnaire comme c'est le cas dans [8]. Nous nous basons sur une approche de déformation non linéaire de l'espace d'entrée, qui permet de produire une covariance non stationnaire à partir d'une covariance stationnaire [13]. Plus précisément, nous proposons une déformation de l'espace des entrées, une fonction $\mathcal{T}_{A,\tau}$ de \mathcal{D} dans \mathbb{R}^r , $r \in \mathbb{N}^*$, qui s'écrit comme :

$$\mathcal{T}_{A,\tau}(\mathbf{x}) = \left(\mathcal{T}_i(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}; \tau_i) \right)_{i=1,\dots,r}^T$$

où $A = (\mathbf{a}_i^T)_{i=1,\dots,r}$ est une matrice $r \times d$, $\mathcal{T}_i(\cdot; \tau_i)$ représente une transformation unidimensionnelle

paramétrée par un vecteur τ_i , et $\tau = (\tau_i)_{i=1,\dots,r}$. Ensuite la covariance peut être définie en combinant $\mathcal{T}_{A,\tau}$ avec un noyau défini positif sur \mathbb{R}^r . Nous renvoyons à [1] pour l'analyse théorique de cette covariance non-stationnaire.

3 Planification d'expériences séquentielle multipoint

Pour sélectionner $q = 1$ points à évaluer, un critère prend en entrée les coordonnées du point et donne en sortie une valeur qui juge de l'intérêt d'évaluer la fonction en ces q points. Une première façon de construire un tel critère est de se baser sur la variance de prédiction. On introduit alors le critère MSE (Mean Square Error) [4]. Il s'écrit $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}$:

$$J_n^{\text{MSE}}(\mathbf{x}) = C_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}).$$

Pour généraliser ce critère au cas multipoint avec $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_q\}$, on peut considérer la matrice $(C_n(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{i,j=1,\dots,q}$ à la place du terme de variance $C_n(\mathbf{x}, \mathbf{x})$. Il reste ensuite à déterminer un scalaire à partir de cette matrice pour définir un critère. Prendre la trace de la matrice peut donner des points d'évaluations optimal triviaux, avec $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 = \dots = \mathbf{x}_q = \mathbf{x}^*$, \mathbf{x}^* un maximiseur du MSE. Nous recherchons les coordonnées des points $X = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_q) \in \mathcal{D}^q$ qui maximisent en chaque \mathbf{x}_i l'incertitude du modèle tout en répartissant bien ces points dans \mathcal{D} . Pour à la fois obtenir des points avec de fortes variances mais suffisamment éloignés l'un de l'autre, on propose d'utiliser le déterminant. Le critère $J_n^{\text{MSE},q}$ proposé ici est donc le suivant :

$$J_n^{\text{MSE},q}(X) = \det \left((C_n(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{i,j=1,\dots,q} \right)$$

L'utilisation du déterminant amène à maximiser l'hypervolume d'un ellipsoïde d'isoprobabilité du vecteur $(Y(\mathbf{x}_1), \dots, Y(\mathbf{x}_q))^T$. Cette idée employée ici correspond à la maximisation d'entropie de Shewry et Wynn [15].

De possibles minimums locaux peuvent gêner l'optimisation du critère par montée de gradient (e.g. BFGS). On peut utiliser plusieurs X de départ tirés au hasard, par exemple parmi des plans LHS optimisés par le critère maximin, pour augmenter les chances de trouver un maximum global.

