

Proposition d'une nouvelle métrique de validation des modèles mécaniques dans un cadre probabiliste

Thomas LANGLADE¹, Thomas HEITZ¹, David BOUHJITI¹, Benjamin RICHARD¹

¹ IRSN/PSN-EXP/SES/LMAPS, B.P. 17 - 92262 Fontenay-aux-Roses Cedex, France david.bouhjiti@irsn.fr

RESUME Dans le domaine nucléaire, la validation de résultats prévisionnels du comportement des structures obtenus par simulations numériques est une tâche cruciale qui repose (encore) bien souvent sur les connaissances, appréciations et dires des experts. Aucun des guides ou corpus réglementaires publiés au cours des dernières décennies ne propose une méthode claire, simple et opérationnelle permettant de quantifier objectivement la validité (écart satisfaisant entre les résultats du modèle et l'observable mesuré) des modèles utilisés ou des résultats obtenus. Pour répondre à ce besoin, le présent papier propose une démarche générale et surtout une nouvelle métrique destinée à la quantification de la validité d'un modèle dans son domaine de définition initiale (échelle de l'éprouvette ou de la maquette par exemple) et au-delà par extrapolation (échelle de la structure faisant l'objet de calcul prévisionnel). La métrique est inspirée des travaux de Roy et Oberkampf (2011) avec les améliorations suivantes : formulation probabiliste de la métrique et décomposition de la métrique en deux variables ; une associée au risque de surestimer la réponse réelle et une autre associée au risque de la sous-estimer. Ce travail s'inscrit dans une perspective de développement d'outils d'ingénieur facilitant la déclinaison opérationnelle dans un cadre industriel (Langlade T. et al., 2022) du guide ASN N°28 (ASN, 2017).

Mots-clefs Métrique, validation des modèles, couplage mécano probabiliste

I. INTRODUCTION

La Validation est une notion faisant référence à l'ensemble des méthodes et outils permettant de quantifier la justesse d'un modèle donné et sa représentativité dans un domaine expérimental investigué et au-delà. Dans ce sens, la Validation d'un modèle est souvent menée en trois étapes :

- Etape A : Au sein du domaine expérimental investigué, cette première étape vise à évaluer la capacité du modèle à reproduire la physique des phénomènes et à prévoir les différents observables d'intérêt (c'est souvent le cas à l'échelle d'éprouvettes ou de maquettes expérimentales). Notons que la mesure disponible est souvent partielle (voir « Validation Domain » dans la Figure 1) ; elle concerne un domaine spatiotemporel discret (points de mesures particuliers, acquisition de données selon une fréquence donnée, etc.).
- Etape B : En considérant le modèle représentatif et valide à l'étape A, le même modèle peut être appliqué par interpolation/extrapolation à des cas d'études différents du domaine expérimental initial (voir « Application Domaine dans la Figure 1 »). Les différences entre le domaine de validité initial et celui d'application

peuvent concerner l'échelle de modélisation (éprouvette, maquette, structure), la nature des chargements et leurs amplitudes, les conditions aux limites, etc. Notons que dans un cadre industriel, particulièrement dans l'objectif de quantification des marges de tenue aux chargements accidentels, la mesure expérimentale sous chargements extrêmes est rarement disponible.

- Etape C : Après l'application du modèle au-delà de son domaine de validation initial, il est question désormais de l'évaluation de la représentativité des résultats obtenus et des incertitudes associées à ces prévisions compte tenu des écarts entre les résultats du modèle et les mesures à l'étape A.

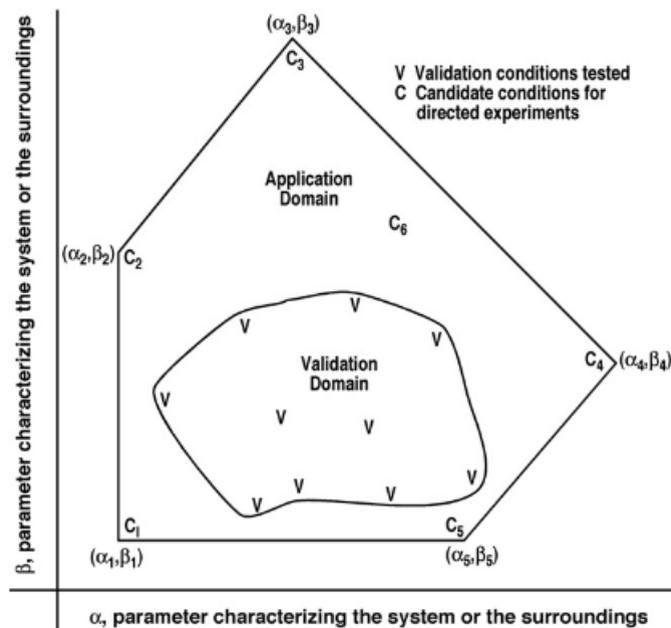


FIGURE 1. Illustration du domaine de validation initial et du domaine d'application – cas 2D issu des travaux de Roy et Oberkamp (2011)

