

Table des matières

1	Introduction	3
2	Rappel mathématiques	4
3	Méthodologie	5
3.1	Choix de la base	5
3.2	Paramétrisation des paramètres incertains	5
4	Premier exemple	6
4.1	Représentation des paramètres incertains	6
4.2	Base du chaos polynomial	6
4.3	Plan d'expériences numériques	7
4.4	Réalisation du plan d'expériences numériques	7
4.5	Calcul des coefficients du polynôme	8
4.6	Edition de l'analyse de sensibilité	8
4.7	Programme complet	8
5	Cas test Ishigami	10
5.1	Représentation des paramètres incertains	10
5.2	Base du chaos polynomial	11
5.3	Sauvegardes des plans d'expériences	11
5.4	Polynôme de chaos	12
5.5	Réalisation du plan d'expériences numériques	13
5.6	Calcul des coefficients du polynôme	13
5.7	Sauvegarde du polynôme	13
5.8	Génération du code C du méta-modèle polynôme	14
5.9	Edition des moyennes et variances	15
5.10	Matrices des covariances et corrélations	15
5.11	Edition des indices de sensibilité du premier ordre et des indices de sensibilité totale	15
5.12	Edition de la décomposition fonctionnelle de la variance	16
5.13	Indices de sensibilité d'un groupe de variables	18
5.14	Quantiles et probabilité de dépassement de seuils	18
6	Application Programming Interface	20
6.1	Variables aléatoires - Classe RandomVariable	20
6.1.1	Constructeurs	20
6.1.2	Réalisations	20
6.1.3	Informations	20
6.2	Groupes de variables aléatoires - Classe SetRandomVariable	20
6.2.1	Constructeurs	20
6.2.2	Ajout d'une variable aléatoire	20
6.2.3	Réalisation d'un échantillon	20
6.2.4	Définition d'un échantillon réalisé par un autre composant (Open Turns, Uranie)	20
6.2.5	Information sur le groupe	21
6.2.6	Récupération des réalisations de l'échantillon	21
6.2.7	Sauvegarde du groupe	21
6.2.8	Effacement d'un échantillon et libération mémoire	21
6.3	Polynômes de chaos - Classe PolynomialChaos	21
6.3.1	Constructeurs	21
6.3.2	Dimensions	21
6.3.3	Degré du polynôme	21

6.3.4	Instances du polynôme	21
6.3.5	Transfert des sorties du modèle numérique au polynôme	21
6.3.6	Calcul des coefficients du polynôme	22
6.3.7	Moyennes, variances, covariances et corrélations	22
6.3.8	Indices de sensibilité : premier ordre et totale	22
6.3.9	Indices de sensibilité d'un groupe de variables	22
6.3.10	Anova fonctionnelle	22
6.3.11	Sauvegarde	22
6.3.12	Génération du code source	22
6.3.13	Quantiles et probabilités de dépassement de seuils	23

1 Introduction

Cette note présente les éléments d'une spécification fonctionnelle du chaos polynomial. Elle se limite à description fonctionnelle des méthodes dites non intrusives où les développements en chaos polynomial est obtenu après avoir réalisé un certain nombre de simulations du code numérique.

2 Rappel mathématiques

Les polynômes de chaos ...

3 Méthodologie

3.1 Choix de la base

variables stochastiques ... ξ

3.2 Paramétrisation des paramètres incertains

La paramétrisation des paramètres incertains x consiste à représenter la variable aléatoire par une fonction

variables aléatoires $x = x(\xi)$

4 Premier exemple

Ce premier exemple est très simple. On suppose un modèle mathématique défini par une fonction analytique codée numériquement en C. Dans cet exemple, le modèle mathématique est le suivant :

$$Y = f(X_1, X_2) = X_1 X_2$$

où X_1, X_2 sont des variables aléatoires de densités respectives normale $\mathcal{N}(\mu = 1., \sigma = 0.5)$ et uniforme $\mathcal{U}(\min = 1., \max = 2.5)$. Nous allons approcher le modèle par un développement en chaos polynomial (hermite \times legendre) de degré 2, valeur suffisante pour un développement exact. Le code C de la fonction analytique qui sera appelée, est :

```
=====  
void Exemple1(double x[], double y[]) {  
    y[0]=x[0]*x[1];  
}  
=====
```

