

QUANTIFICATION ET RÉDUCTION DE L'INCERTITUDE CONCERNANT LES PROPRIÉTÉS DE MONOTONIE D'UN CODE DE CALCUL COÛTEUX À ÉVALUER

Julien Bect^{1,*}, Nicolas Bousquet², Bertrand Iooss², Shijie Liu¹,
Alice Mabile¹, Anne-Laure Popelin², Thibault Rivière¹,
Rémi Stroh¹, Roman Sueur² & Emmanuel Vazquez¹

¹ *Département Signaux & Systèmes Électroniques
Supélec, Gif-sur-Yvette, France / prenom.nom@supelec.fr*

² *Département de Management des Risques Industriels
EDF R&D, Chatou, France / prenom.nom@edf.fr*

* *Orateur. Les autres auteurs sont en ordre alphabétique.*

Résumé. Nous nous intéressons à l'estimation de propriétés de monotonie d'un modèle numérique dont la sortie est supposée scalaire — par exemple, un modèle de type éléments finis associé à un post-traitement. Plusieurs indicateurs quantitatifs de monotonie sont considérés (extrema et taux de positivité des dérivées partielles). L'évaluation de la sortie du modèle numérique étant usuellement coûteuse, par exemple en temps de calcul, l'estimation de ces indicateurs doit pouvoir être conduite avec un budget réduit d'évaluations. Nous adoptons dans cet article une démarche bayésienne, dans laquelle le modèle numérique est lui-même modélisé par un processus gaussien, et nous estimons au moyen de simulations conditionnelles les lois a posteriori des indicateurs proposés. Cette démarche permet d'envisager une planification séquentielle d'expériences supplémentaires, visant à réduire l'incertitude sur certains des indicateurs de monotonie. Nous appliquons cette approche à un modèle numérique d'un composant passif dans une centrale électrique.

Mots-clés. Processus gaussiens; Planification et analyse d'expériences numériques; Théorie bayésienne séquentielle de la décision; Optimisation; Fiabilité probabiliste.

Abstract. We consider the problem of estimating monotonicity properties of a scalar-valued numerical model—e.g., a finite element model combined with some post-processing. Several quantitative monotonicity indicators are introduced (extrema and positivity rate). Since the evaluation of the numerical is usually time-consuming, these indicators have to be estimated with a small budget of evaluations. In this paper, we adopt a Bayesian approach, where the numerical model itself is modeled as a Gaussian process, and we estimate using conditional simulations the posterior distributions of the monotonicity indicators. This approach paves the way for a sequential selection of additional evaluation points, in order to reduce the uncertainty about some of these indicators. We illustrate the approach with a numerical model of a passive component in a power plant.

Keywords. Gaussian processes; Design and Analysis of Computer Experiments; Sequential Bayesian Decision; Optimization; Probabilistic reliability.

1 Introduction

Ce travail s'intéresse aux propriétés de monotonie partielle d'un modèle déterministe $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$, c'est-à-dire aux propriétés de monotonie croissante ou décroissante de la sortie $y = f(x)$ vis-à-vis de chacune des variables d'entrées $x^{(1)}, \dots, x^{(d)}$ (les autres variables étant fixes). On supposera pour simplifier que $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$ est un hyper-rectangle $[a_1; b_1] \times \dots \times [a_d; b_d]$ (avec éventuellement certains côtés infinis). De telles propriétés de monotonie, lorsqu'elles existent, simplifient la compréhension de la relation entrée-sortie modélisée, ainsi que la résolution de divers problèmes numériques s'y rattachant — c'est évident pour l'optimisation, bien entendu, mais l'on peut également tirer parti des propriétés de monotonie dans les études de fiabilité (voir, par exemple, Bousquet, 2012; de Rocquigny, 2009; Moutoussamy *et al.*, 2013; Popelin *et al.*, 2012).

