



Méthodes statistiques pour la quantification et la propagation des incertitudes dans les matériaux

G. Perrin¹

Ecole ModMat 2019 | 19 Juillet 2019

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

Exemple fil-rouge

- On cherche à dimensionner un barrage pour un site particulier.
- Un nouveau béton a été mis au point spécialement pour cet objectif, aux propriétés a priori "remarquables" (corrosion, rigidité, coût de fabrication, longévité...).



Exemple fil-rouge

- On dispose d'une loi de comportement pour ce matériau (ex : élasto-plasticité), caractérisée par trois paramètres :
 - un module de Young E ,
 - un coefficient de Poisson ν ,
 - une pression maximale P_{\max} à rupture en compression.
- Les valeurs de ces paramètres, regroupés dans $\beta = (E, \nu, P_{\max})$, sont a priori **inconnues**.
- Pour une valeur de β fixée, cette loi peut être intégrée dans un modèle EF (ex : Cast3M), afin de prédire le comportement mécanique de structures construites dans ce matériau.

Exemple fil-rouge

- On note \mathbf{x} le vecteur regroupant les caractéristiques du barrage (dimensions, matériaux, conditions limites,...).
- On cherche alors à trouver \mathbf{x}^* permettant de minimiser le coût de construction du barrage, sous contrainte de résistance à diverses sollicitations extérieures (séisme, forte pluie, chaleurs répétées...) :

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{X}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}} y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}),$$

- y est une quantité d'intérêt choisie, dont une des entrées est la loi de comportement du béton considéré.
- \mathbb{X} est le domaine de définition de \mathbf{x} ,
- \mathbf{h} regroupe les contraintes sur le dimensionnement.

Problématiques

- 1 A partir d'un jeu limité de mesures expérimentales (bruitées), comment estimer β (**inférence statistique**) ?
- 2 Connaissant β (et les incertitudes associées), comment optimiser les caractéristiques du système considéré (**optimisation sous incertitudes**) ?

- 1 Introduction
- 2 Identification statistique de propriétés matériaux
 - Définition du problème
 - Théorie de l'estimation
 - Identification à partir de mesures directes
 - Identification à partir de mesures indirectes
- 3 Concevoir sous incertitudes
 - Définition du problème
 - Définir une relation d'ordre
 - Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
 - Robustesse et fiabilité
- 4 Conclusion

Problématique 1

- ➊ A partir d'un jeu limité de mesures expérimentales (bruitées), comment estimer β (**inférence statistique**) ?

Le problème est rendu difficile par :

- la **variabilité** des observations, induite par :
 - ➊ les erreurs de mesure ou le processus expérimental,
 - ➋ le phénomène physique étudié ;
- le fait que les observations peuvent être **indirectement liées** aux quantités d'intérêt ;
- le fait que les quantités d'intérêt soient **aléatoires** ;
- le fait que les quantités d'intérêt et les observations soient de **grande dimension** (vecteurs, fonctions...).

Définition du problème

n	1	2	3	4	5
$P_{\max,n}^{\text{mes}}$	4.8 ± 0.1	4.8 ± 0.1	4.7 ± 0.1	5.0 ± 0.1	4.3 ± 0.1
n	6	7	8	9	10
$P_{\max,n}^{\text{mes}}$	5.8 ± 0.1	5.5 ± 0.1	5.2 ± 0.1	5.2 ± 0.1	4.8 ± 0.1

- Présence d'une **double source d'incertitudes** :
 - incertitudes de mesure $\leftrightarrow \pm 0.1$ (Incertitude **épistémique** ou "réductible"),
 - variabilité "naturelle" $\leftrightarrow \{4.8, 4.8, 4.7, \dots\}$ (Incertitude **aléatoire** ou "irréductible").
- En fonction de l'importance de chacune de ces erreurs, les méthodes d'identification seront différentes !

1 Introduction

2 Identification statistique de propriétés matériaux

- Définition du problème
- Théorie de l'estimation
- Identification à partir de mesures directes
- Identification à partir de mesures indirectes

3 Concevoir sous incertitudes

- Définition du problème
- Définir une relation d'ordre
- Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
- Robustesse et fiabilité

4 Conclusion

- Soit \mathbf{y} un vecteur d'observations dépendant d'une quantité d'intérêt θ .
- On appelle estimateur une fonction des observations (=une statistique), qui doit se rapprocher le plus possible de θ :

$$\hat{\theta} = S(\mathbf{y}).$$

Remarques

- \mathbf{y} est une quantité aléatoire, dont la loi de probabilité dépend de $\theta \Rightarrow \hat{\theta}$ est également une **variable aléatoire** !
- "Se rapprocher le plus possible" demande l'introduction d'un critère d'écart entre $\hat{\theta}$ et θ .
- Les hypothèses sur la loi de \mathbf{y} , puis le critère d'évaluation, déterminent le choix de l'estimateur ($\leftrightarrow S$).

θ étant inconnu, on le modélise par une quantité aléatoire. On définit alors :

- 1 $p(\theta, \mathbf{y})$ la distribution jointe de (θ, \mathbf{y}) ,
- 2 $\pi(\theta)$ et $f(\mathbf{y})$ les distributions marginales de θ et \mathbf{y} :

$$\pi(\theta) = \int_{\mathbb{Y}} p(\theta, \mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad f(\mathbf{y}) = \int_{\Theta} p(\theta, \mathbf{y}) d\theta,$$

- 3 $\pi(\theta|\mathbf{y})$ la distribution a posteriori de θ .

⇒ Pour "identifier" θ à partir de \mathbf{y} , on cherche alors $\pi(\theta|\mathbf{y})$.

⇒ On post-traite ensuite $\pi(\theta|\mathbf{y})$ pour obtenir $\hat{\theta}$. Par ex :

$$\hat{\theta}^{\text{MV}} := \arg \max_{\theta} \pi(\theta|\mathbf{y}), \quad \hat{\theta}^{\text{MAP}} := \int_{\Theta} \theta \pi(\theta|\mathbf{y}) d\theta.$$

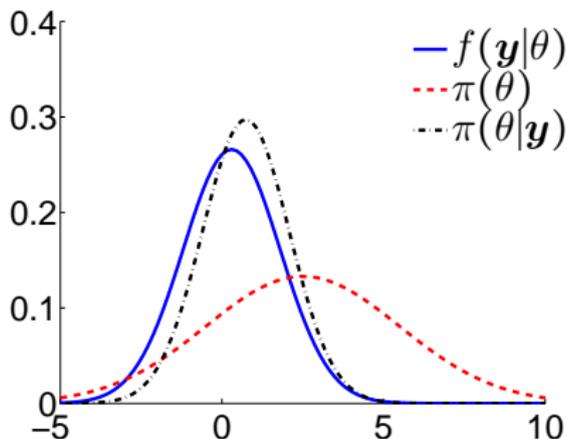
Toute estimation est fondée sur la formule de Bayes :

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = \frac{p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})}{f(\mathbf{y})} = \frac{f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta})}{f(\mathbf{y})},$$

- 1 $f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ est la **vraisemblance** \leftrightarrow contient l'information apportée par les mesures,
- 2 $\pi(\boldsymbol{\theta})$ est la **loi a priori**.

