

Plan d'expériences numériques adaptatifs pour les études mécaniques

J. Baccou^{a,b}, Y. Monerie^{a,b}, F. Perales^{a,b}

a. Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, B.P. 3, 13115 Saint Paul-Lez-Durance, France

b. Laboratoire de Micromécanique et d'Intégrité des Structures, IRSN-CNRS-UMII, B.P. 3, 13115 Saint Paul-Lez-Durance, France

Résumé :

La prise en compte des incertitudes fait aujourd'hui partie intégrante des analyses en mécanique des matériaux et des structures. La propagation de ces connaissances incertaines dans les logiciels de calcul complexes requiert en général un nombre important de simulations numériques vite rédhibitoire en pratique. Afin de réduire ce coût de calcul, des approches basées sur la théorie des plans d'expériences peuvent être utilisées. Cependant, l'uniformité de la répartition des plans classiques n'est pas optimale quand on s'intéresse à des caractéristiques locales de la réponse des structures. Ce travail est donc dédié au développement de techniques de planification adaptatives pour raffiner localement l'échantillonnage autour d'une zone d'intérêt. Une nouvelle méthode couplant interpolation par Krigeage et optimisation d'une fonction coût intégrant l'objectif visé est proposée. La pertinence et l'efficacité de cette approche sont illustrées d'abord sur un cas analytique puis dans le cadre d'une étude de compacité maximale d'empilement de sphères polydisperses.

Abstract :

Taking into account uncertainty is nowadays an important issue in mechanical applications. The propagation step of uncertainty analysis through complex computer codes can become computationally costly since many simulations are required. In order to reduce this cost, design of experiments (DoE) can be used. Most of the classical DoEs provides a good coverage of the range of variation associated with uncertain input parameters. This strategy is not fully satisfactory when the objective is to focus on local characteristics of the data. Therefore, this work is devoted to the development of adaptive DoE construction procedures in order to increase the number of simulations in target regions. It is achieved by introducing a new method coupling Kriging and optimization of a cost function integrating the analyst's objectives. The efficiency of this new approach is illustrated first on a test case, then in the framework of close packing density of polydisperse hard spheres.

1 Introduction

La prise en compte des incertitudes fait aujourd'hui partie intégrante des analyses en mécanique des matériaux et des structures : variabilité des agencements microstructuraux, connaissance imprécise des propriétés matériaux, volumes élémentaires représentatifs, statistiques de défauts, écarts aux prescriptions géométriques des structures, évolutions temporelles non maîtrisables des chargements, etc. La propagation de ces connaissances incertaines dans les logiciels de calcul complexes requiert en général un nombre important de simulations numériques vite rédhibitoire en pratique. Afin de réduire ce coût de calcul, des approches couplant métamodèles et théorie des plans d'expériences [1] peuvent être utilisées. D'un point de vue méthodologique, deux points importants sont à considérer. Le premier concerne le choix du métamodèle pour représenter fidèlement les réponses d'intérêt du code. Parmi les approches classiques, le krigeage [2] a fourni des résultats intéressants dans le cadre des travaux effectués au sein du consortium ReDICE pour l'exploration des codes de calcul. Ses principaux intérêts se situent (i) dans l'intégration dans la procédure d'estimation de la structure spatiale des données via

l'identification d'une fonction de covariance et (ii) dans la possibilité de quantifier une précision associée à l'estimation. Le second point clé porte sur le choix de l'ensemble des points de simulation ou plan d'expériences (PEX) qui doivent fournir une information suffisante sur le comportement des réponses du code pour bâtir un métamodèle pertinent. Il existe de nombreuses stratégies de construction de PEX. On peut mentionner par exemple les techniques de type *space-filling* [3] qui en se basant sur des considérations géométriques permettent une bonne couverture de l'espace de variation des entrées du code. Cependant, une telle répartition n'est pas optimale quand on s'intéresse à des caractéristiques locales de la réponse des structures : fortes variations des comportements apparents en fonction des paramètres d'entrées (gradients), optimisation topologique ou matérielle, etc. Ces connaissances précises nécessitent de concentrer les simulations dans des régions spécifiques plutôt que d'explorer l'ensemble de l'espace de variation.