4.1 Représentation des paramètres incertains

La première étape consiste à définir un ensemble permettant de regrouper les paramètres incertains du problème. Chaque paramètre incertain sera modélisé par une variable aléatoire.

```
=====  
1 : SetRandomVariable * gu = new SetRandomVariable();  
2 : gu->AddRandomVariable(new RandomVariable("Normale",1.,0.5));  
3 : gu->AddRandomVariable(new RandomVariable("Uniforme",1.,2.5));  
=====
```

1. On crée l'objet `gu` instance de la classe `SetRandomVariable` qui nous servira à regrouper l'ensemble des variables aléatoires modélisant les paramètres incertains du problème,
2. on y ajoute la première variable aléatoire X_1 de loi normale, de moyenne 1 et d'écart-type 0.5,
3. puis la seconde variable aléatoire X_2 de loi uniforme, répartie dans $[1., 2.5]$.

4.2 Base du chaos polynomial

Nous allons choisir naturellement pour cet exemple, un polynôme de chaos obtenu par tensorisation d'un polynôme de Hermite associé à la variable normale X_1 , et d'un polynôme de Legendre associé à la variable uniforme X_2 . Pour cela nous allons donc définir une base stochastique constituée d'une variable normale standardisée $\mathcal{N}(0, 1)$ et d'une variable uniforme standardisée $\mathcal{U}(0, 1)$. Cette base stochastique sera par la suite utilisée pour construire le polynôme de chaos.

```
=====  
1 : SetRandomVariable * gx = new SetRandomVariable();  
2 : gx->AddRandomVariable(new RandomVariable("Normale"));  
3 : gx->AddRandomVariable(new RandomVariable("Uniforme"));  
4 : PolynomialChaos * pc = new PolynomialChaos(gx);  
=====
```

1. On crée l'objet `gx` instance de la classe `SetRandomVariable` pour regrouper l'ensemble des variables stochastiques,
2. la première est une variable normale standardisée $\mathcal{N}(0, 1)$,
3. et la seconde, une variable uniforme standardisée $\mathcal{U}(0, 1)$;

4. puis à partir de `gx` on crée le polynôme de chaos. On a donc ici crée un polynôme de chaos issu de la tensorisation d'un polynôme de **Hermite** (la première variable stochastique a une densité normale) et d'un polynôme de **Legendre** (la seconde variable stochastique a une densité uniforme).

4.3 Plan d'expériences numériques

Nous allons spécifier un plan d'expériences numérique à partir d'une quadrature de Gauss. Pour notre exemple (polynôme de degré 2), il suffit donc de spécifier un degré 2 pour la quadrature. La formule d'intégration nous permettra donc de calculer exactement (sans erreur d'approximation) les coefficients du polynôme de chaos.

```
=====
1 : int degre = 2;
2 : gx->BuildSample("Quadrature",degre);
3 : gu->BuildSample(gx);
=====
```

1. On spécifie le degré,
2. on calcule la quadrature tensorisée pour un degré 2,
3. puis on calcule le plan d'expériences numériques à réaliser. Le plan est obtenu par transformations automatiques isoprobabiliste entre les variables stochastiques et les paramètres incertains.

