

Sommaire.

- 1 Les Méthodes Spectrales Stochastiques
- 2 Méthode spectrale non intrusive
 - Intégration numérique
- 3 Méthode spectrale intrusive

Simulation numérique

Supposons l'existence préalable :

- d'un modèle mathématique d'un système physique étudié,
- d'une méthode de résolution numérique de ce modèle,
- de la disponibilité d'un outil numérique (un code de calcul) qui résout le problème déterministe d'une complexité variable, selon le système considéré et le niveau de fidélité que l'on désire.

On recherche la réponse Y d'un système gouverné par un opérateur (le modèle) que l'on note symboliquement :

$$Y = \mathcal{M}(X) = 0$$

ici $X = \{X_1, \dots, X_M\}$: vecteur aléatoire en entrée de dimension M .

Contexte probabiliste

- On appelle \mathcal{L}_R^2 un espace des variables aléatoires de variance finie si

$$E(X^2) = \int_{\Omega} X^2(\omega) dP(\omega) = \int_{\mathcal{D}_X} x^2 f_X(x) dx < \infty$$

$f(x)$: densité de probabilité de X .

- \mathcal{L}_R^2 est un espace de Hilbert muni du produit scalaire

$$\langle X_1, X_2 \rangle_{\mathcal{L}_R^2} = E(X_1 X_2) = \int_{\Omega} X_1(\omega) X_2(\omega) dP(\omega) = \int_{\mathcal{D}_X} x_1 x_2 f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

où f_{X_1, X_2} est la probabilité jointe du vecteur aléatoire $\{X_1, X_2\}^T$.

- Ce produit scalaire définit la norme

$$\|X\|_{\mathcal{L}_R^2} = \sqrt{E(X^2)}.$$

Contexte probabiliste

On suppose que :

- le modèle physique, est une fonction d'une variable aléatoire $X(\omega)$, $\omega \in \Omega$ définie par une distribution de probabilité f_X .
- la quantité d'intérêt Y est aussi une variable aléatoire telle que $Y \in \mathcal{L}_R^2$.

On note \mathcal{L}^2 l'espace des fonctions d'une variable aléatoire (ou un vecteur aléatoire) carré intégrable muni de la distribution de probabilité des valeurs en entrée.

On s'intéresse ici à décomposer Y dans une base adaptée et orthogonale de \mathcal{L}^2 muni du produit scalaire correspondant à la densité de probabilité $f_X(x)$.

Les Méthodes spectrales Stochastiques

- La théorie du chaos homogène veut que cette base soit construite à partir de polynômes orthogonaux.
- Les méthodes spectrales utilisent la dépendance fonctionnelle de la solution du modèle vis-à-vis des VAs. Ces dépendances sont exprimées par un développement en série du type :

$$Y(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \Psi_k(\xi),$$

- ξ vecteur des variables aléatoires
 - Ψ_k fonctionnelles des VAs, choisies de manière adéquate,
 - α_k coefficients déterministes du développement spectral de la solution
- La construction de l'approximation polynomiale nécessite la connaissance de la base polynomiale $\psi_k(X)$, le calcul des coefficients α_k polynomiaux ainsi que le **degré du polynôme P (troncature)**.

Bases d'approximation

- Pour la plupart des densités de probabilité connues, il existe des correspondances avec une famille de polynômes orthogonaux connue.

Exemple :

- les variables aléatoires gaussiennes (loi de probabilité normale) : utilisation des polynômes d'Hermite.
- les variables aléatoires uniformes (loi de probabilité uniforme) : utilisation des polynômes de Legendre.
- $\psi_k(\xi)$ polynôme du vecteur gaussien obtenu par produit de polynôme d'Hermite \mathcal{H}_{k_i} de degré k_i :

Développement en Polynômes de Chaos

En résumé :

- Le développement en PC est une décomposition spectrale polynômiale de variables aléatoires sur une base de polynômes orthogonaux. Ces polynômes sont orthogonaux par rapport à la mesure d'un vecteur de variables aléatoires indépendantes.
- En propagation d'incertitudes, la variable aléatoire décomposée est la réponse du modèle et le vecteur de variables aléatoires est constitué des variables aléatoires qui décrivent les paramètres incertains.
- Le développement classique en PC utilise une base de polynômes de Hermite de variables aléatoires gaussiennes qui converge pour n'importe quelle fonction \mathcal{L}^2 dans l'espace aléatoire.
- Ce développement n'est pas toujours optimal et ne peut pas être appliqué dans le cas d'un champ aléatoire discret. Xiu et Karniadakis ont proposé d'utiliser d'autres variables aléatoires en plus des variables gaussiennes et de les associer à d'autres bases de polynômes orthogonaux.
- Ces nouvelles décompositions ont été appelées **Polynômes de Chaos Généralisés** ou **Askey-Chaos**.