Choix de la loi a priori

- déterminée empiriquement par avis d'expert par des considérations physiques (positivité,...),
- forme paramétrique, conjuguée ou non (modèle hiérarchique),
- lois non informatives (théorie de l'information, invariance par reparamétrage,...).



- Plus on dispose de mesures indépendantes, et plus le poids de la vraisemblance est grand par rapport à la loi a priori.
- Moins on dispose de mesures indépendantes, plus le choix de la loi a priori est déterminant.

1 Introduction

2 Identification statistique de propriétés matériaux

- Définition du problème
- Théorie de l'estimation
- Identification à partir de mesures directes
- Identification à partir de mesures indirectes

3 Concevoir sous incertitudes

- Définition du problème
- Définir une relation d'ordre
- Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
- Robustesse et fiabilité

4 Conclusion

Cas 1 : la variabilité "naturelle" est négligeable.

⇒ il existe une unique valeur de P_{\max} ($\Rightarrow \theta = P_{\max}$).

Modèle classique d'estimation statistique

$$P_{\max,n}^{\text{mes}} = P_{\max} + \varepsilon_n^{\text{mes}}, \quad \mathbf{y} = (P_{\max,1}^{\text{mes}}, \dots, P_{\max,N}^{\text{mes}}),$$

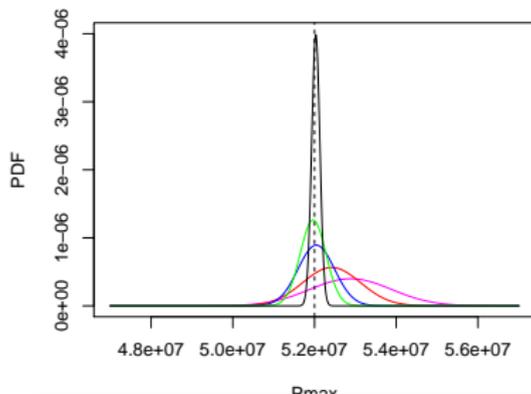
avec $\varepsilon_1^{\text{mes}}, \dots, \varepsilon_N^{\text{mes}}$ des copies **indépendantes et identiquement distribuées (iid)** d'une même variable aléatoire ε^{mes} , de densité de probabilité (PDF) **connue** (fournie par l'expérimentateur).

Exemple du modèle gaussien sans biais :

$$f(\mathbf{y}|P_{\max}) = \prod_{n=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(P_{\max,n}^{\text{mes}} - P_{\max})^2}{2\sigma^2}\right).$$

Cas 1 : la variabilité "naturelle" est négligeable.

$$\pi(P_{\max}|\mathbf{y}) \propto \exp\left(-\sum_{n=1}^N \frac{(P_{\max,n}^{\text{mes}} - P_{\max})^2}{2\sigma^2}\right) \pi(P_{\max}).$$



- Valeur "vraie" $P_{\max} = 5.2e7$
- Magenta $\leftrightarrow n = 1$
- Rouge $\leftrightarrow n = 2$
- Bleu $\leftrightarrow n = 5$
- Cyan $\leftrightarrow n = 10$
- Noir $\leftrightarrow n = 100$.

⇒ convergence vers une **constante** pour P_{\max} quand $n \rightarrow +\infty$.

Cas 2 : la variabilité "naturelle" est majoritaire.

⇒ il n'existe **pas** de valeur unique de P_{\max} !

Modèle classique d'estimation statistique

P_{\max} est modélisée par une v.a. de loi $\pi(\cdot; \alpha)$, de paramètres α (moyenne, écart-type,...) **inconnus** ($\Rightarrow \theta = \alpha$).

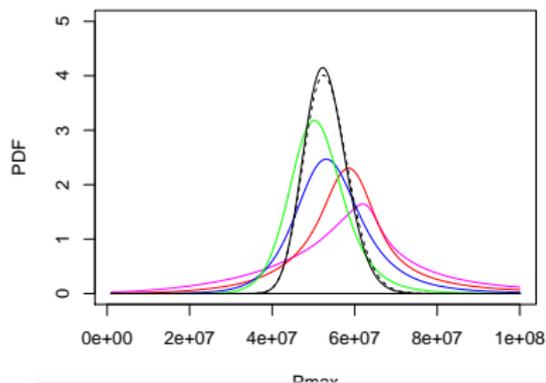
$$\pi(P_{\max}|\mathbf{y}) = \int_{\mathbb{A}} \pi(P_{\max}|\alpha)\pi(\alpha|\mathbf{y})d\alpha, \quad \pi(\alpha|\mathbf{y}) \propto f(\mathbf{y}|\alpha)\pi(\alpha).$$

Exemple du modèle gaussien sans biais : $P_{\max,n}^{\text{mes}} = P_{\max} + \varepsilon_n^{\text{mes}}$,

$$f(\mathbf{y}|\alpha) = \prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi(P_{\max}; \alpha)}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(P_{\max,n}^{\text{mes}} - P_{\max})^2}{2\sigma^2}\right) dP_{\max}.$$

Cas 2 : la variabilité "naturelle" est majoritaire.

$$\pi(P_{\max}|\mathbf{y}) = \int_{\mathbb{A}} \pi(P_{\max}|\alpha)\pi(\alpha|\mathbf{y})d\alpha.$$



- Pointillés ↔ "vraie" PDF
- Magenta ↔ $n = 1$
- Rouge ↔ $n = 2$
- Bleu ↔ $n = 5$
- Cyan ↔ $n = 10$
- Noir ↔ $n = 100$.

⇒ convergence vers une **distribution** pour P_{\max} quand $n \rightarrow +\infty$.

Cas 2 : la variabilité "naturelle" est majoritaire.

Importance de la loi a priori

- Les résultats de l'estimation précédente dépendent fortement du choix de $\pi(\cdot; \alpha)$.
- Le choix de cette loi doit être dicté par notre a priori physique sur P_{\max} (positivité,...), mais également par le fait que l'on s'intéresse aux valeurs "centrales" (\sim interquantile 2.5% – 97.5%) ou extrêmes (le reste \rightarrow voir la **théorie des valeurs extrêmes** dans ce cas pour des distributions paramétriques adaptées...).