4.4 Réalisation du plan d'expériences numériques

Cette partie du code illustre les appels au modèle mathématique. La fonction analytique est appelée pour chaque entrée du plan d'expériences numériques. Les sorties calculées sont récupérées par le polynôme.

```
=====
1 : int np=gu->GetSize();
2 : pc->SetSizeTarget(np);
3 : int nx=pc->GetDimensionInput();
4 : int ny=pc->GetDimensionOutput();
5 : double input[nx], output[ny];
6 : for(int k=1;k<=np;k++) {
    a : for(int i=1;i<=nx;i++) input[i-1]=gu->GetSample(k,i);
    b : Exemple1(input,ouput);
    c : for(int j=1;j<=ny;j++) pc->SetTarget(k,j,output[j-1]);
7 : }
```

1. on récupère la taille `np` du plan d'expériences à réaliser,
2. on alloue la mémoire nécessaire pour récupérer les sorties qui seront calculées par le modèle mathématique,
3. puis on récupère le nombre des entrées (`nx=2`)
4. et le nombre des sorties (`ny=1`),
5. on déclare de variables temporaires pour les entrées et de sorties du modèle mathématique;
6. début de la boucle des évaluations numériques
 - (a) saisie des entrées (`input`),
 - (b) appel à la fonction analytique (modèle mathématique),
 - (c) les sorties calculées (`output`) sont transférées au polynôme.
7. fin de la boucle


```

gx->AddRandomVariable(new RandomVariable("Normale"));
gx->AddRandomVariable(new RandomVariable("Uniforme"));
PolynomialChaos * pc = new PolynomialChaos(gx);

// Calcul du plan d'expériences numeriques par Quadrature
gx->BuildSample("Quadrature",degre);
gu->BuildSample(gx);

// Realisation du plan d'expériences numeriques
int nx = pc->GetDimensionInput(); // nx=2
int ny = pc->GetDimensionOutput(); // ny=1 (valeur par default)
int np=gu->GetSize(); // taille du plan d'expériences
pc->SetSizeTarget(np); // allocation memoire
double input[nx], output[ny];
for(int k=1;k<=np;k++) {
    for(int i=0;i<nx;i++) input[i]=gu->GetSample(k,i+1); // on recupere les entrees
    Exemple1(input,output); // appel au modele numerique
    for(int j=0;j<ny;j++) pc->SetTarget(k,j+1,output[j]); // transfert des sorties au pc
}

// Calcul du chaos polynomial
pc->SetDegree(degre);
pc->ComputeChaosExpansion(gx,"Integration");

// Edition des resultats
cout << "Mean = " << pc->GetMean() << endl;
cout << "Variance = " << pc->GetVariance() << endl;
cout << "Indice de sensibilite du 1er ordre"<<endl;
cout << " Variable X1 = " << pc->GetIndiceFirstOrder(1)<<endl;
cout << " Variable X2 = " << pc->GetIndiceFirstOrder(2)<<endl;
cout << "Indice de sensibilite Totale"<<endl;
cout << " Variable X1 = " << pc->GetIndiceTotalOrder(1)<<endl;
cout << " Variable X2 = " << pc->GetIndiceTotalOrder(2)<<endl;
}

```


5.5 Réalisation du plan d'expériences numériques

```
=====
1 : int np=gu->GetSize();
2 : pc->SetSizeTarget(np);
3 : int ne = pc->GetDimensionInput();
4 : int ns = pc->GetDimensionOutput();
5 : double input[ne], output[ns];
6 : for(int k=1;k<=np;k++) {
    a : for(int i=1;i<=ne;i++) input[i-1]=gu->GetSample(k,i);
    b : Ishigami(input,output);
    c : for(int j=1;j<=ns;j++) pc->SetTarget(k,j,output[j-1]);
7 : }
```

1. on récupère la taille np du plan d'expériences à réaliser,
2. on alloue la mémoire nécessaire pour récupérer les sorties qui seront calculées par le modèle mathématique,
3. comment récupérer la taille des entrées (égale à nx=3),
4. et celle des sorties (égale à ny=2),
5. on déclare de variables temporaires pour les entrées et de sorties du modèle mathématique;
6. début de la boucle des évaluations numériques
 - (a) saisie des entrées (input),
 - (b) appel à la fonction analytique (modèle mathématique),
 - (c) les sorties calculées (output) sont transférées au polynôme.
7. fin de la boucle

5.6 Calcul des coefficients du polynôme

Avant de calculer les coefficients du polynôme, nous devons évidemment définir son degré.

```
=====
1 : pc->SetDegree(degre);
2 : pc->ComputeChaosExpansion(gx,"Integration");
=====
```

1. On spécifie le degré du polynôme,
2. puis on calcule les coefficients par intégration numérique.

A partir de cette étape, le polynôme de chaos est complètement instancié, il peut être utilisé comme un méta-modèle avec la particularité d'être adapté à l'ANOVA fonctionnelle.