Ce travail est donc dédié au développement de nouvelles techniques de planification adaptatives pour raffiner localement l'échantillonnage autour d'une zone d'intérêt. La section 2 fait un bref rappel sur les approches qui couplent krigeage et théorie des plan d'expériences. Dans la section 3, nous introduisons une nouvelle procédure de planification adaptative intégrant une variante du critère d'Expected Improvement de [4]. Enfin, la pertinence et l'efficacité de cette nouvelle méthode sont étudiées dans la section 4 en appliquant l'algorithme de planification d'abord sur un cas analytique puis dans un contexte industriel pour l'étude de la compacité maximale d'un empilement de sphères polydisperses.

2 Couplage krigeage/plan d'expériences

2.1 Rappel sur l'interpolation par krigeage

Dans la théorie du krigeage ([2]), les données observées (telles que la réponse d'un code pour plusieurs valeurs de ses paramètres d'entrée) notées $\{y(x_i)\}_{i=1,\dots,k}$ sont considérées comme des réalisations d'un ensemble de variables aléatoires $\{\mathcal{Y}(x_i), i = 1, \dots, k\}$ issu d'un processus aléatoire $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$ (avec \mathcal{D} un domaine borné de \mathbb{R}^p) qui s'écrit $\mathcal{Y}(x) = m(x) + \delta(x)$, $x \in \mathcal{D}$, où $m(x)$ est un terme déterministe de tendance et $\{\delta(x), x \in \mathcal{D}\}$ est un processus aléatoire Gaussien de moyenne nulle et spatialement corrélé. Pour tout $(u, v) \in \mathcal{D}^2$, on notera $C(u, v)$ la fonction de covariance décrivant la liaison spatiale entre $\delta(u)$ et $\delta(v)$. Dans ce travail, on se limite au cas du krigeage ordinaire qui fait l'hypothèse que $\delta(x)$ est un processus stationnaire (i.e. $C(u, v)$ est uniquement fonction de $(u - v) \in \mathcal{D}$) et que le terme de tendance $m(x)$ est une constante inconnue. Dans ce cas, la corrélation spatiale de $\{\delta(x), x \in \mathcal{D}\}$ s'identifie à celle de $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$ et s'obtient directement à partir des données. Plus précisément, une fois la fonction de covariance choisie dans l'ensemble des modèles admissibles, ses paramètres sont estimés par maximum de vraisemblance. En notant $X^k = \{x_i\}_{i=1,\dots,k}$ et $Y^k = \{y(x_i)\}_{i=1,\dots,k}$, l'estimateur du krigeage ordinaire $\mathcal{P}(Y, x^* | X^k, Y^k)$ en un nouveau point x^* est le prédicteur linéaire, non biaisé, qui minimise la variance d'estimation $\sigma_{kg}^2(x^* | X^k, Y^k) = \text{var}(Y(x^*) - \mathcal{P}(Y, x^* | X^k, Y^k))$. Il s'écrit $\mathcal{P}(Y, x^* | X^k, Y^k) = \sum_{i=1}^k \lambda_i^{X^k}(x^*) Y(x_i)$, où $\{\lambda_i^{X^k}(x^*)\}_{i=1,\dots,k}$ sont les poids du krigeage, solutions du système matriciel suivant :

$$\begin{bmatrix} C(x_1 - x_1) & \dots & C(x_1 - x_k) & 1 \\ C(x_2 - x_1) & \dots & C(x_2 - x_k) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & 1 \\ C(x_k - x_1) & \dots & C(x_k - x_k) & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^{X^k}(x^*) \\ \lambda_2^{X^k}(x^*) \\ \dots \\ \lambda_k^{X^k}(x^*) \\ -\mu^{X^k}(x^*) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C(x^* - x_1) \\ C(x^* - x_2) \\ \dots \\ C(x^* - x_k) \\ 1 \end{bmatrix},$$

