

# Ecole d'Eté EdF-CEA-INRIA

## Polynômes de Chaos

Jean-Marc Martinez

DM2S/SFME/LGLS

6 juillet 2011

- ▶ Chaos homogène de N. Wiener (1938)
  - ▶ étude de l'évolution de systèmes dynamique contenant des paramètres modélisés par des variables aléatoires
  - ▶ modélisation par développement en polynômes d'Hermite de variables gaussiennes
- ▶ Théorème de R.H. Cameron et W.T. Martin (1947)
  - ▶ convergence en moyenne quadratique du développement
- ▶ Mises en oeuvre par R.G. Ghanem (1990)
  - ▶ Stochastic Finite Elements - a spectral approach
- ▶ Polynômes de Chaos Généralisés par D. Xiu (2002)m
  - ▶ développements sur une base polynômes orthogonaux de variables aléatoires de lois plus générale : uniforme (Legendre), exponentielle (Laguerre), gamma (Jacobi), ...

## Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

- Approximation moindres carrés

- Intégration numérique

  - Monte Carlo

  - Méthodes de quadrature

- Construction de Smolyak

- Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

- Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références

## Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

Méthodes de calcul du développement polynomial

Approximation moindres carrés

Intégration numérique

Monte Carlo

Méthodes de quadrature

Construction de Smolyak

Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références

- ▶ Toute variable aléatoire de variance finie s'exprime par un développement en série

$$X(\xi) = \sum_{\alpha} x_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\xi)$$

- ▶  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots)$  vecteur gaussien de composantes indépendantes centrées réduites  $\xi_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$
- ▶  $\Psi_{\alpha}(\xi)$  polynôme du vecteur gaussien obtenu par produit de polynôme d'Hermite  $H_{\alpha_i}$  de degré  $\alpha_i$

$$\Psi_{\alpha}(\xi) = \prod_i H_{\alpha_i}(\xi_i)$$

- ▶  $\alpha$  le multi-indice  $(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$  composé des degrés  $\alpha_i = 0, 1, 2, \dots$  avec  $\text{degré}(\Psi_{\alpha}) = |\alpha| = \sum_i \alpha_i$ .

- ▶ Espace des variables aléatoires de variance finie est un espace de Hilbert muni du produit scalaire

$$\langle X, Y \rangle = E(XY)$$

- ▶ L'orthogonalité des variables  $H_n(\xi_i)$  et l'indépendance des  $\xi_i$  implique que la famille génératrice des polynômes constitue une *base orthogonale*

$$\langle \Psi_\alpha, \Psi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \|\Psi_\alpha\|^2$$

- ▶ Les coefficients du développement de la variable aléatoire en polynômes de chaos  $X = \sum_\alpha x_\alpha \Psi_\alpha(\xi)$  vérifient :

$$x_\alpha = \frac{1}{\|\Psi_\alpha\|^2} \langle X, \Psi_\alpha \rangle$$

- ▶ En retenant une base hilbertienne par normalisation des polynômes  $\Psi_\alpha$ , la moyenne et la variance s'expriment par :

$$\mathbb{E}(X) = x_0 \quad \sigma^2(X) = \sum_{\alpha > 0} x_\alpha^2$$

- ▶ La vitesse de convergence du développement dépend du modèle des incertitudes (lois sur les variables stochastiques  $\xi_i$ ).
- ▶ Lorsque les incertitudes d'entrées sont modélisées par des lois différentes de la loi normale, meilleure convergence (en général) sur une base de polynômes orthogonaux pour les densités associées aux entrées
- ▶ Extension sur une base de polynômes orthogonaux associés à des variables aléatoires  $\xi_i$  de lois différentes de la loi normale
  - ▶ Legendre pour la loi uniforme, Laguerre pour la loi exponentielle, Jacobi pour la loi bêta, ...
- ▶ En notant  $\varphi_{\alpha_i}^i$  le polynôme orthogonal associé à la variable  $\xi_i$  de degré  $\alpha_i$ , le développement en chaos généralisé de la variable  $X$

$$X = \sum_{\alpha} x_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\xi)$$

$$\Psi_{\alpha} = \prod_i \varphi_{\alpha_i}^i(\xi_i)$$

## Exemple

Soit la variable  $X = e^\xi$ ,  $\xi \sim U[0, 1]$ . Développement de  $X$  (loi log uniforme) sur une base de polynômes de Legendre. A partir des polynômes de Legendre  $P_n$  définis sur  $[-1, +1]$ , une transformation affine permet de définir des polynômes orthonormalisés pour la loi uniforme  $[0, 1]$ .