1 Introduction

2 Identification statistique de propriétés matériaux

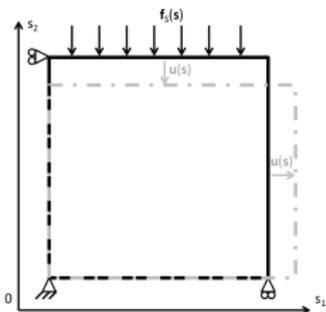
- Définition du problème
- Théorie de l'estimation
- Identification à partir de mesures directes
- Identification à partir de mesures indirectes

3 Concevoir sous incertitudes

- Définition du problème
- Définir une relation d'ordre
- Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
- Robustesse et fiabilité

4 Conclusion

Identification à partir de mesures indirectes



- Comme on ne mesure pas directement E et ν , mais des déformations (et potentiellement des contraintes), le formalisme précédent ne peut pas directement s'appliquer.
- ⇒ Il est alors nécessaire d'introduire un **modèle** (\leftrightarrow une loi de comportement pour le matériau).
- ⇒ On parle d'identification **indirecte** (les mesures sont indirectement liées aux quantités d'intérêt)!

Exemple : la loi de Hooke.

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \right)^T \right), \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) \mathbf{I} + \frac{E}{1+\nu} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^{\text{imp}}(\mathbf{x}) \quad \text{sur } \partial\Omega_u, \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}^{\text{imp}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial\Omega_\sigma. \end{array} \right.$$

⇒ pour E et ν **connus**, on peut alors **calculer** $\mathbf{u}^{\text{EF}}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})$ (on rappelle que $\boldsymbol{\beta} = (E, \nu, P_{\text{max}})$) comme la solution du **modèle** précédent (en utilisant une discrétisation éléments finis par ex.).

Au niveau du formalisme d'estimation...

...peu de différences :

- on cherche à expliciter le lien entre les quantités d'intérêt, les observations, et les différentes sources d'incertitudes,
- on introduit une loi a priori pour les quantités d'intérêt,
- on utilise le théorème de Bayes pour revenir à la loi a posteriori.

Au niveau de l'exploitation des résultats...

...**prudence** :

- les résultats dépendent du modèle choisi,
- attention aux **compensation d'erreur** !

Exemple : la loi de Hooke.

$$\mathbf{u}^{\text{vrai}}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^{\text{EF}}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{mod}}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^{\text{mes}}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{mes}}(\mathbf{x}).$$

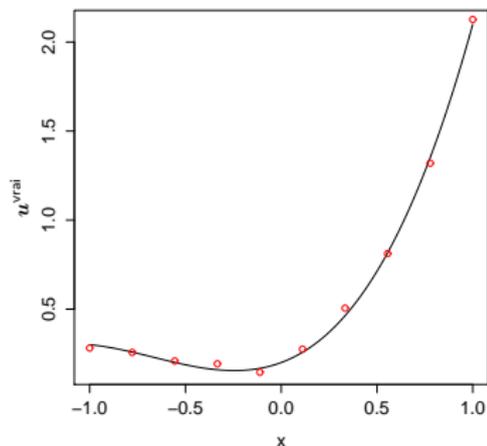
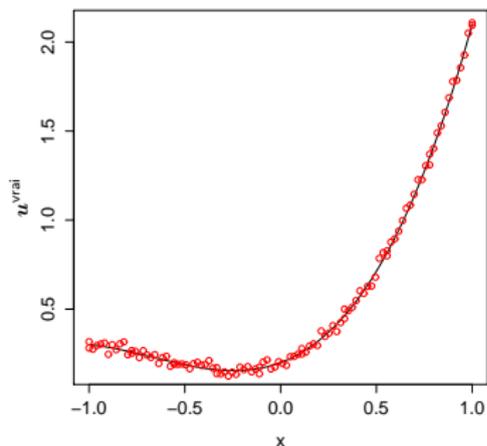
Quelques difficultés

- l'**erreur de modèle** $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{mod}}$ regroupe plusieurs contributeurs différents (discrétisation, phénomènes négligés...) qu'il est nécessaire de bien identifier.
- l'erreur de modèle est plus ou moins bien connue... \Rightarrow lui associer une **structure** pour le problème d'inférence (souvent un processus gaussien).
- les coûts de calcul de $\mathbf{u}^{\text{EF}}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})$ peuvent être élevés \Rightarrow sélection **parcimonieuse** des points d'évaluation du modèle (via notamment de l'apprentissage statistique).

Identification à partir de mesures indirectes

Importance de l'erreur de modèle (exemple artificiel !)

$$u^{\text{vrai}}(x) = 0.2 + \nu x + Ex^2 + 0.5x^3, \quad -1 \leq x \leq 1, \quad \sigma_{\text{mes}} = 0.02.$$

 $N = 10$  $N = 100$ 

Importance de l'erreur de modèle (exemple artificiel !)

$$\mathbf{u}^{\text{vrai}}(x) = 0.2 + \nu x + Ex^2 + 0.5x^3, \quad -1 \leq x \leq 1, \quad \sigma_{\text{mes}} = 0.02.$$

	β_1	$\beta_2 (= \nu)$	$\beta_3 (= E)$	β_4
référence	0.2	0.4	1	0.5
$N = 10$	0.19 ± 0.019	0.45 ± 0.050	1.0 ± 0.035	0.45 ± 0.064
$N = 100$	0.20 ± 0.0059	0.40 ± 0.017	1.0 ± 0.013	0.51 ± 0.025

TABLE: $\mathbf{u}^{\text{EF}}(x; \beta) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 x^2 + \beta_4 x^3$ (IC 95%)

	β_1	$\beta_2 (= \nu)$	$\beta_3 (= E)$	β_4
référence	0.2	0.4	1	0.5
$\beta^{\text{post}}, N = 10$	0.21 ± 0.019	0.77 ± 0.019	0.98 ± 0.035	
$\beta^{\text{post}}, N = 100$	0.20 ± 0.0059	0.71 ± 0.0067	1.0 ± 0.013	

TABLE: $\mathbf{u}^{\text{EF}}(x; \beta) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 x^2$ (IC 95%)

Avec erreur de modèle, $\beta | \mathbf{y}$ **ne converge pas forcément** vers la référence (0.2, 0.4, 1, 0.5) (\leftrightarrow compensation d'erreurs) !