avec $\mu^{X^k}(x^*)$, un multiplicateur de Lagrange assurant la contrainte de non biais de l'estimateur. Introduisant $\Lambda^{X^k}(x^*) \in \mathbb{R}^k$ le vecteur des poids du krigeage, Σ^{X^k} la matrice de covariance non-conditionnelle entre les observations (i.e. dont l'élément (i, j) est $C(x_i - x_j)$), $\mathcal{C}^{X^k}(x^*) \in \mathbb{R}^k$ le vecteur défini par $\forall i \in \{1, \dots, k\}$, $(\mathcal{C}^{X^k}(x^*))_i = C(x^* - x_i)$ et $\mathbb{1}$ le vecteur identité, l'estimateur du krigeage et la variance d'estimation associée s'écrivent en notant T l'opérateur de transposition :

$$\mathcal{P}(Y, x^* | X^k, Y^k) = \left(\mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T + \mathbb{1} \mu^{X^k}(x^*) \right) \left(\Sigma^{X^k} \right)^{-1} Y^k,$$

$$\sigma_{kg}^2(x^*|X^k, Y^k) = C(0) - \Lambda^{X^k}(x^*)^T \mathcal{C}^{X^k}(x^*) + \mu^{X^k}(x^*).$$

L'ensemble des points X^k est appelé plan d'expériences (PEX) à k points. Sa construction joue un rôle clé dans la prédiction par krigeage. Il fournit l'information sur la grandeur à étudier qui est utilisée pour l'estimation de la corrélation spatiale. Il est donc primordial d'avoir une quantité suffisante d'information pour assurer une interpolation efficace. Cependant, travailler avec un plan d'expériences riche n'est pas toujours réalisable en pratique et on cherche alors à trouver un compromis entre le nombre de points dans le plan et la précision de la prédiction à atteindre.

2.2 Plans d'expériences basés sur un modèle de prédiction

Nous faisons dans cette section un rappel rapide des techniques de construction de plans d'expériences avec une attention particulière aux plans séquentiels basés sur un modèle de prédiction et utilisés dans ce travail. Dans le cadre du krigeage, il existe deux grandes stratégies. La première s'appuie sur des considérations géométriques dans l'espace des entrées. Parmi les approches les plus utilisées en pratique, on peut mentionner par exemple les techniques de type *space-filling* (suite à discrédance faible, plan LHS par exemple) qui ont pour but de fournir une bonne couverture de l'espace de variation. La seconde stratégie est de choisir les points du plan d'expériences pour maximiser la qualité du modèle de prédiction. Dans le cas du krigeage, l'idée la plus naturelle est de se baser sur la variance d'estimation fournie par le modèle. On définit alors $MSE^{X^k}(x) = \sigma_{kg}^2(x|X^k, Y^k)$, où l'exposant dans la MSE désigne le plan d'expériences utilisé pour le calcul de cette quantité. La procédure de construction du plan d'expériences requiert d'abord d'approcher la grandeur d'intérêt (sortie du code) par un modèle défini à partir d'un plan d'expériences initial grossier X^{k_0} à k_0 points, typiquement un plan de type *space-filling*. Puis, l'information apportée par la prédiction est utilisée pour augmenter le nombre de points dans le plan. Il existe deux approches pour réaliser cette étape d'enrichissement des simulations. La première est non itérative et va ajouter tous les points en une seule fois en exploitant l'information fournie par la prédiction sur le plan initial. La seconde dite itérative consiste à remettre à jour la prédiction quand un nouveau point est rajouté. Cette dernière permet de capturer des informations supplémentaires qui n'étaient pas directement disponibles dans le plan initial. Nous nous concentrerons sur cette stratégie dans la suite de ce travail. L'algorithme suivant résume les différentes étapes de la procédure de construction du plan d'expériences :