Dans le cas un modèle numérique complexe, typiquement coûteux à évaluer (par exemple en temps de calcul), rien ne garantit que les propriétés de monotonie qui sont connues pour la physique sous-jacente soient vérifiées sur l'ensemble du domaine de définition \mathbb{X} du modèle. Par ailleurs, un modèle peut avoir, sur tout ou partie de son domaine de définition, des propriétés de monotonie qui ne sont pas connues à l'avance — mais peut-être suspectées. L'analyse formelle des propriétés de monotonie d'un tel code étant rarement praticable, nous proposons d'étudier les propriétés de monotonie d'un code de calcul, supposé dérivable, à l'aide d'expériences numériques planifiées, que nous analyserons sous un angle bayésien en utilisant une modélisation par processus gaussien (krigeage).

2 Indicateurs de monotonie

Considérons un modèle $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$, avec \mathbb{X} un hyper-rectangle d'intérieur non vide, et supposons que f est au moins une fois continûment différentiable. La monotonie partielle de f par rapport à sa j^{e} variable se lit alors dans le signe du minimum et du maximum de $\partial f / \partial x^{(j)}$:

$$M_j^-(f) = \min_{x \in \mathbb{X}} \frac{\partial f}{\partial x^{(j)}}, \quad \text{et} \quad M_j^+(f) = \max_{x \in \mathbb{X}} \frac{\partial f}{\partial x^{(j)}},$$

qui sont respectivement positif pour une monotonie croissante et négatif pour une monotonie décroissante. Plus généralement, pour quantifier la monotonie de f , on peut s'intéresser à la mesure $\alpha_j(f) = \mu(\Gamma_j(f))$ de l'ensemble

$$\Gamma_j(f) = \{x \in \mathbb{X} \mid \partial f / \partial x^{(j)} > 0\},$$

qui caractérise les régions de croissance stricte de f en fonction de sa j^{e} variable. On peut prendre pour μ la loi uniforme sur \mathbb{X} , ou bien la loi des entrées, dans le cas où celles-ci sont probabilisées.

Face à un modèle f qui n'est connu qu'à travers ses valeurs $f(x_1), \dots, f(x_n)$ — le gradient n'étant pas supposé disponible — sur un plan d'expériences x_1, \dots, x_n , comment estimer la valeur des indicateurs de monotonie α_j , et comment quantifier les incertitudes associées ?

3 Estimation et quantification de l'incertitude

Nous adoptons une approche bayésienne, en modélisant la fonction f comme une réalisation d'un processus aléatoire gaussien, noté ξ . Cette approche est aujourd'hui classique pour la planification et l'analyse des expériences numériques coûteuses (voir, par exemple, Santner *et al.*, 2003) mais sa mise en œuvre pour l'étude des propriétés de monotonie d'un code de calcul est, à notre connaissance, nouvelle. Les quantités d'intérêt, étant des fonctions de f , seront maintenant traitées comme des variables aléatoires : $M_j^- := M_j^-(\xi)$, $M_j^+ := M_j^+(\xi)$ et $\alpha_j := \alpha_j(\xi)$.

La fonction f étant supposée continûment différentiable, nous choisissons de modéliser f par un processus gaussien ξ dérivable en moyenne quadratique, que nous supposons stationnaire. Ses dérivées partielles en moyenne quadratique seront notées $\partial\xi/\partial x^{(j)}$. Une condition suffisante pour l'existence de ces dérivées est que le moyenne soit dérivable, et que la fonction de covariance admette des dérivées partielles à l'ordre deux par rapport à chacune des variables (voir, par exemple, Stein, 1999, section 2.6).