Importance de l'erreur de modèle (exemple artificiel !)

$$\mathbf{u}^{\text{vrai}}(x) = 0.2 + \nu x + Ex^2 + 0.5x^3, \quad -1 \leq x \leq 1, \quad \sigma_{\text{mes}} = 0.02.$$

	β_1	$\beta_2 (= \nu)$	$\beta_3 (= E)$	β_4
référence	0.2	0.4	1	0.5
$\beta^{\text{post}}, N = 10$	0.26 ± 0.52	0.74 ± 0.55	0.81 ± 0.82	
$\beta^{\text{post}}, N = 100$	0.25 ± 0.51	0.72 ± 0.52	0.85 ± 0.79	

TABLE: $\mathbf{u}^{\text{EF}}(x; \beta) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 x^2$, $\epsilon^{\text{mod}}(x) = O(1)$ (IC 95%)

	β_1	$\beta_2 (= \nu)$	$\beta_3 (= E)$	β_4
référence	0.2	0.4	1	0.5
$\beta^{\text{post}}, N = 10$	0.19 ± 0.027	0.53 ± 0.097	1.1 ± 0.31	
$\beta^{\text{post}}, N = 100$	0.20 ± 0.0096	0.40 ± 0.051	0.99 ± 0.23	

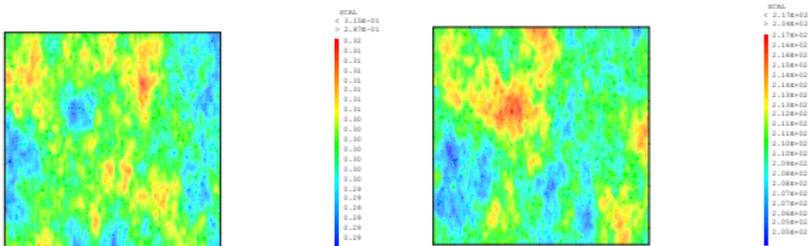
TABLE: $\mathbf{u}^{\text{EF}}(x; \beta) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 x^2$, $\epsilon^{\text{mod}}(x) = O(x^3)$ (IC 95%)

Avec une "mauvaise" structure d'erreur de modèle, $\beta | \mathbf{y}$ **peut ne toujours pas converger** vers la référence !

Identification à partir de mesures indirectes

Quelques remarques d'ouverture

- Si les valeurs de E et ν varient sensiblement d'un échantillon à un autre, il convient de proposer des lois adaptées pour E et ν (en incluant les dépendances statistiques).
- En cas de **variations spatiales**, l'inférence porte sur les propriétés statistiques de **champs aléatoires** (plus difficile...).



(a) Possible évolution de ν (b) Possible évolution de E

1 Introduction

2 Identification statistique de propriétés matériaux

- Définition du problème
- Théorie de l'estimation
- Identification à partir de mesures directes
- Identification à partir de mesures indirectes

3 Concevoir sous incertitudes

- Définition du problème
- Définir une relation d'ordre
- Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
- Robustesse et fiabilité

4 Conclusion

Problématique 2

Connaissant β (et les incertitudes associées), comment optimiser les caractéristiques du système considéré (**optimisation sous incertitudes**) ?



Problématique 2

Connaissant β (et les incertitudes associées), comment optimiser les caractéristiques du système considéré (**optimisation sous incertitudes**) ?

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{X}, \mathbf{h}(\mathbf{x}; \beta) \leq 0} y(\mathbf{x}; \beta),$$

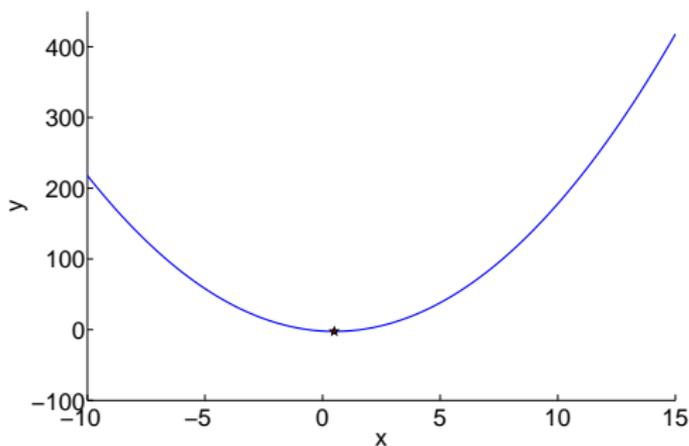
- y est une quantité d'intérêt choisie,
- \mathbb{X} est le domaine de définition de \mathbf{x} ,
- \mathbf{h} regroupe les contraintes sur le dimensionnement.

Comme β est aléatoire (estimation imprécise ou quantité "naturellement" aléatoire), $y(\mathbf{x}; \beta)$ et $\mathbf{h}(\mathbf{x}; \beta)$ deviennent **aléatoires**, ce qui modifie **fortement** le problème de minimisation.

Définition du problème

Exemple : $y(x; \beta) = \beta_1 x^2 + \beta_2 x + \beta_3$, $\beta_1 \sim \mathcal{N}(2, 1)$, $\beta_2 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$,
 $\beta_3 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$, $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ indépendants. (" $\min_{x, \beta} y(x; \beta)$ " = $-\infty$)

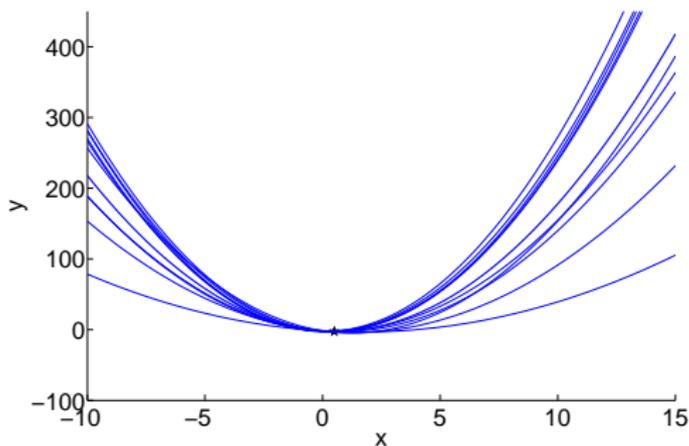
$$\hat{x}^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} y(x; \beta = \beta(\theta)).$$



Définition du problème

Exemple : $y(x; \beta) = \beta_1 x^2 + \beta_2 x + \beta_3$, $\beta_1 \sim \mathcal{N}(2, 1)$, $\beta_2 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$,
 $\beta_3 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$, $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ indépendants. (" $\min_{x, \beta} y(x; \beta)$ " = $-\infty$)