$$\Psi_k(\xi) = P_k(2\xi - 1) * \sqrt{2k + 1} \Rightarrow \int_0^1 \Psi_n(\xi)\Psi_m(\xi)d\xi = \delta_{m,n}$$

Troncature degré 2  $\rightarrow$  3 premiers polynômes  $\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2$  :

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 & \Rightarrow & \Psi_0(\xi) = 1 \\ P_1(x) &= x & \Rightarrow & \Psi_1(\xi) = \sqrt{3}(2\xi - 1) \\ P_2(x) &= (3x^2 - 1)/2 & \Rightarrow & \Psi_2(\xi) = \sqrt{5}(6\xi^2 - 6\xi + 1) \end{aligned}$$

Le calcul donne  $x_0 = e - 1$ ,  $x_1 = \sqrt{3} * (3 - e)$ ,  $x_2 = \sqrt{5} * (7e - 19)$ .

$$X(\xi) = e^\xi \simeq (e - 1) + 3(3 - e)(2\xi - 1) + 5(7e - 19)(6\xi^2 - 6\xi + 1)$$

$E(X) = x_0$  et erreur relative sur la variance  $< 1.e^{-3}$ .



### Une mise en oeuvre en mode non intrusif

#### Méthodes de calcul du développement polynomial

- Approximation moindres carrés

- Intégration numérique

  - Monte Carlo

  - Méthodes de quadrature

- Construction de Smolyak

- Heuristique sur le choix du degré

#### Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

#### Cubatures généralisées adaptatives

- Méthode de cubature adaptative ANISP

#### Librairie NISP sous SCILAB

#### Références

## Mise en oeuvre du chaos polynomial

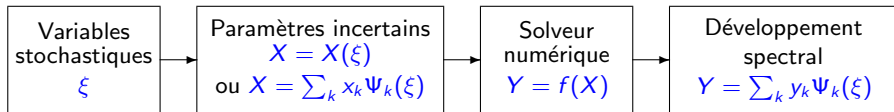
- ▶ Sur le modèle  $Y = f(X)$  la mise en oeuvre nécessite
  1.  $nx$  variables stochastiques  $\xi_j$  modélisant les incertitudes sur  $X$
  2.  $no$  degré fini sur le chaos polynomial
- ▶ Nombre de coefficients  $p + 1 = \sum_{\alpha} 1_{|\alpha|_1 \leq no}$

$$p + 1 = \frac{(nx + no)!}{nx! no!}$$

- ▶ Meilleure approximation de  $Y$  (en moyenne quadratique) dans l'espace engendré par les  $p + 1$  polynômes  $\Psi_k$  :

$$Y(\xi) \simeq \hat{Y}(\xi) = \sum_{|\alpha| \leq no} y_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\xi)$$

- ▶ Lorsque la base finie est fixée, l'approximation de  $Y$  est donc définie par les coefficients de son développement.



- ▶ Choix d'un groupe de variables stochastiques et d'un degré no  
⇒ Chaos Polynomial  $\Psi_\alpha$  est fixée
- ▶ Paramétrisation des incertitudes en entrée  
⇒  $X = X(\xi)$  ou par  $\sum_k x_k \Psi_k(\xi)$
- ▶ Spécification d'un n-échantillon (n compatible avec le degré no)  
⇒  $\xi^i \rightarrow X^i = X(\xi^i), i = 1, 2, \dots, n$
- ▶ Réalisation du plan d'expériences numériques associé  
⇒  $y_i = f(X(\xi^i)), i = 1, 2, \dots, n$
- ▶ Calcul des coefficients  $y_k$  par moindres carrés ou par intégration numérique

## Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

Approximation moindres carrés

Intégration numérique

Monte Carlo

Méthodes de quadrature

Construction de Smolyak

Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références



### Calcul des coefficients - Approximation moindres carrés

- ▶ Minimiser l'erreur quadratique entre la réponse  $y_i$  et son approximation par le polynôme de chaos

$$\sum_{i=1}^n [y_i - \sum_{|\alpha| \leq n_0} y_\alpha \Psi_\alpha(\xi^i)]^2$$

- ▶ En notant  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$  le vecteur des réponses,  $\mathbf{y}_\alpha$  le vecteur des coefficients et  $Z$  matrice à  $n$  lignes  $\Psi_{|\alpha| \leq n_0}(\xi^i)$ , problème classique de régression linéaire

$$\hat{\mathbf{y}}_\alpha = \arg \min_{\mathbf{y}_\alpha} \|\mathbf{y} - Z\mathbf{y}_\alpha\|^2 = (Z^T Z)^{-1} Z^T \mathbf{y}$$