Polynômes de chaos généralisés

Les polynômes de Chaos formant la base utilisée dans la décomposition sont obtenus en pratique par le procédé de Gram-Schmidt, et en utilisant le produit scalaire associé à la loi de probabilité étudiée. Les familles de polynômes obtenues sont connues, et forment la famille des polynômes de Wiener-Askey.

	Variables aléatoires ξ	Polynôme associé ($\Psi(\xi)$)	Support
Distribution continue	Gaussienne	Hermite	$] -\infty, +\infty[$
	Gamma	Laguerre	$[0, +\infty[$
	Bêta	Jacobi	$[a, b]$
	Uniforme	Legendre	$[a, b]$
Distribution discrète	Poisson	Charlier	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Binomiale	Krawtchouk	$\{0, 1, \dots, N\}$
	Binomiale négative	Meixner	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Hypergéométrique	Hahn	$\{0, 1, \dots, N\}$

Polynômes de Chaos unidimensionnels

- Soit la VA ξ de densité gaussienne

$$pdf(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right]$$

- Soit $\psi_p(\xi)$ le polynôme de chaos de degré p . Par définition

- $\psi_0(\xi) = 1$
- $\psi_1(\xi)$ de forme $a_0^1 + a_1^1 \xi$ orthogonal à ψ_0 : $\langle \psi_0, \psi_1 \rangle = 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 pdf(\xi) d\xi = a_0^1 + a_1^1 \int_{-\infty}^{\infty} \xi pdf(\xi) d\xi$$

arbitrairement on pose $a_1^1 = 1 \Rightarrow a_0^1 = 0 \Rightarrow \psi_1(\xi) = \xi$.

- $\psi_2(\xi)$ de forme $a_0^2 + a_1^2 \xi + a_2^2 \xi^2$ est orthogonal à ψ_0 et ψ_1 : $\langle \psi_0, \psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$
 $\Rightarrow \psi_2(\xi) = \xi^2 - 1$

Les polynômes de Chaos unidimensionnels pour la mesure gaussienne constituent la famille des polynômes d'Hermite.

$$\psi_0(\xi) = 1; \psi_1(\xi) = \xi, \psi_2(\xi) = \xi^2 - 1, \psi_3(\xi) = \xi^3 - 3\xi$$

Polynômes d'Hermite

Définition : récurrences pour tous les nombres entiers :

$$H_{n+2}(x) = x H_{n+1}(x) - (n+1) H_n(x) \quad \left(\text{ou } \hat{H}_n(x) = 2^{n/2} H_n(x\sqrt{2}) \right)$$

Initialisation

$$H_0 = 1, H_1(x) = x.$$

Polynômes d'Hermite

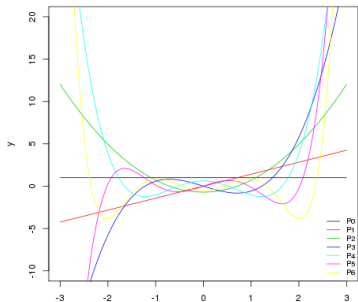
$$H_2(x) = x^2 - 1$$

$$H_3(x) = x^3 - 3x$$

$$H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$$

$$H_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x$$

$$H_6(x) = x^6 - 15x^4 + 45x^2 - 15.$$



Bases de polynôme multidimensionnée

Exemple bidimensionnel :

$$\psi_0(\xi_1, \xi_2) = H_0(\xi_2) H_0(\xi_1) = 1$$

$$\psi_1(\xi_1, \xi_2) = H_0(\xi_2) H_1(\xi_1) = \xi_1$$

$$\psi_2(\xi_1, \xi_2) = H_1(\xi_2) H_0(\xi_1) = \xi_2$$

$$\psi_3(\xi_1, \xi_2) = H_0(\xi_2) H_2(\xi_1) = \xi_1^2 - 1$$

$$\psi_4(\xi_1, \xi_2) = H_1(\xi_2) H_1(\xi_1) = \xi_1 \xi_2$$

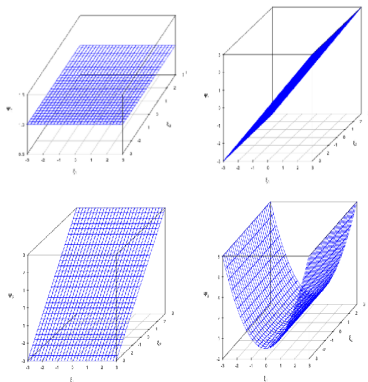
$$\psi_5(\xi_1, \xi_2) = H_2(\xi_2) H_0(\xi_1) = \xi_2^2 - 1$$