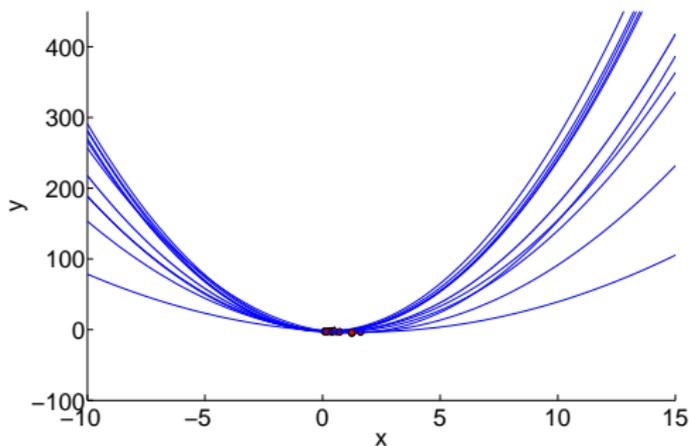
$$\hat{x}^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} y(x; \beta = \beta(\theta)).$$



Définition du problème

Exemple : $y(x; \beta) = \beta_1 x^2 + \beta_2 x + \beta_3$, $\beta_1 \sim \mathcal{N}(2, 1)$, $\beta_2 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$, $\beta_3 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$, $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ indépendants. (" $\min_{x, \beta} y(x; \beta)$ " = $-\infty$)

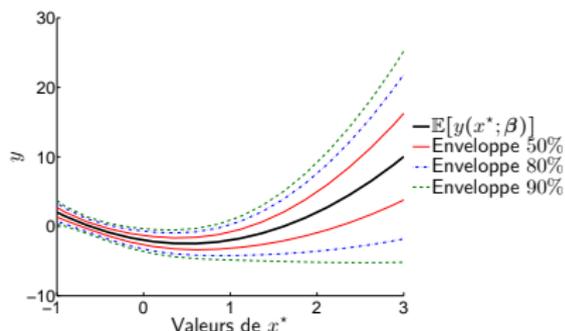
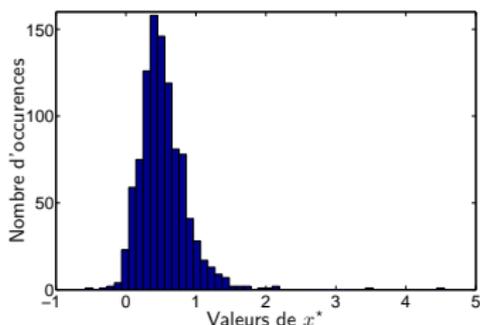
$$\hat{x}^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} y(x; \beta = \beta(\theta)).$$



Définition du problème

Exemple : $y(x; \beta) = \beta_1 x^2 + \beta_2 x + \beta_3$, $\beta_1 \sim \mathcal{N}(2, 1)$, $\beta_2 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$, $\beta_3 \sim \mathcal{N}(-2, 1)$, $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ indépendants. (" $\min_{x, \beta} y(x; \beta)$ " = $-\infty$)

$$\hat{x}^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} y(x; \beta = \beta(\theta)).$$



(c) Plusieurs minima possibles en fonction de $\beta(\theta)$

(d) Une sortie dispersée au niveau de chaque valeur de x^*

1 Introduction

2 Identification statistique de propriétés matériaux

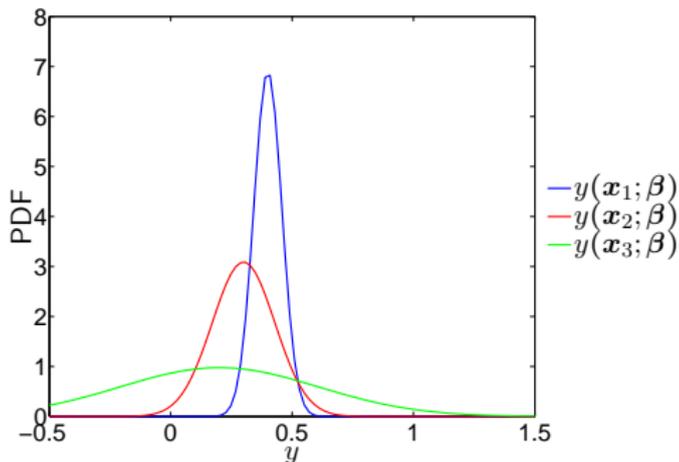
- Définition du problème
- Théorie de l'estimation
- Identification à partir de mesures directes
- Identification à partir de mesures indirectes

3 Concevoir sous incertitudes

- Définition du problème
- Définir une relation d'ordre
- Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
- Robustesse et fiabilité

4 Conclusion

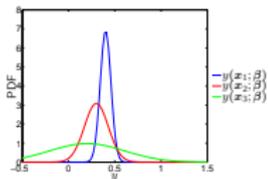
Définir une relation d'ordre



⇒ Comment choisir parmi x_1 , x_2 et x_3 ?

⇒ Quel sens donner à " x est meilleur que x' " ?

Définir une relation d'ordre



$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{X}} \mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})),$$

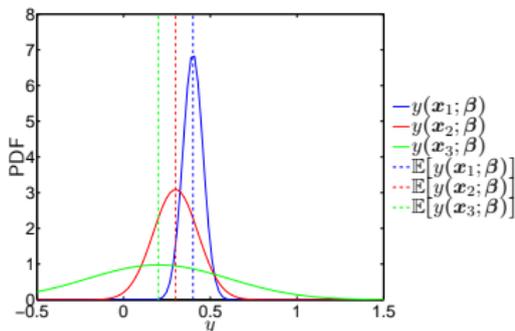
avec $\boldsymbol{\beta}$ une quantité aléatoire.

Quelle fonction \mathcal{C} pour exprimer " \mathbf{x} est meilleur que \mathbf{x}' " ?

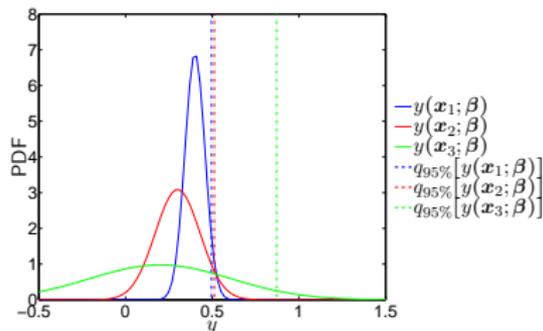
- Approche "**cas pire**" : $\max_{\boldsymbol{\beta}}[\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})] \leq \max_{\boldsymbol{\beta}}[\mathbf{y}(\mathbf{x}'; \boldsymbol{\beta})]$.
- Moyenne : $\mathbb{E}[\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})] \leq \mathbb{E}[\mathbf{y}(\mathbf{x}'; \boldsymbol{\beta})]$.
- Quantile : $q_{\alpha}[\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})] \leq q_{\alpha}[\mathbf{y}(\mathbf{x}'; \boldsymbol{\beta})]$.
- Conditional value-at-risk : $\mathbb{E}[\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}) \mid \mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}) \geq q_{\alpha}[\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})]] \leq \mathbb{E}[\mathbf{y}(\mathbf{x}'; \boldsymbol{\beta}) \mid \mathbf{y}(\mathbf{x}'; \boldsymbol{\beta}) \geq q_{\alpha}[\mathbf{y}(\mathbf{x}'; \boldsymbol{\beta})]]$.
- Approche multicritère ($\mathbb{E}[\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})], \text{Var}[\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})]$).
- ... (108 métriques différentes recensées dans Göhler et al., Journal of Mechanical Design, 2016.)