- ▶ Travaux de G. Blatman (EdF) basés sur l'algorithme adaptatif LARS (Least Angle Regression) comme heuristique sur le choix des régresseurs  $\Psi_\alpha$ .
- ▶ Comment *bien* spécifier le plan d'expériences en tenant compte des régresseurs : plans optimaux (matrice d'information  $Z^T Z$ ), méthode séquentielle basée sur l'apprentissage actif (S. Gazut)



### Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

- Approximation moindres carrés

- Intégration numérique

  - Monte Carlo

  - Méthodes de quadrature

- Construction de Smolyak

- Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

- Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références



## Calcul des coefficients - Intégration numérique

- ▶ Rappel : Les coefficients s'obtiennent par projection, à partir de produits scalaires correspondant à une espérance c'est à dire à une intégration

$$\begin{aligned} y_\alpha &= \langle Y \Psi_\alpha \rangle \\ &= E[Y \Psi_\alpha] \end{aligned}$$

- ▶ En notant  $p_i(\xi_i)$  les densités de probabilité des variables  $\xi_i$  indépendantes

$$y_\alpha = \int Y(\xi) \Psi_\alpha(\xi) \prod p_i(\xi_i) d\xi_i$$

- ⇒ utilisation de méthodes d'intégration numérique pour approcher les coefficients  $y_\alpha$



### Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

- Approximation moindres carrés

- Intégration numérique

  - Monte Carlo

  - Méthodes de quadrature

- Construction de Smolyak

- Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

- Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références





## Calcul des coefficients par Monte Carlo

- Spécification d'un n-échantillon  $\xi^1, \xi^2, \dots, \xi^n$  selon la loi  $\prod p_i(\xi_i)$

$$\hat{y}_\alpha^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \Psi_\alpha(\xi^i)$$

$$\text{Var}(\hat{y}_\alpha^n) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (\Psi_\alpha(\xi^i) - \hat{y}_\alpha^n)^2$$

- A. Antoniadis (Ecole d'Eté 2005) → formulation séquentielle (Chan, Golub, Leveque 1983)

$$\hat{y}_\alpha^n = \frac{1}{n} [(n-1)\hat{y}_\alpha^{(n-1)} + y_n \Psi_\alpha(\xi^n)]$$

$$\text{Var}(\hat{y}_\alpha^n) = \frac{n-2}{n} \text{Var}(\hat{y}_\alpha^{n-1}) + \frac{1}{n^2} (y_n \Psi_\alpha(\xi^n) - \hat{y}_\alpha^{n-1})^2$$

- Les quantités  $\sigma_\alpha^2 = y_\alpha^2$  interviennent dans la décomposition fonctionnelle de la variance (indices de Sobol). Un estimateur sans biais est donné par :

$$\hat{\sigma}_\alpha^2 = (\hat{y}_\alpha^n)^2 - \text{Var}(\hat{y}_\alpha^n) \xrightarrow{\text{efficace}} \max(0, (\hat{y}_\alpha^n)^2 - \text{Var}(\hat{y}_\alpha^n))$$



### Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

- Approximation moindres carrés

- Intégration numérique

  - Monte Carlo

  - Méthodes de quadrature

- Construction de Smolyak

- Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

- Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références



## Calcul des coefficients par Quadrature

- ▶ Principes généraux des formules de quadrature 1D

$$I(f) = \int f(\xi)\omega(\xi)d\xi \simeq Q(f) := \sum_{i=1}^n \omega_i f(\xi_i)$$

où  $\omega$  est la fonction poids (densité de probabilité) et les  $\xi_i, \omega_i$  sont les points et poids de la formule

- ▶ Les méthodes diffèrent dans le choix de la subdivision  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ , des poids  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$  (méthodes des rectangles, des trapèzes, ...)
- ▶ Quadrature de Gauss
  1. les points de la quadrature sont les racines du polynôme associé à la fonction poids  $\omega$
  2. la formule est exacte si la  $f$  est un polynôme de degré  $\leq 2n - 1$ .
  3. pas de solutions analytiques pour le calcul des points et des poids
- ▶ Formules de Clenchaw-Curtis ou de Féjer (densités uniformes)
  1. les points sont les extrema des polynômes de Tchebychef
  2. solutions analytiques pour le calcul des points et des poids
  3. formule est exacte si la  $f$  est un polynôme de degré  $\leq n - 1$ , peu sensibles aux erreurs d'arrondis

### Quadratures multi dimensionnelles appelées Cubature

- ▶ Cas multi dimensionnel est obtenu par une tensorisation de formules de quadrature 1D
- ▶ Problème : croissance exponentielle du nombre de points en fonction de la dimension
- ▶ Si  $n$  est le nombre de points de la formule 1D, dans le cas  $d$ -dimensionnel on aura  $n^d$  points
- ▶ Solutions via la construction de Smolyak



## Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

## Méthodes de calcul du développement polynomial

- Approximation moindres carrés

- Intégration numérique

  - Monte Carlo

  - Méthodes de quadrature

- Construction de Smolyak

- Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

- Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références



## Construction de Smolyak (1/3)

Intégration numérique d'une fonction  $f^{(d)} : \Omega := [-1, +1]^d \rightarrow R$

$$I(f^{(d)}) := \int_{\Omega} f^{(d)}(\xi) d\xi$$

Formule de quadrature multidimensionnelle à  $n_l^{(d)}$  points de niveau  $l$  (relié à l'ordre de la formule) ...

$$Q_l(f^{(d)}) := \sum_{i=1}^{n_l^{(d)}} \omega_{li} f^{(d)}(\xi_{li})$$

... construite à partir de formule à 1D

$$Q_l^1 f^{(1)} := \sum_{i=1}^{n_l^{(1)}} \omega_{li} f^{(1)}(\xi_{li})$$

## Construction de Smolyak (2/3)

via des formules de différences entre quadrature de niveaux successifs

$$\Delta_k^{(1)} f^{(1)} := (Q_k^{(1)} - Q_{k-1}^{(1)}) f^{(1)} \quad Q_0^1 f^{(1)} := 0$$

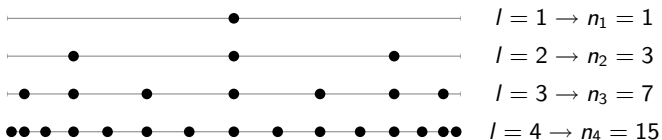
La construction de Smolyak

$$Q_l^1 f^{(d)} := \sum_{|\mathbf{k}|_1 \leq l+d-1} (\Delta_{k_1}^{(1)} \otimes \dots \otimes \Delta_{k_d}^{(1)}) f^{(d)}$$

avec le multi indice  $\mathbf{k}$  correspondant aux niveaux  $k_1, k_2, \dots, k_d$  tels que  $k_i \geq 1$  et donc  $\sum_{i=1}^d k_i = |\mathbf{k}|_1 \geq d$ .

## Construction de Smolyak (3/3)

- ▶ La construction de Smolyak est particulièrement efficace (nombre de points) lorsque les formules sont imbriquées
- ▶ Exemple des points de la formule de quadrature de Fejér sur  $[-1, 1]$  qui sont imbriqués quand  $n_k = 2^k - 1$









### Construction de Smolyak - Résultats

1. La fonction est évaluée sur une grille de points obtenue par tensorisation de grilles 1D.
2. Intérêt des grilles sont emboîtées
3. Si  $n_l^1 = \mathbf{O}(2^l)$  le nombre de points est en  $\mathbf{O}(2^l l^{d-1})$  à comparer à  $\mathbf{O}(2^{ld})$  de la tensorisation complète
4. Polynômes  $P_l^1$  de degré  $l$

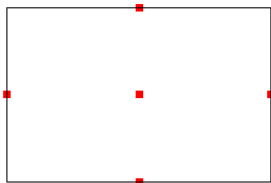
$$Q_l^1(P_l^1) \text{ exacte} \Rightarrow Q_l^d(P_l^d) \text{ exacte}$$

5. Pour les fonctions de dérivée d'ordre  $r$  bornée, l'erreur d'intégration est

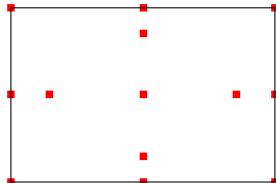
$$|E_l^d| = \mathbf{O}(2^{-lr} \times l^{(d-1)(r+1)})$$