Par la suite, il est question de proposer des outils mathématiques de mesure de la validité d'un modèle donné suivant les étapes A à C. Le fait de disposer de ces outils ne signifie pas que l'on soit capable *in fine* de conclure de façon binaire si le modèle étudié est valide ou non ; il est davantage question de quantifier les écarts (et incertitudes associées) auxquels il faudrait s'attendre quand le domaine d'application du modèle s'éloigne de son domaine de validation. Nous supposons également que l'utilisateur de ces outils dispose de suffisamment d'éléments lui permettant de quantifier les incertitudes des paramètres d'entrée.

II. Une proposition de métrique probabiliste à deux variables (Etape A)

Tout problème physique est entaché d'incertitudes. La propagation des incertitudes (quelle que soit la méthode utilisée) permet d'identifier les effets de telles variations en entrée sur les observables d'intérêt. Si notre connaissance des incertitudes des entrées et du modèle était

parfaite, alors par simulation, la distribution probabiliste de la réponse d'intérêt serait totalement identique à celle mesurée. En d'autres termes, la fonction expérimentale de la fonction de répartition et celle numérique se chevaucheraient et l'écart entre les deux serait nul. Dans la plupart sinon la totalité des cas industriels, ces deux distributions diffèrent car notre modèle est imparfait et les incertitudes épistémiques et aléatoires peuvent difficilement être réduites à zéro.

Dans Roy et Oberkampf (2011), la métrique associée à l'écart entre les deux distributions expérimentale et numérique correspond à la différence des aires sous les fonctions de répartition (x étant la réalisation de l'observable) :

$$d = \int_{-\infty}^{+\infty} |CDF_{NUM}(x) - CDF_{EXP}(x)| dx$$

Cette métrique présente les caractéristiques suivantes :

- Elle est scalaire
- Elle est de même unité que l'observable
- Elle est empirique par définition (car dépendante des données expérimentales)
- Elle est déterministe car elle ne dispose d'aucune distribution probabiliste associée
- Elle est globale car elle couvre tout le domaine probabiliste sans information particulière à des fractiles données.

Pour améliorer ce dernier point, nous proposons de redéfinir la métrique originelle dans Roy et Oberkampf (2011) de telle sorte à distinguer deux métriques : une associée à la surestimation d_+ et une autre à la sous-estimation d_- du modèle de la réponse expérimentale. A noter que la somme des deux en valeur absolue correspond à la métrique originelle dans Roy et Oberkampf (2011). Cela permet d'écrire :

$$d = d_+ + |d_-| \quad \text{avec} \quad d_- = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle CDF_{NUM}(x) - CDF_{EXP}(x) \rangle_- dx$$

$$d_+ = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle CDF_{NUM}(x) - CDF_{EXP}(x) \rangle_+ dx$$

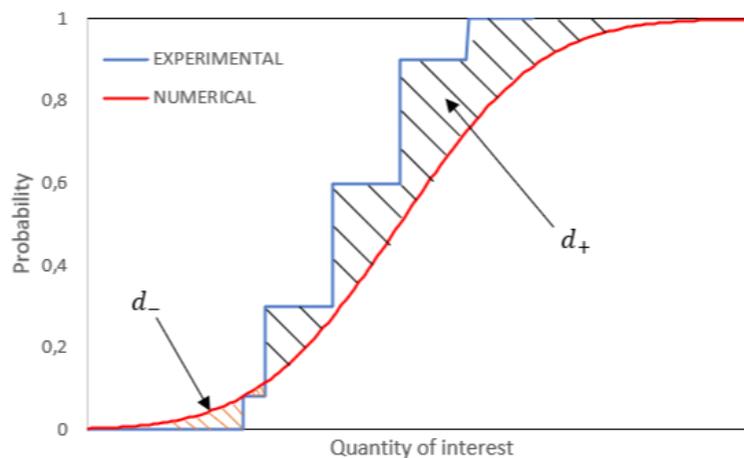


FIGURE 2. Illustration des nouvelles métriques d_- et d_+ quantifiant l'écart entre les prévisions d'un modèle donné et les observations expérimentales de référence

La Figure 2 illustre la distinction entre les variables \underline{d} et \overline{d} , i.e. respectivement les tendances du modèle à sous-estimer et surestimer les valeurs attendues, là où la métrique d est défini comme leur différence globale et absolue. Grâce à cette nouvelle formulation, nous pouvons désormais identifier les valeurs (\underline{d} et \overline{d}) à des fractiles donnés et quantifier la tendance du modèle à surestimer ou sous-estimer les observables d'intérêt; cela introduit une certaine dissymétrie dans les écarts de prévision attendus du modèle et permet donc de mieux apprécier la validité du modèle compte tenu des incertitudes associées aux entrées.