Définir une relation d'ordre

Le choix de la relation d'ordre est primordial !



(e) Moyenne : $x_3 > x_2 > x_1$



(f) Quantile 95% : $x_1 > x_2 > x_3$

- 1** Introduction
- 2** Identification statistique de propriétés matériaux
 - Définition du problème
 - Théorie de l'estimation
 - Identification à partir de mesures directes
 - Identification à partir de mesures indirectes
- 3** Concevoir sous incertitudes
 - Définition du problème
 - Définir une relation d'ordre
 - **Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"**
 - Robustesse et fiabilité
- 4** Conclusion

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{X}} \mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})),$$

- $\boldsymbol{\beta}$ regroupe les sources d'incertitudes,
- \mathcal{C} est une relation d'ordre choisie.

L'approche classique repose sur une "double boucle"

$$C^* = +\infty, n = 1$$

While $n \leq N$, (**boucle 1**)

→ "choisir" $\mathbf{x} \in \mathbb{X}$,

→ "évaluer" $\mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}))$ par des calculs répétés (**boucle 2**)

If $\mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})) \leq C^*$, $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}$, $C^* = \mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}))$ **end If**

end While

Simulateurs rapides à évaluer

Dans le cas de simulateurs "rapides" à évaluer, l'incertitude liée à l'estimation du critère $\mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}))$ peut être **négligée** (en effectuant suffisamment de répétitions).

⇒ on se ramène à une optimisation déterministe classique...

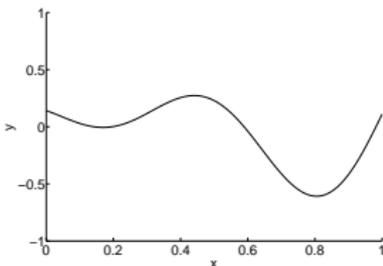
Principales difficultés

- $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}))$ est souvent non-linéaire et non convexe ⇒ utilisation d'heuristiques pour la résolution, sans convergence garantie...
- L'ensemble de définition \mathbb{X} peut présenter des contraintes d'égalité ou d'inégalité...

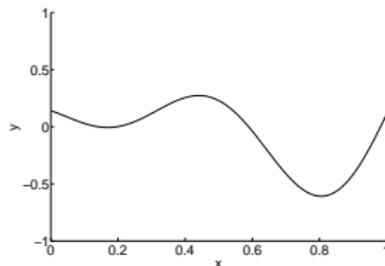
Simulateurs "chers"

Dans le cas de simulateurs "chers" à évaluer, il est **hors de question** d'effectuer un grand nombre de répétitions.

- ⇒ l'incertitude liée à l'estimation du critère $\mathcal{C}(\mathbf{y}(x; \beta))$ doit maintenant être intégrée dans la procédure d'optimisation :
- ⇒ avant chaque nouveau calcul : **"dupliquer ou explorer"** ?



(g) Duplication



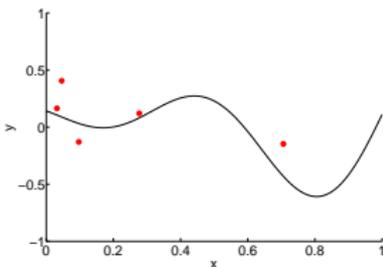
(h) Exploration

FIGURE: Fonction $x \mapsto \mathbf{y}(x; \beta = 0)$ à minimiser.

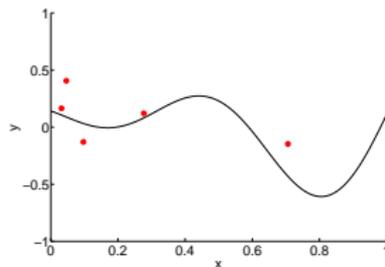
Simulateurs "chers"

Dans le cas de simulateurs "chers" à évaluer, il est **hors de question** d'effectuer un grand nombre de répétitions.

- ⇒ l'incertitude liée à l'estimation du critère $\mathcal{C}(\mathbf{y}(x; \beta))$ doit maintenant être intégrée dans la procédure d'optimisation :
- ⇒ avant chaque nouveau calcul : **"dupliquer ou explorer"** ?



(a) Duplication



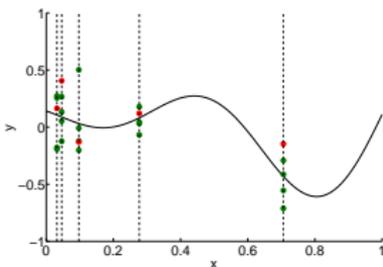
(b) Exploration

FIGURE: Information après 5 évaluations bruitées.

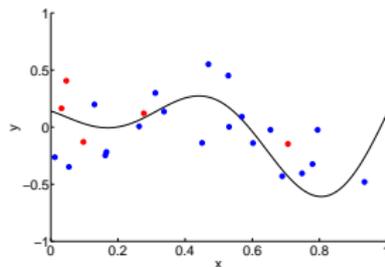
Simulateurs "chers"

Dans le cas de simulateurs "chers" à évaluer, il est **hors de question** d'effectuer un grand nombre de répétitions.

- ⇒ l'incertitude liée à l'estimation du critère $\mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \beta))$ doit maintenant être intégrée dans la procédure d'optimisation :
- ⇒ avant chaque nouveau calcul : **"dupliquer ou explorer"** ?



(a) Duplication



(b) Exploration

FIGURE: Nouvelles évaluations pour la minimisation.

Pourquoi dupliquer en optimisation ?

- **En théorie**, une mauvaise idée : le gain en information est nécessairement égal ou inférieur au calcul effectué au même point.
- **En pratique**, en facilitant la gestion du "bruit", dupliquer augmente les chances de rechercher de nouveaux points dans les bonnes directions.

⇒ un compromis relativement efficace consiste à augmenter graduellement le nombre de duplications lors de l'optimisation.