6. Convergence qui dépend de la régularité de la fonction à intégrer mais également de la dimension (faiblement)

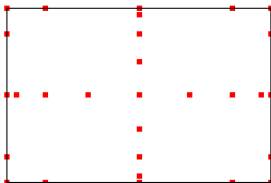
Niveau 2 - 5 points - degre 3



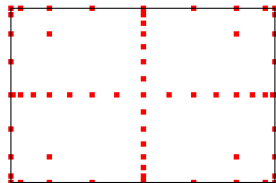
Niveau 3 - 13 points - degre 5



Niveau 4 - 29 points - degre 7



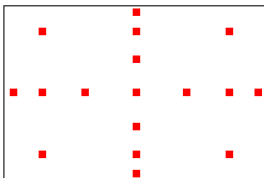
Niveau 5 - 65 points - degre 9



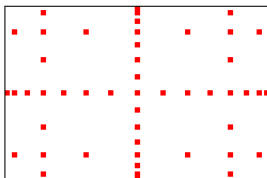
Niveau 2 - 5 points - degre 3



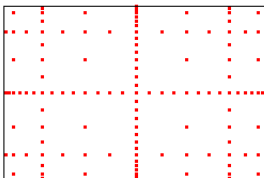
Niveau 3 - 17 points - degre 5



Niveau 4 - 49 points - degre 7

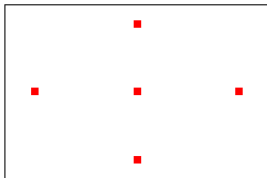


Niveau 5 - 129 points - degre 11

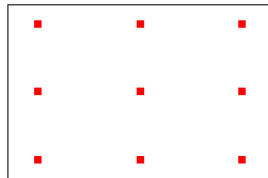


## Formule de Kronrod-Patterson (K. Petras)

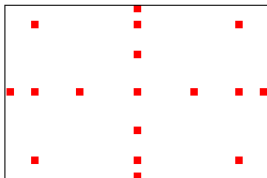
Level 2 - 5 points - degree 3



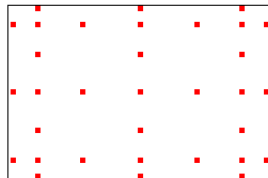
Level 3 - 9 points - degree 5



Level 4 - 17 points - degree 7

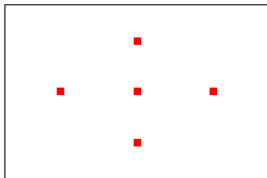


Level 5 - 33 points - degree 11

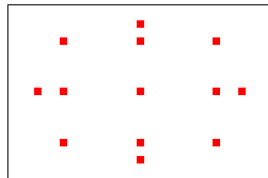


## Formule de Gauss-Legendre (non emboîtée)

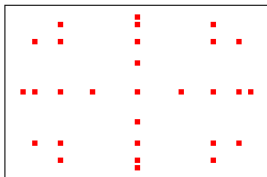
Niveau 2 - 5 points - degré 3



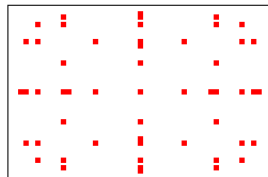
Niveau 3 - 13 points - degré 5

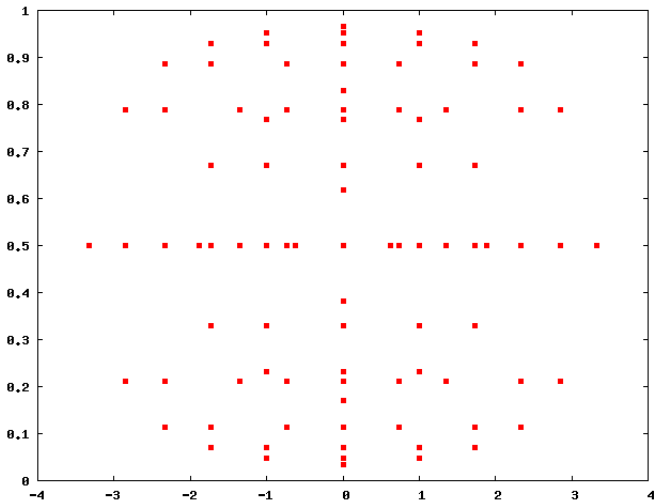


Niveau 4 - 29 points - degré 7



Niveau 5 - 53 points - degré 9



Formule de Gauss-Hermite  $\times$  Legendre (non emboîtée)



### Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

- Approximation moindres carrés

- Intégration numérique

  - Monte Carlo

  - Méthodes de quadrature

- Construction de Smolyak

- Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

- Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références





### Choix du degré du polynôme

- ▶ Lorsqu'on utilise une cubature permettant un calcul exact des coefficients si le modèle est un polynôme de degré  $d$ , l'approximation du modèle par le polynôme de degré maximal, c'est à dire  $d$ , n'est pas toujours la meilleure approximation
- ▶ Une heuristique : on intègre également le carré de la fonction (pas d'évaluations supplémentaires du modèle) et on calcule sa moyenne par le premier coefficient  $y_{c_0}$ . La variance du modèle est alors approchée de façon précise par

$$\mathbb{V}(Y) \simeq y_{c_0} - (y_0)^2$$

- ▶ On ne retient alors que les premiers termes du développement (en général calculés plus précisément que les derniers) tels que

$$\sum_{|\alpha|_1 \leq n_0} y_\alpha^2 \leq y_{c_0}$$

- ▶ Pour le modèle  $f(X_1, X_2, \dots, X_d)$  approché par le chaos de degré  $no$  via les transformations probabilistes  $X_i = X_i(\xi_i)$  :

$$Y(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_d) = \sum_{|\alpha|_1 \leq no} y_\alpha \Psi_\alpha(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_d)$$

on rappelle la moyenne et la variance obtenue par

$$\mathbb{E}(Y) = y_0 \quad \sigma^2(Y) = \sum_{0 < |\alpha| \leq np} y_\alpha^2$$