Les processus ξ , $\partial\xi/\partial x^{(1)}$, \dots , $\partial\xi/\partial x^{(d)}$ sont alors des processus conjointement gaussiens, corrélés. Leur loi a posteriori conjointe est également gaussienne et se calcule grâce aux équations du (co)krigeage, qui ne sont rien d'autre que les équations usuelles du krigeage appliquées au processus étendu $\tilde{\xi}$, défini sur $\tilde{\mathbb{X}} = \mathbb{X} \times \{0, 1, \dots, d\}$ par

$$\tilde{\xi}(x, s) = \begin{cases} \xi(x) & \text{si } s = 0, \\ \partial\xi/\partial x^{(s)} & \text{si } s > 0. \end{cases}$$

La loi a posteriori des indicateurs M_j^- , M_j^+ et α_j n'étant ni calculable ni simulable simplement, nous nous contenterons de simulations conditionnelles de quantités approchées, construites sur un échantillon de variables X_1, \dots, X_m i.i.d. de loi μ :

$$M_{j,m}^+ = \max_{1 \leq i \leq m} \frac{\partial\xi}{\partial x^{(j)}}(X_i), \quad M_{j,m}^- = \min_{1 \leq i \leq m} \frac{\partial\xi}{\partial x^{(j)}}(X_i), \quad \text{et} \quad \alpha_{j,m} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\Gamma_j(\xi)}(X_i). \quad (1)$$

4 Illustration par un problème industriel ($d = 7$)

Nous appliquons l'approche décrite ci-dessus à un problème industriel concernant l'évaluation des performances d'un composant passif d'une centrale électrique. Un code thermo-mécanique permet à EDF de modéliser le comportement du composant face à un

Variable aléatoire	Loi	Paramètres
Épaisseur du revêtement (m)	uniforme	$a = 0.0075, b = 0.009$
Hauteur du défaut (m)	Weibull	$a = 0.02, \text{scale} = 0.00309, \text{shape} = 1.8$
Ratio hauteur/longueur	lognormale	$a = 0.02, \ln(b) = -1.53, \ln(c) = 0.55$
Position azimutale du défaut (°)	uniforme	$a = 0, b = 360$
Altitude du défaut (mm)	uniforme	$a = -5096, b = -1438$
Vieillessement du matériau	gaussienne	$\mu = 0, \sigma = 1$
Résistance du matériau	gaussienne	$\mu = 0, \sigma = 1$

TABLE 1 – Variables d’entrée du modèle de composant passif considéré à la section 4. Ces variables, probabilisées, sont supposées indépendantes.

chargement. Ce comportement est décrit à l’aide d’une grandeur scalaire appelée facteur de marge, qui dépend de $d = 7$ paramètres : épaisseur du revêtement en inox appliqué en paroi interne du composant, température du fluide en contact avec la paroi, ténacité de l’acier de la structure... (voir tableau 1).

La figure 1 présente sous forme de boxplots la loi a posteriori des indicateurs $\alpha_{j,m}$, $m = 200$, pour un plan d’expériences¹ de taille $n = 70$ (ce qui correspond à la taille de $n = 10d$ usuellement recommandée pour un plan d’expérience initial), dans le cas d’un modèle avec une moyenne affine et une covariance de Matérn de régularité $3/2$ dont les paramètres ont été estimés par maximum de vraisemblance. Il apparaît que trois variables d’entrée ($x^{(2)}$, $x^{(6)}$ et $x^{(7)}$) présentent des propriétés de monotonie très marquées. Cependant, en raison de la méthode d’échantillonnage aléatoire utilisée dans la construction des indicateurs $\alpha_{j,m}$, on ne peut pas exclure que ces propriétés puissent être mises en défaut de manière locale. Deux autres variables ($x^{(1)}$ et $x^{(3)}$) semblent aussi faire varier la sortie de manière croissante, mais l’incertitude est plus grande que pour les variables $x^{(2)}$, $x^{(6)}$ et $x^{(7)}$. Pour les deux variables restantes, l’analyse indique clairement qu’il n’y a pas propriété de monotonie.