$$\psi_6(\xi_1, \xi_2) = H_0(\xi_2) H_3(\xi_1) = \xi_1^3 - 3\xi_1$$

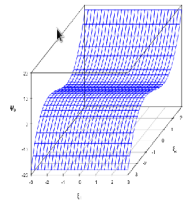
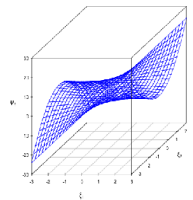
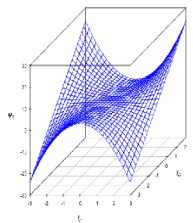
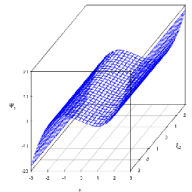
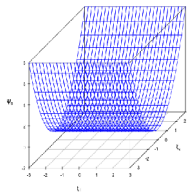
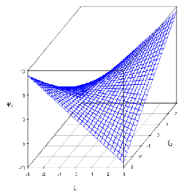
$$\psi_7(\xi_1, \xi_2) = H_1(\xi_2) H_2(\xi_1) = \xi_2 \xi_1^2 - \xi_1$$

$$\psi_8(\xi_1, \xi_2) = H_2(\xi_2) H_1(\xi_1) = \xi_1 \xi_2^2 - \xi_2$$

$$\psi_9(\xi_1, \xi_2) = H_3(\xi_2) H_0(\xi_1) = \xi_2^3 - 3\xi_2$$



Bases de polynôme multidimensionnée



Mise en oeuvre du Chaos Polynômial

- Sur le modèle $Y = f(X)$ la mise en oeuvre nécessite
 - d variables stochastiques ξ modélisant les incertitudes sur X
 - p degré fini sur le chaos polynomial
- le développement tronqué de la réponse du modèle :

$$Y(\xi) = \widehat{Y}(\xi) = \sum_{k=0}^P \alpha_k \Psi_k(\xi)$$

définies a priori pour une dimension d'incertitude d et un degré polynômial de troncature choisi p

$$P + 1 = \frac{(p + d)!}{p! d!}$$

- $P + 1$ est le nombre de termes de la décomposition
- Ψ_k la famille génératrice des polynômes constitue une base orthogonale pour la densité de probabilité ξ

$$\langle \Psi_i \Psi_k \rangle = \int \Psi_i(\xi) \Psi_k(\xi) pdf_{\xi}(\xi) d\xi = \langle \Psi_i^2 \rangle \delta_{ik}.$$

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

Sommaire.

- 1 Les Méthodes Spectrales Stochastiques
- 2 Méthode spectrale non intrusive**
 - Intégration numérique
- 3 Méthode spectrale intrusive

Méthode Spectrale non intrusive

- Pas de modification du modèle numérique.
- Le code est considéré comme une **boîte noire**.

$$y(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \Psi_k(\xi),$$

- ξ vecteur des variables aléatoires
- Ψ_k fonctionnelles des VAs, choisies de manière adéquate,
- y_k coefficients déterministes du développement spectral de la solution

Méthodes de calcul du développement polynomial

- Intégration numérique

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

$$\alpha_k = \langle Y \psi_k \rangle = E[Y \psi_k]$$

$$\alpha_k = \frac{\langle Y \psi_k \rangle}{\langle \psi_k^2 \rangle}$$

En notant $p_k(\xi_k)$ les densités de probabilité des variables ξ_k indépendantes

$$\alpha_k = \int Y(\xi) \psi_k(\xi) \prod p_k(\xi_k) d\xi_k$$

utilisation de méthodes d'intégration numérique pour approcher les coefficients α_k :

- Méthode Monte Carlo
- Méthodes de quadrature.
- Construction de Smolyak

Méthode Monte Carlo

- Spécification d'un n-échantillon $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ selon la loi $\prod p_k(\xi_k)$

$$\hat{\alpha}_k^n = \frac{1}{n} y(\xi) = \sum_{k=0}^n \alpha_k \Psi_k(\xi),$$

$$\text{Var}(\hat{\alpha}_k^n) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{k=0}^n (\Psi_k(\xi) - \hat{\alpha}_k^n)^2$$

- A. Antoniadis (Ecole d'été 2005) : formulation séquentielle

$$\hat{\alpha}_k^n = \frac{1}{n} [(n-1)\hat{\alpha}_k^{n-1} + \alpha_n \Psi_n(\xi)]$$

$$\text{Var}(\hat{\alpha}_k^n) = \frac{n-2}{n} \text{Var}(\hat{\alpha}_k^{n-1}) + \frac{1}{n^2} (\alpha_n \Psi_n(\xi) - \hat{\alpha}_k^{n-1})^2$$

- Les quantités $\sigma_k^2 = y_k^2$ interviennent dans la décomposition fonctionnelle de la variance (indices de Sobol).