III. Interpolation/Extrapolation de la métrique (Etape B)

Supposons désormais que les résultats expérimentaux sont disponibles pour plusieurs configurations décrites par une variable Y . Cela signifie que pour chacune de ces configurations, et via l'étape A, nous pouvons accéder aux métriques associées en fonction des réalisations : $\overline{d}(\mathbf{y})$ et $\underline{d}(\mathbf{y})$. Par régression (linéaire ou non linéaire), il devient possible d'interpoler et d'extrapoler les métriques précédentes à des configurations Y' non explorées expérimentalement. Si la régression est bien faite, les résidus devraient suivre une distribution normale centrée avec un certain écart type. Ainsi, le domaine de prévision associé à la régression des métriques peut être estimé via les fonctions suivantes (après modification des formules dans Devore (2015) afin de tenir compte des dissymétries entre la borne supérieure et la borne inférieure des métriques) :

$$d(\alpha, Y) = \begin{cases} \overline{d}(\mathbf{y}) - t_{\frac{\alpha}{2}, N-p} \cdot s_+ \cdot \sqrt{1 + \frac{1}{N} + \frac{N \cdot (Y - \bar{y})^2}{N \cdot (\sum_{i=1}^N y_i^2) - (\sum_{i=1}^N y_i)^2}} \\ \underline{d}(\mathbf{y}) + t_{\frac{\alpha}{2}, N-p} \cdot s_- \cdot \sqrt{1 + \frac{1}{N} + \frac{N \cdot (Y - \bar{y})^2}{N \cdot (\sum_{i=1}^N y_i^2) - (\sum_{i=1}^N y_i)^2}} \end{cases}$$

Avec \hat{d} l'estimateur de d par régression, $t_{\frac{\alpha}{2}, N-p}$ le facteur de Student de paramètres ($\frac{\alpha}{2}$, N et p), α le niveau de confiance visé, N le nombre de configurations pour lesquels des mesures expérimentales sont disponibles (y_1, y_2, y_3, \dots), p le nombre de paramètres associés à la régression (2 dans le cas d'une régression linéaire), s l'écart-type associé aux résidus, Y la configuration pour laquelle une estimation de la métrique est souhaitée, \bar{y} la moyenne des réalisations (y_1, y_2, y_3, \dots) disponibles.

La Figure 3 illustre une régression linéaire des estimateurs des métriques \hat{d} sur le domaine de validation ainsi que l'intervalle de prédiction à un niveau de confiance donné extrapolé sur le domaine d'application.

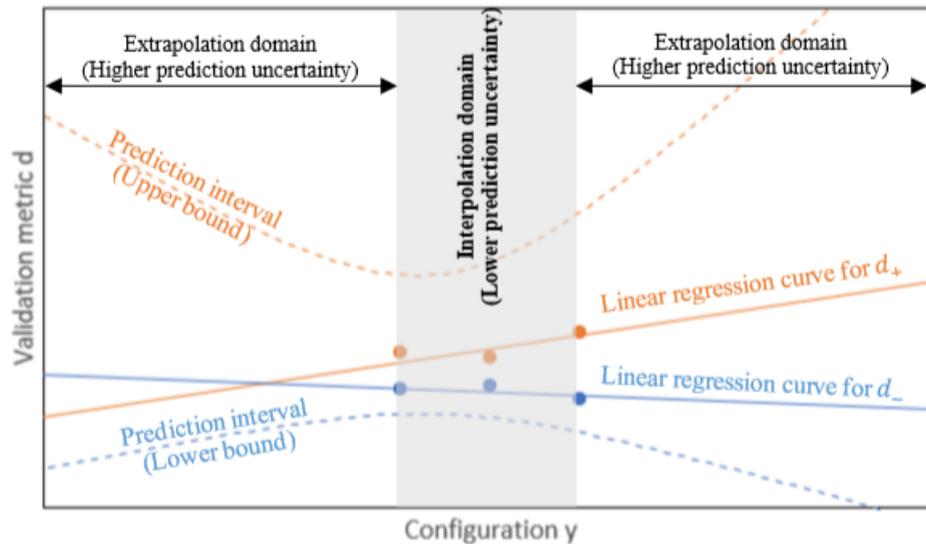


FIGURE 3. Exemple d'une régression linéaire des métriques en fonction des configurations y et des domaines de prévision à un niveau de confiance donné

IV. Représentativité du modèle au-delà du domaine de validité initiale (Etape C)

Finalement, nous disposons d'une métrique à deux variables définis dans un cadre probabiliste et tenant compte des incertitudes des entrées du modèle objet de la mesure de validité. Ces deux métriques peuvent donc servir à estimer le domaine de prévision du modèle pour toute configuration ; qu'elle soit au sein ou en dehors du domaine de validité initial.