4 Application pour les études numériques de fissuration de matériaux hétérogènes

4.1 Position du problème

Le cas d'application porte sur des études de fissuration des matériaux hétérogènes dans le cadre des activités de recherche de l'IRSN effectuée au sein du laboratoire MIST (IRSN-CNRS-Université de Montpellier). Plus particulièrement, les influences de la taille des inclusions et des propriétés d'interface matrice-inclusion sur l'énergie de rupture du matériau sont étudiées. La fissuration est modélisée à l'aide de modèles de zones cohésives frottantes dans le cadre de l'approche NonSmooth Contact Dynamics [14]. L'outil numérique associé, Xper [9], permet de simuler la propagation de multifissures dans un

matériau hétérogène de l'initiation jusqu'à la prise en compte des comportements post-ruptures. L'application considérée ici est une structure périodique carrée de $2,8 \cdot 10^{-2} \text{ m}$ de côté, composée d'une matrice et de deux inclusions (FIGURE 2) soumis à un chargement homogène vertical d'intensité 10^2 s^{-1} . Une pré-fissure est située au centre du bord gauche de la structure. La matrice et les inclusions sont supposés élastiques. Le modèle cohésif utilisé est la loi MP-CZM décrite dans [14]. L'énergie cohésive des interfaces matrice-inclusion et la taille des inclusions sont des paramètres de l'étude. Les données d'entrée incertaines sont donc :

- pour la première inclusion, le rapport $w^{\text{mat-incl}} / w^{\text{incl-incl}}$ entre l'énergie surfacique de la zone cohésive d'interface matrice/inclusion (appelée énergie d'interface) et l'énergie surfacique de la zone cohésive d'interface inclusion/inclusion (appelée énergie d'inclusion),
- ce même rapport concernant la deuxième inclusion,
- le rapport entre la longueur de la première inclusion et la longueur de la structure,
- ce même rapport de longueur concernant la deuxième inclusion.

Les plages de variation sont les suivantes : Les entrées de rapport d'énergie varient entre 1, $3 \cdot 10^{-3}$ et 750. Les longueurs d'inclusion varient entre $3 \cdot 10^{-3}$ et $1 \cdot 10^{-2}$ m.

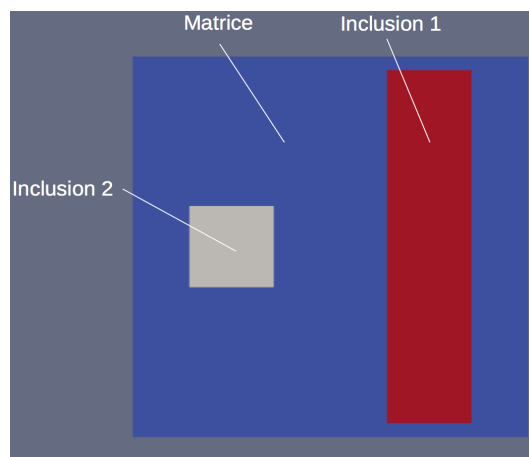


FIGURE 2 – Cas test mécanique : matériau composé d'une matrice et de deux inclusions.

Le paramètre considéré en sortie est l'énergie de rupture, c'est-à-dire l'énergie minimale nécessaire à fournir pour la perte de tenue mécanique de la structure.

Le temps moyen d'un calcul est de 2-3 jours.

La FIGURE 3 fournit une coupe bi-dimensionnelle de l'énergie de rupture pour les paramètres fixés suivants $L_1 = 1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$, $L_2 = 6 \cdot 10^{-3} \text{ m}$. Elle fait ressortir clairement plusieurs zones où le comportement de la réponse est régulier et qui correspondent à des comportements mécaniques distincts. Entre ces zones, il existe des régions de forte variation de l'énergie de rupture où plusieurs phénomènes entrent en concurrence. En effet, suivant les valeurs prises par les paramètres d'entrée, la fissure traverse ou contourne l'inclusion. L'algorithme de planification basé sur les développements décrits dans la section précédente est donc particulièrement adapté pour approcher en peu d'évaluations le comportement de la sortie d'intérêt en raffinant localement dans les régions de forte variation.