La figure 2 concerne les variables $x^{(1)}$ et $x^{(2)}$. Pour la variable $x^{(1)}$, la loi a posteriori de $M_{j,m}^-$ est distribuée de part et d’autre de la valeur 0, ce qui confirme l’incertitude résiduelle quant à la monotonie croissante par rapport à cette entrée. Pour la variable $x^{(2)}$, la loi a posteriori de $M_{j,m}^+$ confirme qu’il est très probable que la sortie dépende de manière décroissante de cette variable.

1. Cette étude préliminaire ayant été menée à partir d’une base de donnée de 100 000 points pré-calculés, il s’agit simplement d’un sous-ensemble de ces 100 000 points, choisis en optimisant le façon gloutonne le critère *minimax* (distance de remplissage).

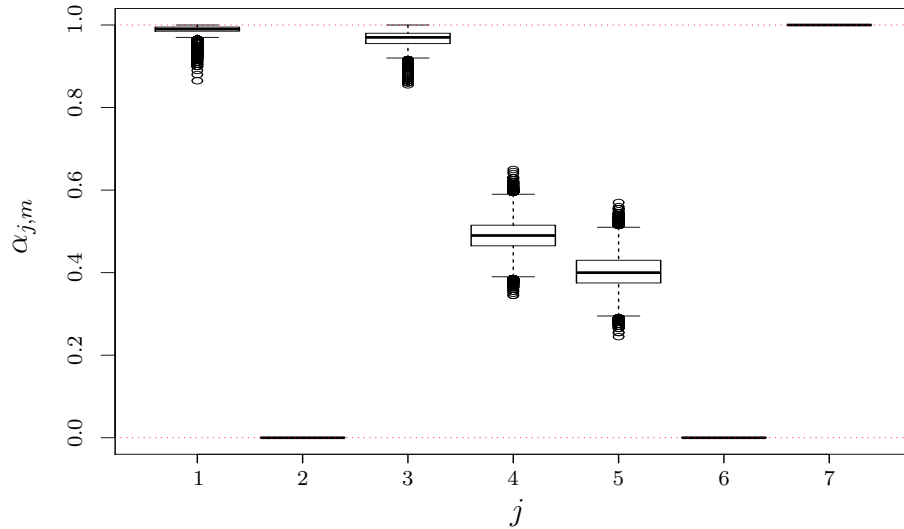


FIGURE 1 – Représentation sous forme de boxplots de la loi a posteriori des indicateurs $\alpha_{j,m}$ pour les sept variables d’entrée du modèle, réalisés sur 100 tirages d’un échantillon aléatoire de taille $m = 200$, avec 500 simulations conditionnelles de trajectoire pour chaque tirage (soit un total de 50 000 trajectoires conditionnelles).

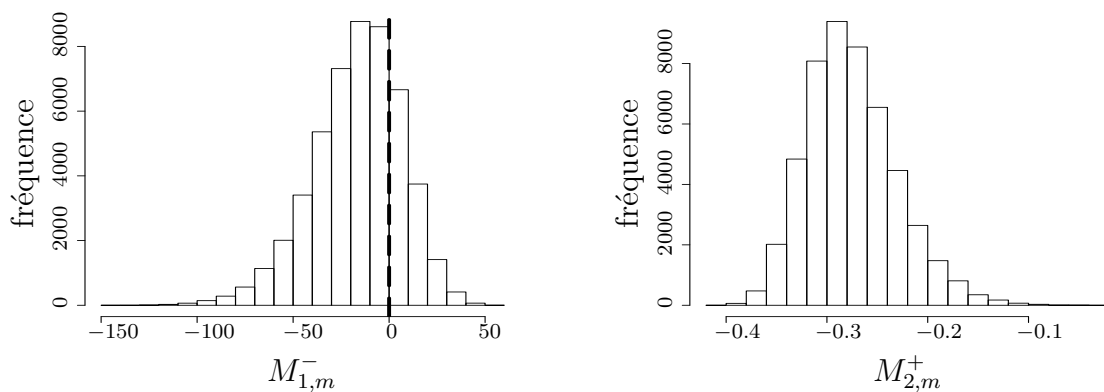


FIGURE 2 – Histogramme de la loi a posteriori de $M_{1,m}^-$ (gauche) et $M_{2,m}^+$ (droite), pour $m = 200$, construits à partir des mêmes simulations conditionnelles que la figure 1.