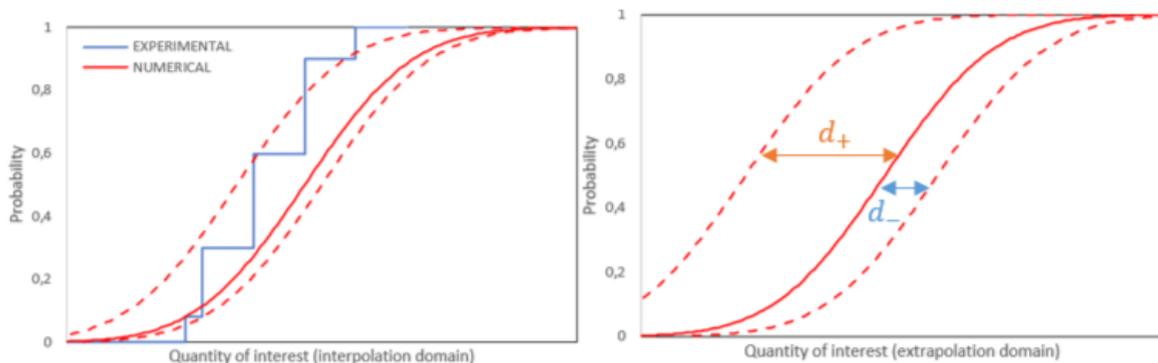


FIGURE 4. Exemple d'un intervalle de prévision d'un modèle donné (à gauche) dans le domaine des configurations exploré expérimentalement (à droite) dans une configuration en dehors du domaine de validité initial

Nous notons que l'intervalle de prévision est d'autant plus large que le domaine d'application s'éloigne du domaine de validité initial. La réduction de ces incertitudes peut se faire par enrichissement du domaine de validité, par investigation expérimentale dans des conditions se rapprochant le plus possible des configurations d'intérêt, ou encore par amélioration physique du modèle lui-même. Cet investissement est à mener en fonction des ressources à disposition ainsi

que de la criticité des résultats vis-à-vis d'un critère donné (niveau de conservatisme des marges de tenue structurale ou fonctionnelle par exemple).

V. Conclusion

Ce papier vise à fournir une méthodologie de quantification de la précision d'un modèle donné dans son domaine de validation expérimentale et au-delà. Pour ce faire, une nouvelle métrique de validation à deux variables est proposée. Elle permet de tenir compte des incertitudes aléatoires et épistémiques du problème physique traité et fournit un intervalle de prédiction à toute configuration simulée (couverte par des mesures/observations expérimentales ou non). L'information probabiliste qui lui est associée permet une meilleure compréhension du comportement du modèle.

La méthodologie fournie et les équations associées peuvent être appliquées à tout problème physique et à tout modèle (numérique, analytique ou autre) pour quantifier les intervalles de prévision des sorties d'intérêt à un niveau de confiance donné.

A la suite de la définition du cadre théorique de la métrique, les auteurs déclinent actuellement la démarche pour diverses applications industrielles : cas d'entrechoquement entre deux planchers (suite des travaux de Langlade et al. (2022)), cas de comportement structural sous sollicitations sismiques (maquettes IDEFIX (Heitz, 2017) et SMART (Richard et al., 2018)), entre autres.

REFERENCES

Roy, C. J., & Oberkampf, W. L. (2011). A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(25-28), 2131-2144. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.03.016>

Devore, J. L. (2015). *Probability and Statistics for Engineering and the Sciences*. Cengage Learning.

Langlade T. et al. 2022. Validation and verification of nonlinear mechanical models for nuclear buildings and equipment: an application. SMiRT-26. Special session: Challenges and recent advances from European Research Projects.

Heitz T. 2017. Comportements non-linéaires locaux et modélisation numérique de l'amortissement dans les structures de génie civil en dynamique. Thèse de doctorat ENS Cachan.

Richard B., Voltaire F., Fontan M., Mazars J., Chaudat T., Abouri S. and Bonfils N. 2018. SMART 2013: Lessons learned from the international benchmark about the seismic margin assessment of nuclear RC buildings, *Engineering Structures*, 161, 207-222.

ASN. 2017. Qualification des outils de calcul scientifique utilisés dans la démonstration de sûreté nucléaire – 1ère barrière. ASN.