Une série de tests est menée dans la suite sur le cas bi-dimensionnel de la figure 3 pour lequel nous

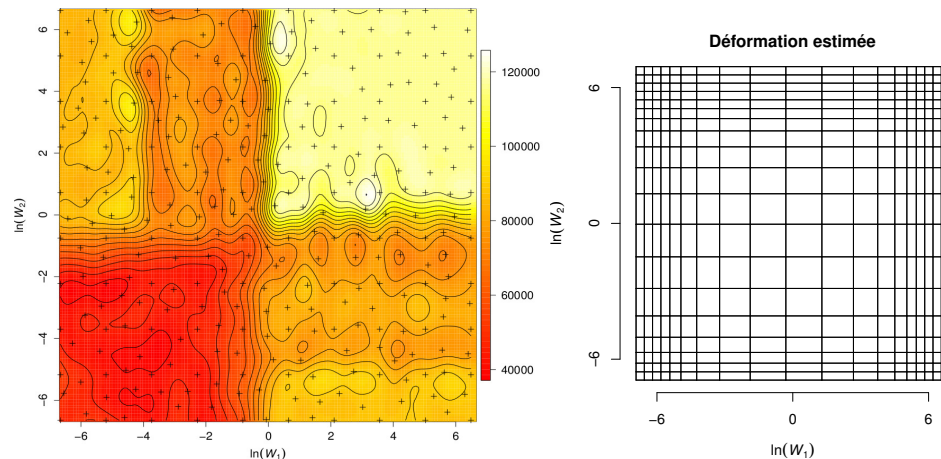


FIGURE 3 – Coupe bi-dimensionnelle (paramètres de longueur des inclusions fixés) de l'évolution de l'énergie de rupture (échelles logarithmiques pour les ratios d'énergie). Déformation estimée par le modèle non stationnaire utilisé, représentée par la déformation d'une grille orthogonale régulière.

disposons d'un grand nombre d'évaluations (298) afin de calculer une erreur de prédiction. La répartition des évaluations dans l'espace des entrées a été optimisée grâce à un plan d'expérience LHS avec pour critère de remplissage une fonction de distance maximin [10].

L'objectif est d'évaluer les performances d'une part de l'algorithme développé pour différents choix de modélisations (stationnaire ou non-stationnaire) et d'autre part de la stratégie d'ajout de points par paquet.

4.2 Résultats numériques

4.2.1 Intérêt d'une approche séquentielle et du modèle non stationnaire

Afin de mesurer dans un premier temps l'apport d'une approche adaptative, nous calculons les erreurs de prédictions obtenues avec des plans d'expériences non adaptatifs standards. Pour pouvoir comparer nos méthodes à nombre d'évaluations donné (budget fixe) ou erreur donnée (précision à atteindre), nous faisons varier la taille des plans de 10 points à 40.

Les méthodes séquentielles utilisées ici sont construites à partir d'un plan initial à 10 points avec un ajout de $q = 1$ point par étape selon le critère de MSE. Ici comme dans le reste de la section, tout calcul d'erreur est répété 50 fois avec différents plans LHS optimisés tiré aléatoirement (pour les méthodes séquentielles, ce sont les plans initiaux). Les erreurs sont calculées à partir des vraies valeurs y_i et des prédictions \hat{y}_i comme :

$$e = \sqrt{\sum_{i=1}^{298} (y_i - \hat{y}_i)^2}.$$

On observe l'évolution de l'erreur médiane obtenue en fonction du nombre d'évaluations dans la FIGURE 4. Les expériences ont été effectuées avec un modèle stationnaire et un modèle non stationnaire. Avec un même modèle non stationnaire, la planification séquentielle donne une plus faible erreur que la planification non adaptative. En effet la FIGURE 3 montre que la déformation dilate les zones autour de deux droites d'équation $\ln(W_1) = 0$ et $\ln(W_2) = 0$, là où se trouvent de fortes variations de la fonction. Grâce à la détection de zones de plus hautes variations par le modèle, la méthode séquentielle évalue