- ▶ On peut également obtenir la décomposition fonctionnelle (décomposition de Hoeffding) de la variance et donc calculer tous les indices de Sobol à partir des coefficients  $y_\alpha$

## Analyse de sensibilité (2/2)

- ▶ En décomposant  $X = X_u \oplus X_{\bar{u}}$  avec  $u \subset U = \{0, 1\}^d$
- ▶ Rappel : la part de la variance apportée par le groupe  $X_u$  est définie par

$$S_u = \frac{V[\mathbb{E}(Y|X_u)]}{V(Y)}$$

- ▶ La variance du modèle de régression  $\mathbb{E}(Y|X_u)$  est celle de  $\mathbb{E}(Y|\xi_u)$ .
- ▶ Ce modèle est extrait du chaos polynomial en retenant les polynômes  $\Psi_\alpha(\xi)$  fonction des composantes contenues dans  $\xi_u$  uniquement

$$\mathbb{E}(Y|X_u) = \sum_{0 < |\alpha|_1 < no, \alpha \times u = \alpha} y_\alpha \Psi_\alpha(\xi_u)$$

et donc la part de la variance apportée par  $X_u$

$$S_u = \frac{1}{V(Y)} \sum_{0 < |\alpha|_1 < no, \alpha \times u = \alpha} y_\alpha^2$$

## Exemple

On considère un polynôme de chaos de degré 3 fonction de 3 variables  $\rightarrow$  20 coefficients

$$Y(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 \leq 3} y_{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)} \Psi_{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$$

$y_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3}$			Contribution
$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	
0	0	0	Moyenne
1	0	0	variance apportée par la variable 1
2	0	0	
3	0	0	
0	1	0	variance apportée par la variable 2
0	2	0	
0	3	0	
0	0	1	variance apportée par la variable 3
0	0	2	
0	0	3	
1	1	0	variance apportée par l'interaction entre les variables 1 et 2
2	1	0	
1	2	0	
1	0	1	variance apportée par l'interaction entre les variables 1 et 3
2	0	1	
1	0	2	
0	1	1	variance apportée par l'interaction entre les variables 2 et 3
0	2	1	
0	1	2	
1	1	1	variance apportée par l'interaction entre les variables 1, 2 et 3

## Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

Approximation moindres carrés

Intégration numérique

Monte Carlo

Méthodes de quadrature

Construction de Smolyak

Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

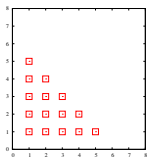
### Cubatures généralisées adaptatives

Méthode de cubature adaptative ANISP

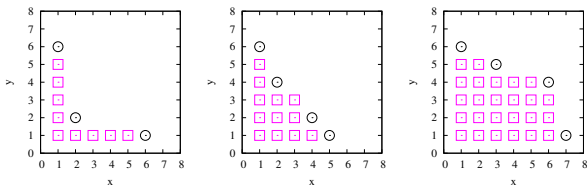
Librairie NISP sous SCILAB

Références

- ▶ La construction de Smolyak développe les dimensions en fonction d'un niveau fixé *a priori*. Le développement est le même sur toutes les dimensions (isotropie)
- ▶ Généralisation des méthodes de cubature permettant de développer de façon différente les dimensions → cubatures généralisées
- ▶ Une cubature généralisée peut être obtenue séquentiellement en développant les dimensions en fonction d'un indicateur d'erreur d'intégration permettant de détecter les dimensions les plus *significatives*
  - ▶ Th. Gerstner Thomas, M. Griebel, 2003
  - ▶ Thierry Crestaux, thèse CEA 2011