5 Vers une planification séquentielle ?

L'approche proposée fournit des mesures de l'incertitudes sur les propriétés de monotonie d'un code de calcul coûteux évaluer, en se fondant sur les lois a posteriori d'une gamme d'indicateurs de monotonie. Ces mesures d'incertitude dépendent à la fois du modèle choisi pour ξ et du plan d'expérience x_1, \dots, x_n .

Lorsque l'évaluation de la fonction f est coûteuse, le nombre d'évaluations de f est limité, et dans ce cas, il est important de choisir les évaluations de manière pertinente. Ceci suggère, partant des résultats d'un plan d'expérience initial tel que celui décrit dans cet article, l'utilisation d'une planification adaptative pour choisir de nouvelles expériences à réaliser. Par exemple, la réduction progressive de l'incertitude concernant l'un des indicateurs α_j pourrait être réalisée par une stratégie de type *stepwise uncertainty reduction* (SUR) ; voir Bect *et al.* (2012). La mise en œuvre effective d'une telle stratégie, ainsi que son extension à la réduction simultanée de l'incertitude associée à plusieurs indicateurs de monotonie, reste à réaliser.

Par ailleurs, lorsque la taille n du plan d'expérience est petite, l'incertitude sur les paramètres de ξ — estimés dans cet article par maximum de vraisemblance — n'est sans doute pas négligeable (voir, notamment, Benassi, 2013; Jan *et al.*, 2013). Négliger cette incertitude revient à sous-estimer l'incertitude sur les indicateurs de monotonie : une approche complètement bayésienne serait sans doute préférable.

Références

- J. BECT, D. GINSBOURGER, L. LI, V. PICHENY et E. VAZQUEZ : Sequential design of computer experiments for the estimation of a probability of failure. *Statistics and Computing*, 22(3):773–793, 2012.
- R. BENASSI : *Nouvel algorithme d'optimisation bayésien utilisant une approche Monte-Carlo séquentielle*. Thèse de doctorat, Univ. Paris Sud, 2013.
- N. BOUSQUET : Accelerated Monte Carlo estimation of exceedance probabilities under monotonicity constraints. *Annales de la Faculté des Sciences de Toulouse*, 21(3):557–591, 2012.
- E. de ROCQUIGNY : Structural reliability under monotony : Properties of FORM, simulation or response surface methods and a new class of monotonous reliability methods (MRM). *Structural Safety*, 31(5):363–374, 2009.
- B. JAN, J. BECT, E. VAZQUEZ et P. LEFRANC : Approche bayésienne pour l'estimation d'indices de Sobol. In *45èmes Journées de Statistique (JdS 2013), 27–31 mai 2013, Toulouse, France*, 2013.
- V. MOUTOUSSAMY, N. BOUSQUET, B. IOOSS, P. ROCHET, T. KLEIN et F. GAMBOA : Comparing conservative estimations of failure probabilities using sequential designs of experiments in monotone frameworks. In *11th International Conference on Structural Safety & Reliability (ICOSSAR), June 16-20, 2013, New York*, 2013.
- A.-L. POPELIN, R. SUEUR et N. BOUSQUET : Encadrement et estimation de probabilités de défaillance dans un cadre monotone d'analyse de fiabilité structurale. In *Congrès $\lambda\mu$ 18, Tours, France*, 2012.
- T. J. SANTNER, B. J. WILLIAMS et W. NOTZ : *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Springer Verlag, 2003.
- M. L. STEIN : *Interpolation of Spatial Data : Some Theory for Kriging*. Springer, 1999.