5.7 Sauvegarde du polynôme

La méthode `Save()` appliquée au polynôme permet de sauvegarder le polynôme dans un fichier pour une éventuelle utilisation ultérieure via le constructeur avec pour argument le nom du fichier.

```
=====
pc->Save((char *) "NispIshigami.dat");
=====
```

Le fichier `NispIshigami.dat`

```

=====
nx= 3 Legendre Legendre Legendre no= 8 p= 164 ny= 2 Coefficients[1]= 3.500000e+00 1.625418e+00
..... Coefficients[2]= 6.999999e+00 3.250836e+00 .....
=====

```

La sémantique est la suivante :

1. la dimension stochastique $nx=3$,
2. les polynômes orthogonaux,
3. le degré $no=8$,
4. le nombre de coefficients est $165 = p+1$,
5. le nombre des sorties $ny=2$,
6. puis la liste des valeurs des coefficients pour les sorties $j=1,2$. Le premier coefficient correspond à la moyenne : 3.5 pour la première sortie, et 6.999999 pour la seconde.

5.8 Génération du code C du méta-modèle polynôme

La méthode `GenerateCode()` appliquée au polynôme permet de générer le code C du méta-modèle associé au polynôme de chaos et de le sauvegarder dans un fichier.

```

=====
pc->GenerateCode((char *) "NispIshigami.C", (char *) "NispIshigami");
=====

```

Le code sera sauvegardé dans le fichier `NispIshigami.C`. La fonction d'appel est `NispIshigami(input,output)` où `input` est l'adresse d'un tableau de double représentant les entrées et `output` celle des sorties. Le fichier `NispIshigami.C` se présente sous la forme :

```

=====
#include <math.h>
double NispIshigami_beta[2][165]={
3.5,1.62542,3.71599e-16,1.39743e-16, .....};
int NispIshigami_indmul[165][3]={
0,0,0,1,0,0,0,1,0,0,0,1,2,0,0,1,1,0,1,.....};
void NispIshigami_legendre(double *phi,double x, int no) {
    int i;
    x=2.*x-1.;
    phi[0]=1.; phi[1]=x;
    for(i=1;i<no;i++) phi[i+1]= ((2.*i+1.) * x * phi[i] - i * phi[i-1]) / (i+1.);
    for(i=0;i<no;i++) phi[i] = phi[i] * sqrt(2.* i + 1.);
}
void NispIshigami(double *x, double *y) {
    int i,j,k,nx,ny,no,p;
    nx=3;ny=2;no=8;p=164;
    double psi[165],phi[3][9],xi[3],s;
    for(i=0;i<nx;i++) xi[i]=x[i];
    NispIshigami_legendre(phi[0],xi[0],8);
    NispIshigami_legendre(phi[1],xi[1],8);
    NispIshigami_legendre(phi[2],xi[2],8);
    for(k=0;k<=p;k++) {
        for(psi[k]=1.,i=0;i<nx;i++) psi[k]=psi[k]*phi[i][NispIshigami_indmul[k][i]];
    }
    for(j=0;j<ny;j++) {

```


On peut également obtenir une estimation de la probabilité de dépassement d'un seuil par la méthode `InvQuantile(seuil)`. Et donc en faisant :

```
=====
cout << pc->GetInvQuantile(pc->GetQuantile((double) 0.95)) << endl;
=====
```

on devrait obtenir une valeur très proche de 0.95.