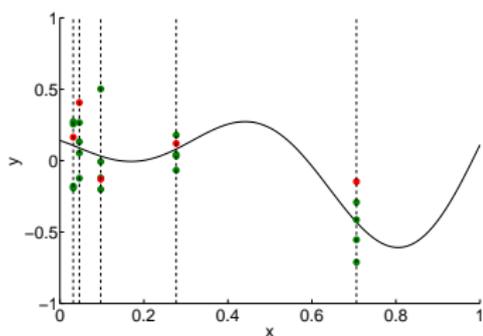
Simulateurs "chers"

Plus généralement, l'optimisation de simulateurs "chers" repose sur l'utilisation de **méthodes d'apprentissage**, permettant de **maximiser l'exploitation** des calculs disponibles, et d'**estimer la valeur du simulateur** en des points non calculés pour guider la recherche de minimum.

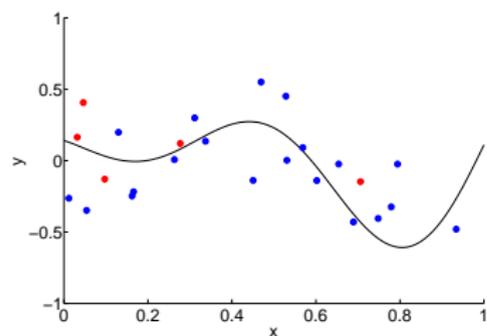
- pour les méthodes basées sur des duplications, l'apprentissage se fait alors sur la valeur approchée de \mathcal{C} .
- pour les méthodes sans duplications, on apprend directement la loi (statistique) de $y(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\beta})$ en tout \boldsymbol{x} , que l'on post-traite ensuite pour orienter les recherches.

Simulateurs "chers"

Retour à l'exemple précédent.



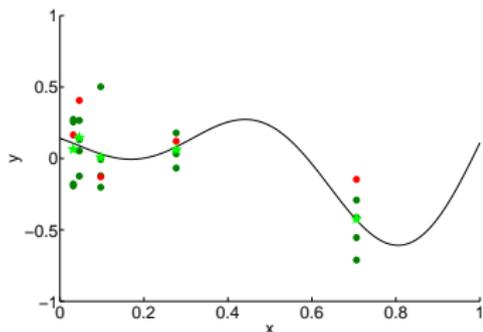
(a) Duplication



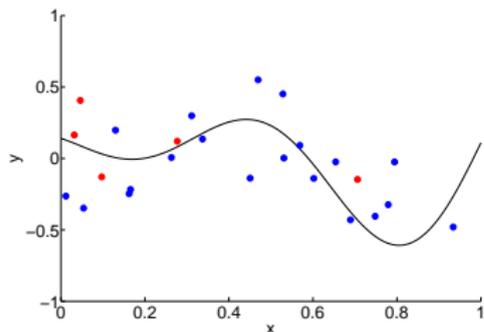
(b) Exploration

FIGURE: Information disponible initiale.

Retour à l'exemple précédent.



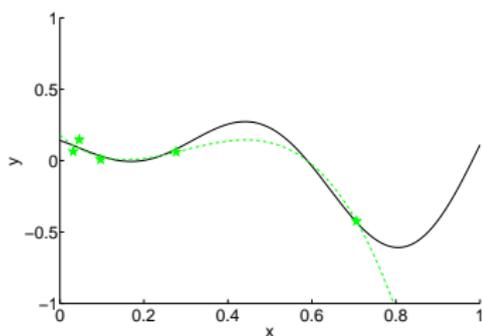
(a) Duplication



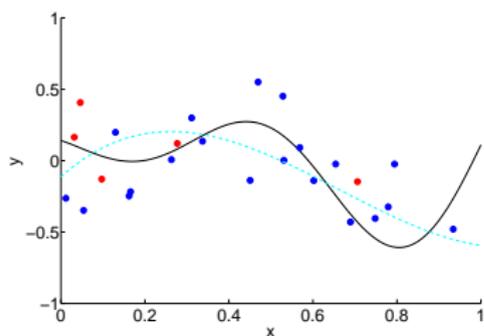
(b) Exploration

FIGURE: Condensation de l'information dans le cas dupliqué en prenant la moyenne des observations (par exemple).

Retour à l'exemple précédent.



(a) Duplication



(b) Exploration

FIGURE: Prédiction polynômiale pour l'orientation des nouveaux calculs.

1 Introduction

2 Identification statistique de propriétés matériaux

- Définition du problème
- Théorie de l'estimation
- Identification à partir de mesures directes
- Identification à partir de mesures indirectes

3 Concevoir sous incertitudes

- Définition du problème
- Définir une relation d'ordre
- Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
- Robustesse et fiabilité

4 Conclusion

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{X}} \mathcal{C}(\mathbf{y}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})),$$

avec \mathcal{C} une fonction coût à minimiser (\Leftrightarrow **relation d'ordre**) et $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$ un domaine de recherche.

- \Rightarrow En fonction de la nature des contraintes, qui peuvent être **déterministes** ou **probabilistes**, de la présence ou non d'incertitudes sur les sorties de simulation, on peut introduire une décomposition relativement générale des problèmes d'optimisation/conception sous incertitudes.

On distingue souvent fiabilité et robustesse, au sens où l'on parle plutôt de :

- **fiabilité** lorsque les incertitudes portent sur les contraintes,
- **robustesse** lorsque les incertitudes portent sur les fonctions objectifs.

		ROBUSTESSE		
		→		
		Pas de fonction objectif	Fonction objectif déterministe	Fonction objectif probabiliste
FIABILITE ↓	Pas de contraintes		« design optimal »	« design robuste »
	Contraintes déterministes	« domaine admissible »	« design optimal et admissible »	« design robuste et admissible »
	Contraintes probabilistes	« domaine fiable »	« design optimal et fiable »	« design robuste et fiable »

Un petit exercice de vocabulaire pour finir : on cherche à résoudre $x^* = \arg \min_{\mathbb{P}(x+\beta \geq 7) \geq 95\%} \mathbb{E}[y(x; \beta)], \beta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

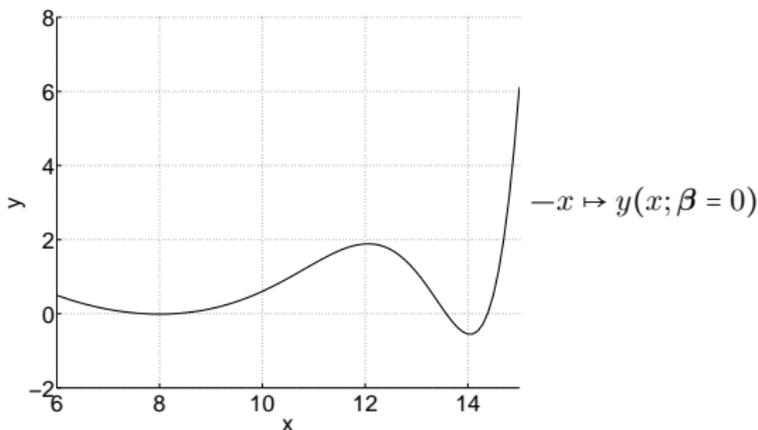


FIGURE: Si $\sigma = 0$, $\mathbb{E}[y(x; \beta)] = y(x; \beta = 0)$.