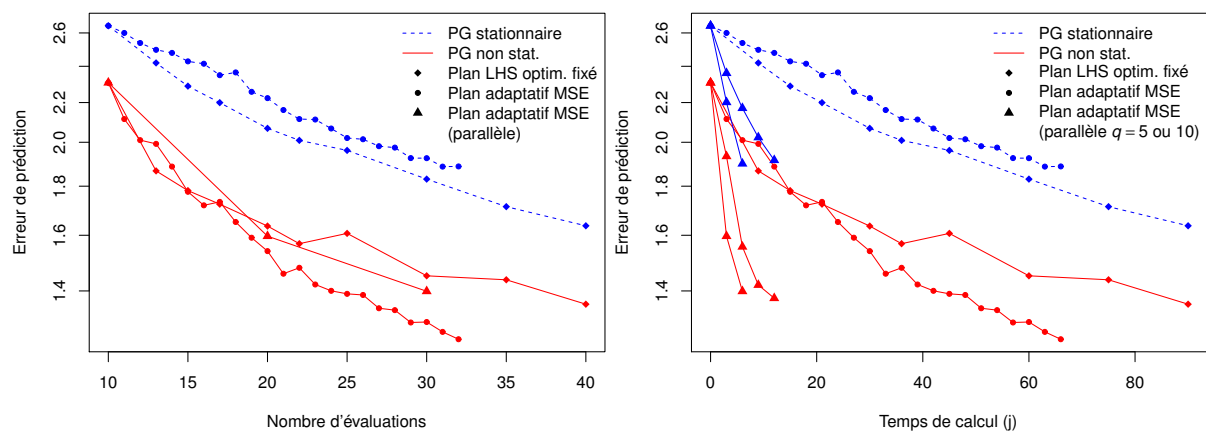


FIGURE 4 – Erreur de prédiction en fonction du nombre d'évaluations ou du temps de calcul pour différentes méthodes de planification d'expériences.

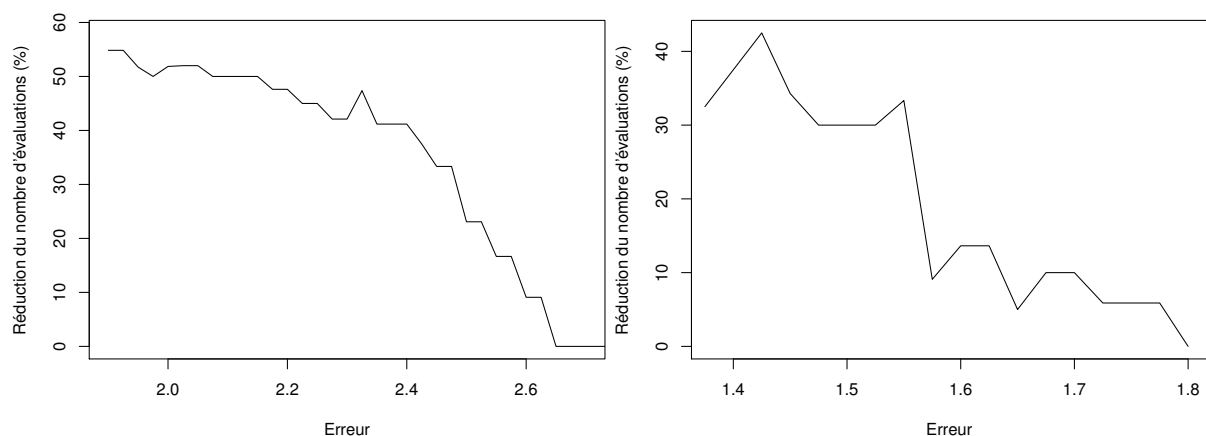


FIGURE 5 – Pourcentage de réduction du nombre d'évaluations qu'offre une méthode par rapport à une autre : le volet gauche donne la réduction obtenue avec le modèle non stationnaire par rapport au modèle stationnaire en planification séquentielle ; le volet droit donne la réduction obtenue avec la planification séquentielle MSE multipoint par rapport à une planification non adaptative de plan LHS optimisé dans le cas d'un modèle non stationnaire. L'abscisse est l'erreur médiane à ne pas dépasser.

plus intensément ces zones ce qui permet d'améliorer la prédiction. Cet effet n'est pas observé avec un modèle stationnaire, ou la méthode séquentielle n'apporte pas plus qu'une méthode non adaptative.