Algorithme 2.1

A partir du PEX X^{k_0} , récupérer les observations sur la grandeur d'intérêt Y^{k_0} ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pour } k = k_0 \dots N, \\ \text{Trouver le nouveau point } x^* \text{ qui optimise le critère } \mathcal{C}_{\mathcal{M}}(x^*, X^k, Y^k), \\ \text{Évaluer la nouvelle observation } y^* \text{ au point } x^*, \\ \text{Remettre à jour le PEX, } X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\} \text{ et l'ensemble des observations } Y^{k+1} = Y^k \cup \{y^*\}. \end{array} \right.$$

Il existe plusieurs façons pour définir $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}$. Le critère introduit précédemment peut être utilisé et on cherche alors le point qui maximise $\forall x \in \mathcal{D}$, $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}(x, X^k, Y^k) = MSE^{X^k}(x)$.

Cependant, travailler seulement avec la variance d'estimation n'est pas complètement satisfaisant car on s'intéresse souvent à améliorer la prédiction dans des zones d'intérêt telles que des régions de fortes variations des comportements apparents ou des régions où la grandeur d'intérêt atteint un maximum (optimisation topologique) par exemple et la MSE ne permet pas de capturer ce type de caractéristiques locales. Nous proposons dans la section suivante une nouvelle technique de planification adaptative pour raffiner localement l'échantillonnage autour d'une zone d'intérêt.

3 Planification adaptative pour des problèmes d'optimisation topologique ou matérielle

Afin de construire le critère pour réaliser la planification, il convient d'abord de définir la zone d'intérêt dans laquelle on souhaite raffiner. On se focalise ici sur des problèmes d'optimisation topologique ou

matérielle. La section suivante spécifie formellement l'expression de cette zone. Cette dernière sera ensuite utilisée pour introduire un nouveau critère et proposer un algorithme de planification.

3.1 Définition de la zone d'intérêt

Avec les notations introduites dans la section 2.1, l'ensemble des variables $x \in \mathcal{D}$ dont dépend le processus aléatoire \mathcal{Y} est séparé en deux groupes : un premier groupe contenant les variables dites contrôlées et notées \mathcal{V} et un deuxième groupe de variables non contrôlées \mathcal{U} . La zone d'intérêt est définie par :

$$\mathcal{L} = \{(v, \arg \max_{u \in \mathcal{U}} \mathcal{Y}(v, u)) \mid v \in \mathcal{V}\}. \quad (1)$$

3.2 Choix du critère et algorithme de planification

Le critère que l'on cherche à construire doit permettre de quantifier l'amélioration potentielle associée à tout nouveau point candidat dans notre procédure de raffinement autour de \mathcal{L} . Plus précisément, en s'inspirant des travaux [4], nous proposons de quantifier cette amélioration à l'aide d'un critère d'Expected Improvement par coupe qui s'écrit à partir d'un plan d'expériences à k points :

$$EI_{cut(v)}^{X^k}(u) = E((\mathcal{Y}(v, u) - ref^{X^k}(v))^+), \quad (2)$$

où $ref^{X^k}(v) = \max_{u \in \mathcal{U}} (\mathcal{P}(Y, (v, u) | X^k, Y^k))$ et $(\cdot)^+ = \max(0, \cdot)$. En utilisant l'hypothèse de Gaussianité du processus, on peut alors calculer analytiquement l'Expected Improvement par coupe. L'expression (2) devient alors :

$$EI_{cut(v)}^{X^k}(u) = \sigma_{kg}(v, u | X^k, Y^k) [\phi(a_k(v, u)) + a_k(v, u) \Phi(a_k(v, u))] \quad (3)$$