6 Application Programming Interface

6.1 Variables aléatoires - Classe RandomVariable

6.1.1 Constructeurs

RandomVariable("Normale")	normale, moyenne $\mu = 0$, écart type $\sigma = 1$
RandomVariable("Normale",double m,double s)	normale, moyenne $\mu = m$, écart type $\sigma = s$
RandomVariable("Uniforme")	uniforme, $[0, 1]$
RandomVariable("Uniforme",double min,double max)	uniforme, $[\text{min}, \text{max}]$
RandomVariable("Exponentielle")	exponentielle, paramètre $\lambda = 1$
RandomVariable("Exponentielle",double lambda)	exponentielle, paramètre $\lambda = \text{lambda}$
RandomVariable("LogNormale",double m, double s)	log normale de moyenne XXXXXX
RandomVariable("LogUniforme",double min,double max)	log uniforme, $[\text{min}, \text{max}]$

6.1.2 Réalisations

double GetValue()	une réalisation de la variable
double GetValue(RandomVariable *va, double x)	une réalisation à partir de la valeur x de la variable aléatoire *va obtenue par transformation probabiliste

6.1.3 Informations

void GetLog()	édition sur la sortie standard des informations sur la variable : loi, paramètres
---------------	---

6.2 Groupes de variables aléatoires - Classe SetRandomVariable

6.2.1 Constructeurs

SetRandomVariable()	par défaut
SetRandomVariable(int n)	un groupe de n variables uniformes $[0, 1]$
SetRandomVariable(char *fichier)	un groupe à partir d'une sauvegarde préalable dans un fichier

6.2.2 Ajout d'une variable aléatoire

void AddRandomVariable(RandomVariable *va)	ajout d'une variable aléatoire *va
--	------------------------------------

6.2.3 Réalisation d'un échantillon

void BuildSample("MonteCarlo", int n)	échantillon de taille n par tirages indépendants
void BuildSample("Lhs", int n)	échantillon de taille n par Latin Hypercube
void BuildSample("QmcSobol", int n)	échantillon de taille n par suite à discrédance faible de Sobol
void BuildSample("Quadrature", int niveau)	échantillon par Quadrature tensorisée, formule exacte pour un polynôme de degré niveau-1
void BuildSample("Cubature", int niveau)	échantillon par Cubature formule exacte pour un polynôme de degré niveau
void BuildSample(SetRandomVariable *gva)	réalisation d'un échantillon à partir d'un échantillon d'un autre groupe de variables (transformations probabilistes)

6.2.4 Définition d'un échantillon réalisé par un autre composant (Open Turns, Uranie)

void SetSample(string type, int size)	allocation mémoire afin de récupérer un échantillon en spécifiant le type et la taille size
void SetSample(int k, int i, double value)	affecte la valeur value à l'exemple k de la variable i

6.2.5 Information sur le groupe

int GetDimension();	nombre de variables aléatoires du groupe (0 par défaut)
int GetSize();	taille de l'échantillon (0 par défaut)
void GetLog();	édition sur la sortie standard des informations sur les variables aléatoires du groupe

6.2.6 Récupération des réalisations de l'échantillon

double GetSample(int k, int i);	valeur de la variable i de la réalisation k
---------------------------------	---

6.2.7 Sauvegarde du groupe

void Save("fichier");	sauvegarde du groupe dans un fichier y compris la sauvegarde éventuelle de l'échantillon
-----------------------	--

6.2.8 Effacement d'un échantillon et libération mémoire

void FreeMemory();	effacement de l'échantillon éventuel du groupe et libération mémoire
--------------------	--

6.3 Polynômes de chaos - Classe PolynomialChaos

6.3.1 Constructeurs

PolynomialChaos(SetRandomVariable *gvx)	à partir d'un groupe de variables aléatoires standardisées, et par défaut le nombre de sorties est 1.
PolynomialChaos(SetRandomVariable *gvx, int ny)	à partir d'un groupe de variables stochastiques et en précisant le nombre de sorties ny
PolynomialChaos(char *fichier);	à partir d'une sauvegarde préalable dans un fichier