Donc en plus d'améliorer la prédiction par rapport au modèle stationnaire, le modèle non stationnaire permet à une méthode séquentielle d'adapter les positions des évaluations aux variations de la fonction f (on parle alors de plan « adaptatif »). Pour résumer, on observe dans la FIGURE 5 la réduction du nombre d'évaluation qu'offre le modèle non stationnaire par rapport au modèle stationnaire en fonction d'une erreur donnée à ne pas dépasser. Ainsi utiliser le modèle non stationnaire fait économiser jusqu'à 55% des évaluations. De même, sous l'hypothèse d'une covariance non stationnaire, la planification adaptative avec le critère MSE multipoint proposé peut faire économiser jusqu'à 40% des évaluations sur une planification non adaptative de plan LHS optimisé.

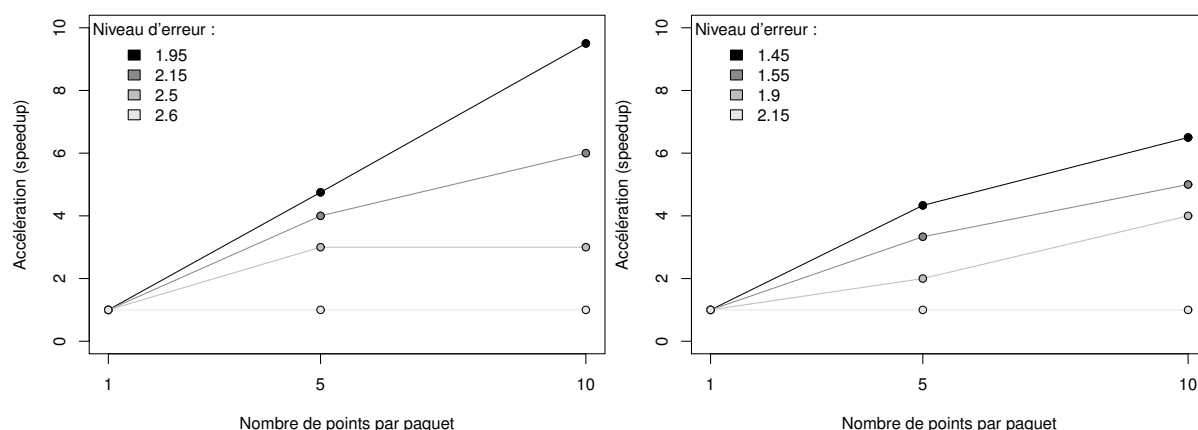


FIGURE 6 – Accélération de la parallélisation de l’algorithme séquentiel pour le modèle stationnaire (gauche) et non stationnaire (droite). Les temps de calcul sont déterminés pour différents niveaux de précision à atteindre.

4.2.2 Apport de la parallélisation

Pour des applications industrielles, il est intéressant de pouvoir effectuer plusieurs simulations en même temps en utilisant plusieurs processeurs. Nous utilisons la généralisation proposée du critère de MSE.

La figure 4 donne l’évolution de l’erreur de prédiction en fonction du temps de calcul de notre algorithme quand le nombre de points par paquet q est fixé à 1, 5 et 10. Il en ressort clairement que le temps de calcul pour atteindre une erreur fixée est beaucoup plus faible dans les cas $q > 1$. Il est plus intéressant de regarder l’accélération ou *speedup*, défini comme de combien de fois la parallélisation accélère le calcul par rapport au cas $q = 1$. La FIGURE 6 donne ces résultats. On observe que l’accélération est plus élevée pour des exigences de précisions plus élevées. On a par exemple que dans le cas stationnaire, pour un niveau d’erreur tolérée de 1.95, évaluer les points 10 par 10 accélère d’environ 9.5 fois la vitesse de calcul par rapport à des évaluations une par une.

5 Conclusion

Nous avons rappelé et mis en œuvre plusieurs algorithmes de planification pour le raffinement local de plans d’expériences dans le cas de données ayant un comportement fortement hétérogène. Leur construction s’appuie sur une modélisation de la réponse de la fonction objectif (code de calcul mécanique par exemple) dans le cadre des processus gaussiens.