Ensemble d'indices de la cubature de Smolyak



Ensembles d'indices de cubatures généralisées



## Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

## Méthodes de calcul du développement polynomial

Approximation moindres carrés

Intégration numérique

Monte Carlo

Méthodes de quadrature

Construction de Smolyak

Heuristique sur le choix du degré

Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

## Cubatures généralisées adaptatives

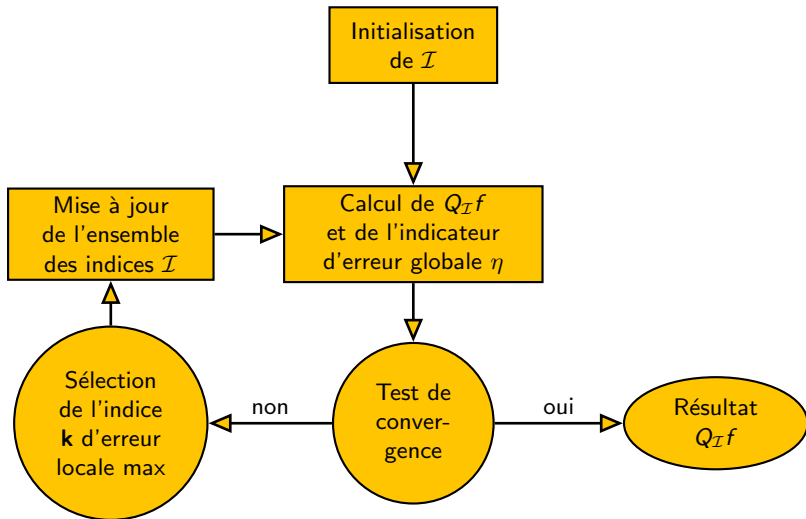
Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références



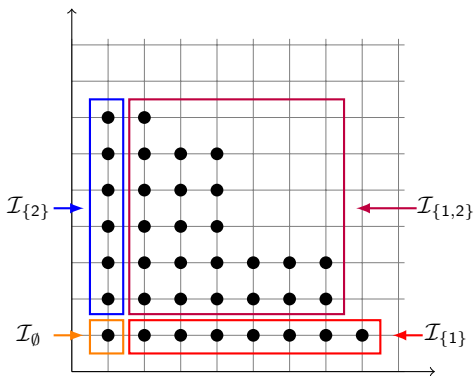
## Principe d'une cubature adaptative (Th. Crestaux)





### Méthode de cubature adaptative (Th. Crestaux)

Partition de l'ensemble des indices séparant les effets dus à une variable, aux interactions d'ordre 2, ... lien avec la décomposition fonctionnelle de la variance (ANOVA)





### Méthode ANISP (Th. Crestaux)

- ▶ Adaptive Non Intrusive Spectral Method
- ▶ Méthode adaptative dans la construction de polynômes de chaos
- ▶ La méthode de calcul des coefficients étant celle de NISP, la cubature adaptative est appliquée à l'approximation du moment d'ordre 2 de la fonction
- ▶ Puis le polynôme de chaos est construit en sélectionnant les éléments  $\Psi_\alpha$  de la base calculés exactement (si le modèle est polynomial) et via une heuristique équivalent à NISP, c'est à dire par troncature en ne retenant que les premiers éléments du développement de façon à ne pas dépasser le moment d'ordre 2 estimé lors de la première étape

## Cas test Ishigami (Th. Crestaux) (1/3)

Modèle  $y(\xi) = \sin(\xi_1) + a \sin^2(\xi_2) + b \xi_3^4 \sin(\xi_1)$ ,  $\xi_i \sim \mathcal{U}([-\pi, \pi])$

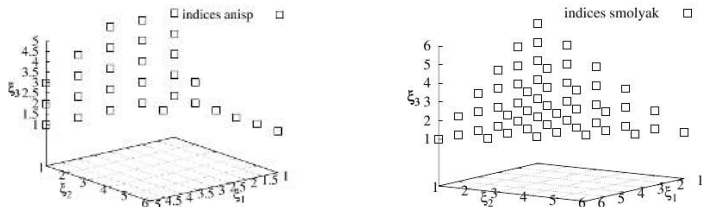
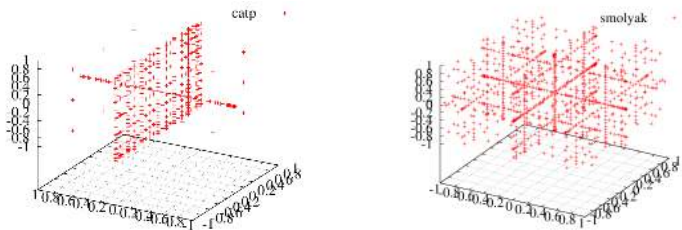


FIG.: La figure de gauche montre les indices de la formule de cubature adaptée pour la fonction d'Ishigami au carré pour une tolérance de  $10^{-3}$  et la figure de droite les indices de la formule de cubature de Smolyak de niveau 6.

### Cas test Ishigami (Th. Crestaux) (2/3)



**FIG.:** La figure de gauche montre les points de la formule de cubature adaptée pour la fonction d'Ishigami au carré pour une tolérance de  $10^{-3}$  (527 points) et la figure de droite les points de la formule de cubature de Smolyak de niveau 6 (1023 points).