où $a_k(v, u) = \frac{\mathcal{P}(Y, (v, u) | X^k, Y^k) - ref^{X^k}(v)}{\sigma_{kg}(v, u | X^k, Y^k)}$ et ϕ (resp. Φ) est la densité de probabilité (resp. la fonction de répartition) de la loi normale centrée réduite. Il est important de noter que le critère précédent conduira à des stratégies de planification qui permettront de réduire l'incertitude (grâce au premier terme comme dans le cas de la MSE) tout en explorant les zones d'intérêt grâce au second terme. L'algorithme 2.1 avec $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}$ défini à l'aide de l'Expected Improvement (3) s'écrit :

Algorithme 3.1

A partir du PEX X^{k_0} , récupérer les observations sur la grandeur d'intérêt Y^{k_0} ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pour } k = k_0 \dots N, \\ \left[\begin{array}{l} \text{Calculer } \mathcal{P}(Y, (v, u) | X^k, Y^k) \text{ et } \sigma_{kg}(v, u | X^k, Y^k) \text{ pour tout } (v, u) \in \mathcal{V} \times \mathcal{U}, \\ \text{Sélectionner } Q = \{v_i\}_{i \in I} \text{ un ensemble de candidats dans } \mathcal{V} \text{ et évaluer } ref^{X^k}(v_i), \\ \text{Évaluer } EI_{cut(v_i)}(u), u \in \mathcal{U} \text{ et trouver } (v^*, u^*) = \arg \max_{(v, u) \in Q \times \mathcal{U}} EI_{cut(v)}(u). \end{array} \right. \\ \text{Évaluer la nouvelle observation } y^* \text{ au point } x^* = (v^*, u^*), \\ \text{Remettre à jour le PEX, } X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\} \text{ et l'ensemble des observations } Y^{k+1} = Y^k \cup \{y^*\}. \end{array} \right.$$

4 Application à l'étude de la compacité maximale pour un empilement de sphères polydisperses

4.1 Position du problème

Le problème considéré ici est l'étude de la compacité maximale [5] pour un empilement de sphères bi-disperses. Les sphères supposées rigides sont distribuées aléatoirement dans un domaine carré de

taille L . Les murs gauches et bas sont encastres et une pression est appliquée sur les deux murs restants (voir Figure 1, haut, gauche). Les simulations sont effectuées à l'aide du logiciel LMGC90 [6] dédié à la modélisation et au traitement des problèmes d'interactions entre corps et repose sur l'approche NonSmooth Contact dynamics. Les rayons des sphères sont notés R_1 et R_2 et leurs fractions volumiques ϕ_1 et ϕ_2 . La sortie étudiée est la compacité maximale. Les deux variables d'entrée sont le rapport de rayons $\frac{R_1}{R_2}$ et le rapport de fractions volumiques des sphères de rayon R_1 , $\frac{\phi_1}{\phi_1+\phi_2}$. L'objectif est ici de trouver, pour un rapport de rayons donné, le rapport de fractions volumiques maximisant la compacité. La stratégie de planification doit donc raffiner l'information autour d'une ligne de crête qui est bien de la forme (1) avec $v = \frac{R_1}{R_2}$ et $u = \frac{\phi_1}{\phi_1+\phi_2}$.

4.2 Résultats numériques

Les applications numériques comprennent deux séries de test. La première a pour but d'évaluer l'efficacité de l'algorithme de planification 3.1 sur une fonction analytique. Puis, une application sur un cas réel d'étude de compacité maximale est fournie pour montrer l'intérêt de ce type d'approches dans un contexte pratique. Les calculs sur ce dernier cas sont actuellement en cours et seront présentés à la conférence. Nous ne fournissons donc dans ce qui suit que les résultats relatifs au cas analytique.