6.3.2 Dimensions

void SetDimensionOutput(int ny);	définition du nombre de sorties est ny
int GetDimensionOutput();	récupère le nombre de sorties
int GetDimensionInput();	récupère le nombre d'entrées
int GetDimensionExpansion();	récupère le nombre de coefficients (n-1)

6.3.3 Degré du polynôme

void SetDegree(int degre);	définition du degré
int GetDegree();	récupère le degré

6.3.4 Instances du polynôme

void SetInput(int i, double x);	affecte la valeur x à l'entrée i
void ComputeOutput();	calcul des sorties
double GetOutput(int j);	récupération de la sortie, par défaut j=1

6.3.5 Transfert des sorties du modèle numérique au polynôme

void ReadTarget(char *fichier);	Lecture d'un fichier des valeurs cibles que le polynôme devra approcher
void SetSizeTarget(int np);	définition du nombre des valeurs cibles
void SetTarget(int k, int j, double output);	définition de la valeur cible output pour la sortie j de l'exemple k
void FreeMemoryTarget();	libération mémoire de la zone des cibles

6.3.6 Calcul des coefficients du polynôme

void ComputeChaosExpansion(SetRandomVariable *gvx, "Integration")	Calcul des coefficients par Intégration , rappel du groupe des variables stochastiques pour récupérer l'échnatillon
void ComputeChaosExpansion(SetRandomVariable *gvx, "Regression")	Calcul des coefficients par Régression , rappel du groupe des variables stochastiques pour récupérer l'échnatillon

6.3.7 Moyennes, variances, covariances et corrélations

double GetMean(int j)	moyenne de la sortie j
double GetVariance(int j)	variance de la sortie j
double GetCovariance(int i, int i)	covariance des sorties i, j
double GetCorrelation(int i, int i)	coefficient de corrélation des sorties i, j

6.3.8 Indices de sensibilité : premier ordre et totale

double GetIndiceFirstOrder(int j)	Indice de sensibilité du premier ordre de la variable i
double GetIndiceTotalOrder(int j)	Indice de sensibilité toptale de la variable i

6.3.9 Indices de sensibilité d'un groupe de variables

void SetGroupAddVar(int i)	ajout de la variable i dans le groupe
void SetGroupEmpty();	le groupe est mis à vide
double GetGroupIndice(int j)	indice de sensibilité dû à l'ensemble des variables du groupe sur la sortie j. Par défaut j = 1
double GetGroupIndiceInteraction(int j)	Indice de sensibilité dû à l'interaction des variables du groupe sur la sortie j. Par défaut j = 1

6.3.10 Anova fonctionnelle

void GetAnova(int j)	Edition de l'ANOVA fonctionnelle pour la sortie j. Par défaut j = 1
void GetAnovaOrdered(double seuil, int j)	Edition ordonnée de l'ANOVA fonctionnelle pour la sortie j, de la plus grande valeur à la plus petite. Par défaut seuil = 1. et j = 1

6.3.11 Sauvegarde

void Save(char *fichier)	Sauvegarde du polynôme dans un fichier
--------------------------	--

6.3.12 Génération du code source

void GenerateCode(char *fichier, char *name)	Sauvegarde du code source du polynôme dans un fichier. Le nom d'appel de la fonction C est donné par la chaîne name.
--	--

6.3.13 Quantiles et probabilités de dépassement de seuils

void BuildSample(string methode,int np,int order=1)	Tirages d'un échantillon par une méthode aléatoire MonteCarlo", "Lhs") de taille np. Pour les quantiles, order = 1 (valeur par défaut).
void Quantile(double alpha, int j=1)	Valeur du quantile d'ordre $\alpha \in [0, 1]$ pour la sortie j (par défaut à 1)
void InvQuantile(double seuil, int j=1)	Estimation de la probabilité de dépassement de la valeur seuil pour la sortie j (par défaut à 1).