## Cas test Ishigami (Th. Crestaux) (3/3)

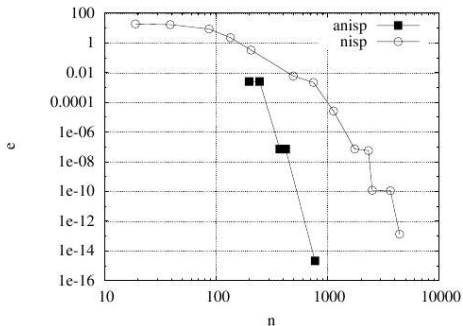


FIG.: Approximation Monte-Carlo du carré de l'erreur  $L_2$  sur la fonction d'Ishigami en fonction du nombre d'évaluations de la fonction.

## Introduction aux Polynômes de Chaos

Une mise en oeuvre en mode non intrusif

### Méthodes de calcul du développement polynomial

Approximation moindres carrés

Intégration numérique

Monte Carlo

Méthodes de quadrature

Construction de Smolyak

Heuristique sur le choix du degré




Polynôme de chaos et Analyse de sensibilité

Cubatures généralisées adaptatives

Méthode de cubature adaptative ANISP

Librairie NISP sous SCILAB

Références

- ▶ Composant logiciel développé dans le cadre du projet OPUS (Open source Platform for Uncertainty treatment in Simulation, 2008-2011)
- ▶ Toolbox de SCILAB sous , , 
- ▶ Aide en ligne, cas de démonstration
- ▶ Téléchargement de NISP via le portail ATOMS de Scilab

### Scilab script pour télécharger la toolbox

- `atomsInstall ("NISP" , %t )`
- `atomsLoad ("NISP" , %t )`



## Scilab script

```
function y = ishigami (x)
  a=7.
  b=0.1
  s1=sin(x(1))
  s2=sin(x(2))
  y(1) = s1 + a*s2**2 + b*s1*x(3)**4
endfunction
// Création des variables
srvx = setrandvar_new ( 3 );
rvu1 = randvar_new ( "Uniforme", -%pi , %pi ); ...
rvu2 = randvar_new ( "Uniforme", -%pi , %pi );
rvu3 = randvar_new ( "Uniforme", -%pi , %pi );
...
```

## Scilab script

```
...
// Création du plan d'expériences
srvu = setrandvar_new ();
setrandvar_addrandvar ( srvu, rvu1 );
setrandvar_addrandvar ( srvu, rvu2 );
setrandvar_addrandvar ( srvu, rvu3 );
degre = 9;
setrandvar_buildsample ( srvx, "Petras" , degre );
setrandvar_buildsample ( srvu, srvx );
```

## Scilab script

```
...
pc = polychaos_new ( srvx , 1 );
polychaos_setdegree ( pc , degre);
np = setrandvar_getsize ( srvu );
polychaos_setsizetarget ( pc , np );
for k=1 :np
    inputdata = setrandvar_getsample ( srvu , k );
    outputdata = ishigami ( inputdata );
    polychaos_settarget ( pc , k , outputdata );
end
polychaos_computeexp (pc, srvx, "Integration" );
...
```

## Scilab script (and stdout)

```
...
→ average = polychaos_getmean(pc)
average = 3.5
→ var = polychaos_getvariance(pc)
var = 13.842473
→ s = polychaos_getindexfirst(pc)';
→ disp("Indice du 1er ordre :"); disp(s)
    Indice du 1er ordre :
    0.3139532 0.4423253 8.086D-31
→ s = polychaos_getindextotal(pc)';
→ disp("Indice Totaux :"); disp(s)
    Indice Totaux :
    0.5576747 0.4423255 0.2437215
```

- ▶ R.G. Ghanem, P.D. Spanos *Stochastic finite elements - a Spectral approach*, Springer, 1991
- ▶ O.P. Le Maître, O.M. Knio *Spectral Methods for uncertainty Quantification*, Springer, 2010
- ▶ Th. Crestaux, *Méthode adaptative d'intégration multi-dimensionnelle et sélection d'une base de polynômes de chaos*, thèse mai 2011, Univ. Paris 13
- ▶ G. Blatman, *Chaos polynomial creux et adaptatif pour la propagation d'incertitudes et l'analyse de sensibilité*, octobre 2009, Univ. Blaise Pascal
- ▶ D. Xiu, G. Karniadakis, *Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos*, Journal of Computational Physics, 187 (2003)
- ▶ 3ème workshop du projet OPUS (Open source Platform for Uncertainty treatment in Simulation) <http://opus-project.fr>