Les développements ont porté sur la construction d’une nouvelle classe de modèles de processus gaussiens non stationnaires basée sur une déformation de l’espace des entrées de la fonction objectif et qui permet de s’adapter à une large classe de comportements hétérogènes. Une stratégie de parallélisation de ces critères a également été introduite afin de rajouter dans le plan d’expériences des paquets de points et réduire le temps de calcul de la planification.

Nous avons enfin fourni plusieurs résultats numériques issus de l’application de nos algorithmes de planification dans le cadre des études de fissuration des matériaux hétérogènes (typiquement du béton). Ils ont montré que nos approches conduisent à une réduction significative de l’erreur de prédiction (resp. du nombre de points à rajouter dans le plan d’expériences) par rapport aux techniques de planification existantes quand le budget calcul (resp. la précision) est fixé(e). De plus, grâce à la mise en œuvre de la

stratégie de parallélisation, un gain en temps calcul important a été observé, ce qui permet une utilisation dans un contexte industriel.

Références

- [1] S. Marmin, D. Ginsbourger, J. Baccou, J. Liandrat, Gaussian processes for adaptive design : learning non-stationarity, Pré-publication, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01507368>, 2017.
- [2] D.R. Jones, M. Schonlau, W.J. Welch, Efficient global optimization of expensive black-box functions, *J. Global Optim.*, 13 :455–492 1998.
- [3] D. Ginsbourger, J. Baccou, C. Chevalier, F. Péralès, N. Garland, Y. Monerie, Bayesian adaptive reconstruction of profile optima and optimizers, *SIAM/ASA J. of Uncertain. Quantif.*, 2(1) :490–510, 2014.
- [4] J. Sacks, W. J. Welch, T. J. Mitchell, H. P. Wynn, Design and analysis of computer experiments, *Stat. Sci.*, 4(4) :409–423, 1989.
- [5] C. Paciorek, Nonstationary Gaussian processes for regression and spatial modelling, Thèse, Carnegie Mellon University, 2003.
- [6] P.D. Sampson, P. Guttorp, Non parametric estimation of nonstationary spatial covariance structure, *J. Am. Stat. Assoc.*, 87(417) :108–119, 1992.
- [7] M. Gibbs, Bayesian gaussian processes for regression and classification, Thèse, University of Cambridge, 1997.
- [8] Y. Xiong, W. Chen, D. Apley, X. Ding, A non-stationary covariance-based kriging method for metamodelling in engineering design, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 71(6) :733–756, 2007.
- [9] F. Péralès, F. Dubois, Y. Monerie, B. Piar, L. Stainier, A NonSmooth Contact Dynamics-based Multi-domain Solver. Code coupling (Xper) and application to fracture, *Eur. J. Comput. Mech.*, 19 : 389–417, 2010.
- [10] Q.Y. Kenny, W. Li, A. Sudjianto, Algorithmic construction of optimal symmetric latin hypercube designs, *J. Statist. Plann. Inference*, 90(1) :145–159, 2000.
- [11] R. Gramacy, H. Lee, Bayesian treed gaussian process models with an application to computer modeling, *J. Am. Stat. Assoc.*, 2012.
- [12] E. Aarts, Statistical cooling : A general approach to combinatorial optimization problems, *Philips J. Res.*, 40(4) p193, 1985.
- [13] P. D. Sampson, P. Guttorp, Nonparametric Estimation of Nonstationary Spatial Covariance Structure, *J. Am. Stat. Assoc.*, 87(417) 108–119, 1992.
- [14] F. Perales, S. Bourgeois, A. Chrysochoos, Y. Monerie, Two field multibody method for periodic homogenization, *Eng. Fracture Mech*, 75, 3378–3398, 2008.
- [15] M. C. Shewry and H. P. Wynn, Maximum entropy sampling, *J. of Appl. Stat.*, 14(2) 165–170, 1987.