Un petit exercice de vocabulaire pour finir : on cherche à résoudre $x^* = \arg \min_{\mathbb{P}(x+\beta \geq 7) \geq 95\%} \mathbb{E}[y(x; \beta)], \beta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

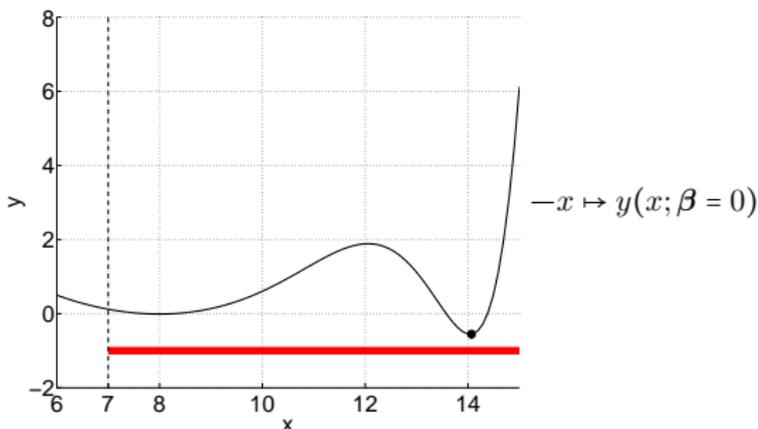


FIGURE: Que représente le trait rouge ? Le point noir ?

Un petit exercice de vocabulaire pour finir : on cherche à résoudre $x^* = \arg \min_{\mathbb{P}(x+\beta \geq 7) \geq 95\%} \mathbb{E}[y(x; \beta)], \beta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

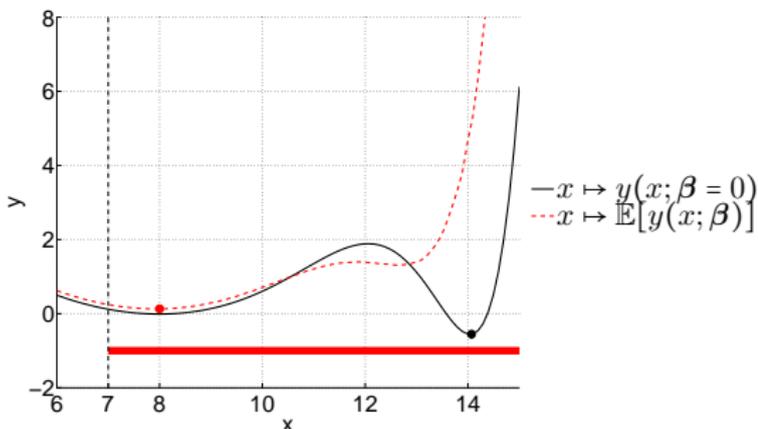


FIGURE: Que représente le point rouge ?

Un petit exercice de vocabulaire pour finir : on cherche à résoudre $x^* = \arg \min_{\mathbb{P}(x+\beta \geq 7) \geq 95\%} \mathbb{E}[y(x; \beta)], \beta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

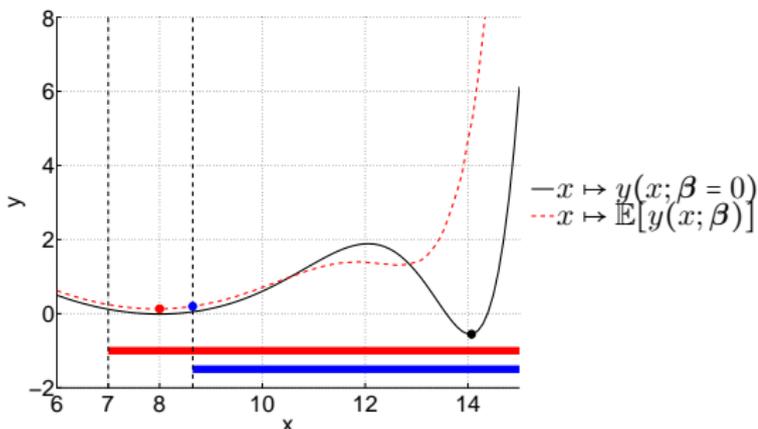


FIGURE: Que représente le trait bleu ? Le point bleu ?

- 1 Introduction
- 2 Identification statistique de propriétés matériaux
 - Définition du problème
 - Théorie de l'estimation
 - Identification à partir de mesures directes
 - Identification à partir de mesures indirectes
- 3 Concevoir sous incertitudes
 - Définition du problème
 - Définir une relation d'ordre
 - Simulateurs "rapides" et simulateurs "chers"
 - Robustesse et fiabilité
- 4 Conclusion

- Au niveau de l'inférence de propriétés matériaux à partir de mesures, présentation d'un unique formalisme (il en existe d'autres) d'inférence bayésienne.
- La déclinaison pratique de ce formalisme varie, selon les réponses aux questions suivantes :
 - identification **directe** ou **indirecte** ?
 - quantités d'intérêt **scalaires** ou **fonctionnelles** ?
 - quantités d'intérêt **dépendantes statistiquement** ou non ?
 - modèle numérique **rapide** à évaluer ou non ?
 - variabilité "naturelle" **négligeable** par rapport aux incertitudes de mesure ?
 - erreur de modèle **négligeable** ?
- Le résultat de l'identification n'est pas une unique valeur, mais une distribution de probabilité !

- La prise en compte des incertitudes sur les paramètres identifiés dans le processus de conception est à la fois difficile et primordiale.
- Afin de bien poser le problème, il est nécessaire :
 - de bien **lister les sources d'incertitudes**,
 - de contrôler si les incertitudes jouent sur la quantité à minimiser et/ou les contraintes,
 - d'adapter la **relation** d'ordre à l'objectif recherché,
 - d'adapter l'algorithme de résolution (dupliquer ou répliquer) au **coût de calcul** du simulateur.
- En sortie d'optimisation, il est possible de ne pas avoir un unique design, mais plusieurs designs.



Merci pout votre attention.