Application : fonction Ishigami

Fonction non linéaire et non monotone utilisée afin d'observer la convergence de la décomposition sur la base des polynômes de Chaos. Cette fonction est intéressante car son étude par les méthodes habituelles fournit de très mauvais résultats.

La fonction d'Ishigami a pour expression :

$$f(u_1, u_2, u_3) = \sin(u_1) + a \sin^2(u_2) + b u_3^4 \sin(u_1) \quad (1)$$

où u_1 , u_2 et u_3 sont des variables aléatoires indépendantes de **densité uniforme** sur $[-\pi, \pi]$.
Le développement sur cette base de la fonction f est de la forme :

$$f(u_1, u_2, u_3) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \phi_k(u_1, u_2, u_3)$$

Méthode de Monte-Carlo

$$\alpha_k = \lim_{M \rightarrow +\infty} \left(\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \alpha(u_1^{(m)}, u_2^{(m)}, u_3^{(m)}) \Psi_k(u_1^{(m)}, u_2^{(m)}, u_3^{(m)}) \right)$$

Calcul des coefficients par Quadrature

Principes généraux des formules de quadrature 1D

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

où ω est la fonction poids (densité de probabilité) et les ξ_i , ω_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 ω
 - 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 darrondis.

Sommaire.

- 1 Les Méthodes Spectrales Stochastiques
- 2 Méthode spectrale non intrusive
 - Intégration numérique
- 3 Méthode spectrale intrusive**

Projection de Galerkin

Il est délicat de projeter des fonctions fortement non polynômiales ; les erreurs de quadratures peuvent affecter les coefficients spectraux. L'approche de Galerkin ne présente pas ce type de difficultés

On suppose que le résidu est décomposable sur la base des polynômes de chaos :

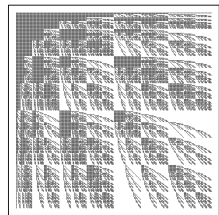
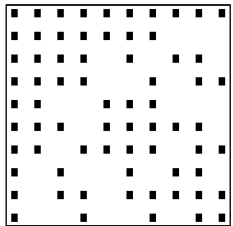
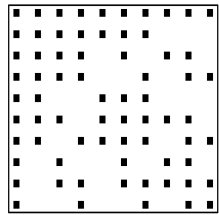
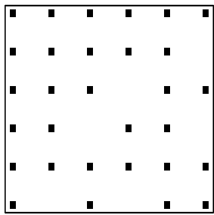
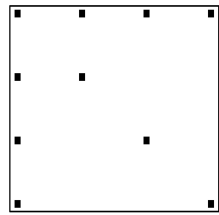
$$R(r, \omega) = \sum_{k=0}^P R_k(r) \Psi_k(\xi). \quad (2)$$

La projection de Galerkin consiste à rendre nulles toutes les composantes du résidu jusqu'à l'ordre P.

$$\forall l \in [0 : P], \left\langle \sum_{k=0}^{\infty} R_k(r) \Psi_k(\xi) \Psi_l(\xi) \right\rangle = 0 \quad (3)$$

On forme ainsi le système spectral associé au problème. En le résolvant, on obtient la décomposition du résultat du modèle

projection de galerkin - produits spectraux



References



P. E. Hodgson, *The Optical Model of Elastic Scattering*, Oxford University Press, 1963, London.



S. Wiener, *The Homogeneous Chaos*, American Journal of Mathematics, (1938).



R. Ghanem and P. Spanos. *Stochastic finite elements : a spectral approach*. Springer, Berlin, 1991.



O. Le Maître, O. Knio, H. Najm and R. Ghanem, *Multi-resolution analysis of Uncertainty propagation schemes using Wiener-type expansions*, Journal of Computational Physics, (2003).



R.H. Cameron, W.T. Martin, *The orthogonal development of nonlinear functionals in series of Fourier-Hermite functionals*, Ann.Math., 48 : 385-392 (1947).



B. Debusschere, H. Najm, P. Pebray, O. Knio, R. Ghanem and O. Le Maître, *Numerical challenges in the use of polynomial chaos representations for stochastic processes*, Journal of Scientific Computing, 26(2), 698-714, 2004.



D. Lucor, *Propagation d'incertitudes dans les simulations numériques d'écoulements turbulents*, Techniques de l'Ingénieur, Juillet 2005



J.M. Martinez, J. Cahen, A. Millard, D. Lucor, F. Huvelin, J. Ko et N. Poussineau, *Modélisation des incertitudes par polynômes de chaos, Etude d'un écoulement en milieu poreux DM2S/DIR/RT/06-006/A*.



B. Sudret, *Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansion*, 2007.