La figure 1, haut, droite, présente la fonction test ainsi que la ligne de crête à approcher. Nous comparons ici notre méthodologie à une planification classique uniforme en se focalisant sur le rapport entre le nombre de points dans le plan et l'erreur de reconstruction de la crête au sens de la distance de Hausdorff¹. La figure 1, bas, et le tableau 1 fournissent les résultats obtenus. Ils correspondent à deux types d'études. Dans la première, le nombre de points du plan d'expériences est fixé à 100 et on s'intéresse à l'erreur de reconstruction de la ligne de crête. Dans la seconde, on cherche le nombre de points minimum pour atteindre une erreur de reconstruction donnée de 0.19. Notre algorithme étant itératif, on considèrera à chaque fois un plan d'expériences initial uniforme à 30 points. Puis, des nouveaux points seront successivement rajoutés en appliquant l'algorithme 3.1.

	Plan uniforme	Plan adaptatif
100 points	Erreur=0.19	Erreur=0.08
Erreur=0.19	100 points	50 points

TABLE 1 – Nombre de points dans le PEX et erreur de reconstruction de la ligne de crête associée.

Il apparaît que notre procédure grâce à la prise en compte de la zone d'intérêt dans le critère d'Expected Improvement permet un raffinement local autour de la ligne de crête. En conséquence, la reconstruction de cette ligne est beaucoup plus précise que celle obtenue à l'aide d'un plan uniforme. De plus, deux fois moins de points sont nécessaires pour atteindre une erreur de 0.19 avec notre plan adaptatif. En d'autres termes, le temps de calcul est considérablement réduit ce qui rend possible ce type d'études numériques dans un contexte industriel.

5 Conclusions

Une nouvelle approche de planification adaptative d'expériences a été proposée dans le cadre de la théorie du krigeage. Son originalité se situe dans le choix du critère à optimiser qui permet d'intégrer l'objectif visé par l'analyste et de rajouter automatiquement de nouvelles simulations dans les zones d'intérêt correspondantes. Pour des problèmes d'optimisation topologique ou matérielle, un critère d'Expected Improvement par coupe a été construit. La pertinence et l'efficacité du nouvel algorithme de planification ont ensuite été illustrées sur un cas analytique : il est apparu que ce type d'approche permet de retrouver à moindre coût des résultats obtenus par des plans d'expérience uniformes et intensifs. Une application dans le cadre d'une étude de compacité maximale pour un empilement de sphères bi-disperses est actuellement en cours et sera présentée à la conférence.

1. Soit $d(x, A) = \inf_{y \in A} d_2(x, y)$ (avec d_2 la distance euclidienne) la distance d'un point x à un ensemble A , la distance de Hausdorff entre deux ensembles A et B s'écrit $d_H(A, B) = \min \{ \sup_{x \in A} d(x, B), \sup_{y \in B} d(y, A) \}$.

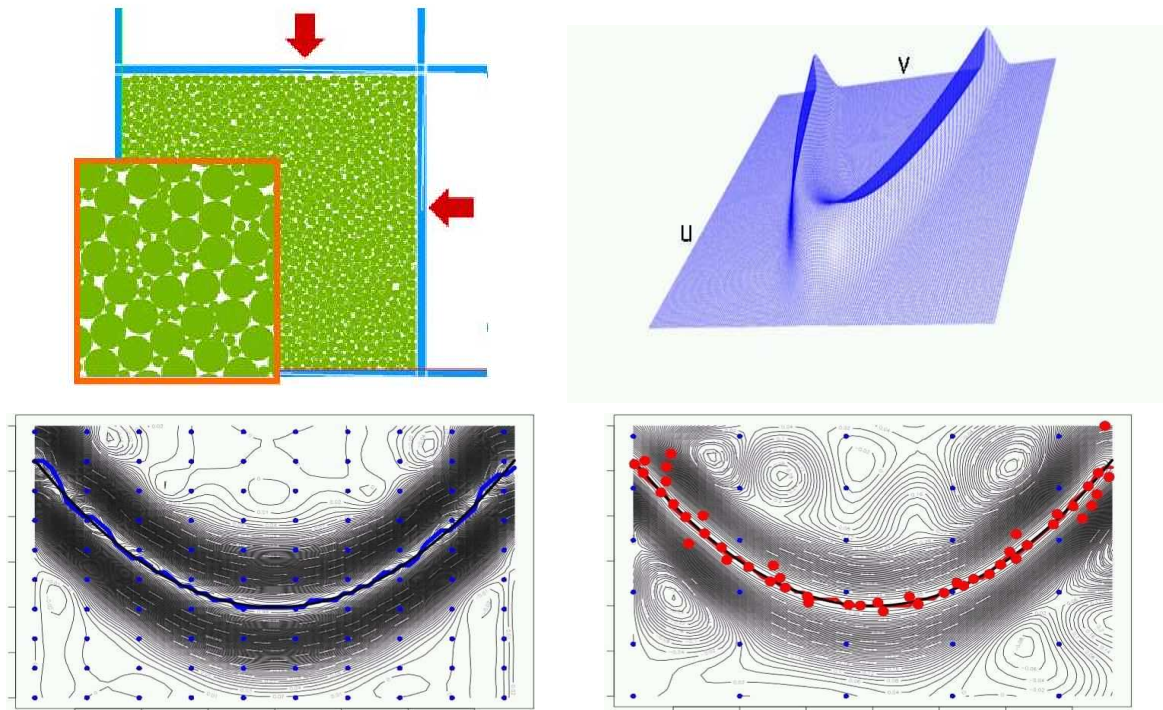


FIGURE 1 – Etude de compacité maximale. De haut en bas et de gauche à droite, exemple de simulation pour déterminer la compacité maximale d’un empilement de sphères bi-disperses, fonction analytique utilisée pour évaluer la méthode, plans d’expériences à 100 points obtenus à l’aide d’un raffinement uniforme et d’une procédure adaptative. Les points bleus correspondent au plan d’expériences initial et les points rouges aux 70 points rajoutés. La courbe noire représente la ligne de crête de la fonction test. Les courbes bleues et rouges sont associées à son approximation à partir des deux plans d’expériences.

Remerciements

Ce travail a été partiellement réalisé dans le cadre du Consortium ReDICE, réunissant partenaires industriels (CEA, EDF, IFPEN, IRSN, Renault) et académiques (ENSMSE, INRIA et Université de Berne) autour de méthodes mathématiques pour la planification et l’analyse d’expériences numériques. En particulier, les auteurs aimeraient remercier C. Chevalier et D. Ginsbourger de l’Université de Berne pour avoir suggéré le critère d’échantillonnage adaptatif présenté dans ce papier. Par ailleurs, merci à T. Mokhtari qui a participé à l’implémentation de méthodes de planification adaptative lors de son stage de fin d’études à l’IRSN Cadarache.

Références

- [1] Box, G., Draper, N. 1987 *Empirical model-building and response surfaces*. Wiley series in probability and mathematical statistics.
- [2] Cressie, N. 1993 *Statistics for spatial data*. Wiley series in probability and mathematical statistics.
- [3] Myers, R., Montgomery, D. 1995 *Response surface methodology-process and product optimization using design experiments*. pp. 156-179, 4, John Wiley & Sons Inc, New York.
- [4] Ginsbourger, D. 2009 *Multiplés métamodèles pour l’approximation et l’optimisation de fonctions numériques multivariées*. Thèse de l’Ecole des Mines de St Etienne.
- [5] Roux, J.-N., Chevoir, F., Toussaint, F. 2007 États de compacité maximale pour les mélanges binaires de grains sphériques : étude par simulation numérique. In *Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées* pp. 268-269, 141-152.
- [6] Dubois, F., Jean, M., Renouf, M., Mozul, R., Martin, A., Bagneris, M. 2011 LMGIC In *10ème colloque national en calcul de structures, Giens*.