





Quantification d'incertitudes pour les modèles d'endommagement composites

GST mécanique et incertain

Jeudi 19/10/2023

Clément LABOULFIE, Florent GROTTTO, Ludovic BARRIERE, Stéphanie MIOT , Matthias DE LOZZO

IRT Saint-Exupéry, Toulouse

Introduction: Projet TRUST

Towards Reliable simUlation of compoSiTes



Objectives :

- Demonstrate V&VUQ approach for composite damage models
- Improve physical tests to acquire data for virtual testing (calibration, UQ&M)
- Optimise positioning of AFP manufacturing defects
- Prepare up-scaling and introduction of virtual allowable in large scale structures



2,6M€



3.5 years

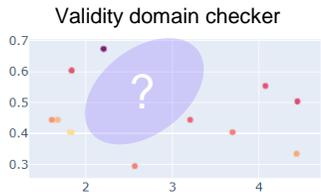
2022-2025



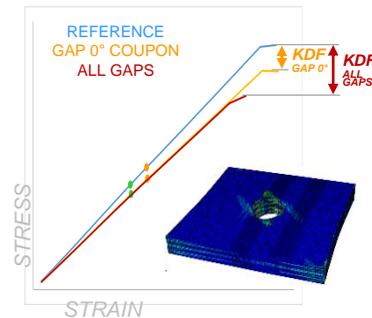
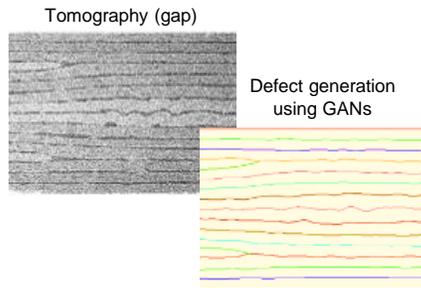
AIRBUS (SAS & Atlantic), ArianeGroup, Hexcel, Eikosim, Univ. PORTO, Univ. GIRONA, ICA, Onera

Main activities

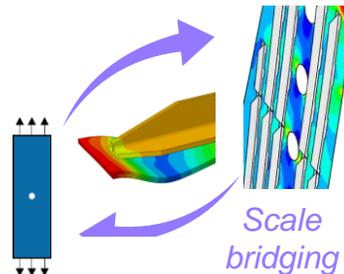
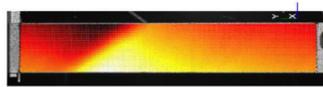
Efficient VVUQ and design value computation



As manufactured model



Smart testing and robust calibration



Demonstration and transfer

VIMS software



VIRTUAL TESTING INTEGRATION FOR DECISION MAKING SUPPORT

Model integration

Data assimilation

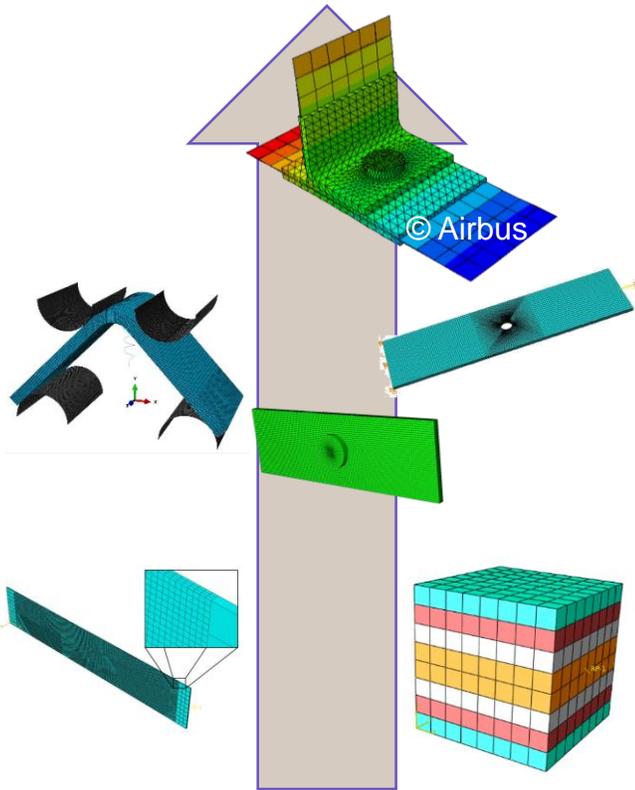
Validation

Computation design value

Decision making support

Software management

Introduction



Quantités d'intérêt:

- ❑ Actuellement, les essais expérimentaux sur coupons sont utilisés notamment pour déterminer des valeurs d'admissibles pour la conception des structures aéronautiques
- ❑ Pour les composites, la valeur-b est l'admissible à considérer pour les contraintes à rupture (estimateur du quantile à 10% avec 95% de confiance)

Modélisation:

- ❑ Dans une démarche de V&VUQ, les essais aux différentes échelles servent d'une part à calibrer les paramètres des modèles et d'autre part à valider les prédictions dans le domaine d'application visé, en quantifiant à chaque étape les incertitudes.
- ❑ Des modèles paramétriques avec des lois d'endommagement fortement non-linéaires sont implémentés pour chaque cas de charge (ex. Onera Progressive Failure Model, Porto/Girona Composite Damage Model). On compte environ 20 à 50 paramètres.
- ❑ Le coût unitaire d'une simulation sur un coupon est de l'ordre de 10min à plusieurs heures

Enjeux: propager les incertitudes dans les modèles pour prédire les admissibles

Sommaire.



Page 1 Introduction

Page 5 Apprentissage actif pour l'estimation de quantile

Page 9 Parallélisation de l'active learning

Page 14 Vérification de la méthode sur des fonctions benchmark

Page 20 Estimation de la fonction de la force à rupture sur une cornière

Page 24 Conclusion

Procédure d'estimation de quantile

Idée naturelle:

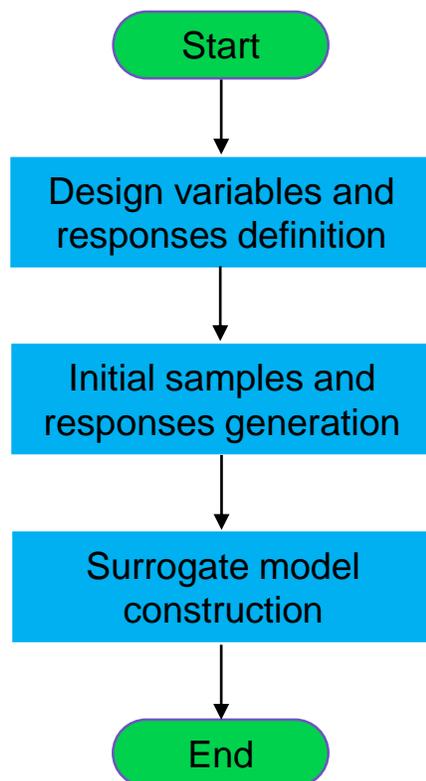
- Estimateur de Monte-Carlo [David et Nagajara, 2003; Metropolis & Ulam, 1949], requiert un très grand nombre d'échantillons impossible à mettre en œuvre avec des codes coûteux.
- Possibilité de générer des échantillons plus pertinents pour estimer le quantile \Rightarrow méthodes basées sur l'importance sampling [Cornuet *et al.*, 2012; Egloff *et al.*, 2010; Zhang, 1996].

Utilisation de méta-modèles:

- On construit une approximation du modèle coûteux qui permet d'estimer le quantile, éventuellement combiné avec de l'importance sampling [Canamella *et al.*, 2008; Morio, 2012]
- On entraîne le méta-modèle dans le but d'estimer un quantile:
 - Méthodes générales du type AK-MCS [Echard *et al.*, 2011] ou basé sur un fonction d'amélioration [Jones *et al.*, 1998; Ranjan *et al.*, 2008]
 - Méthodes types « Stepwise Uncertainty Reduction »: minimisation de la variance de l'estimateur de quantile [Jala *et al.*, 2012; Labopin-Richard, 2018]
 - Enrichissement basé sur des critères spécifiques aux quantiles [Oakley, 2004; Jala *et al.*, 2016]

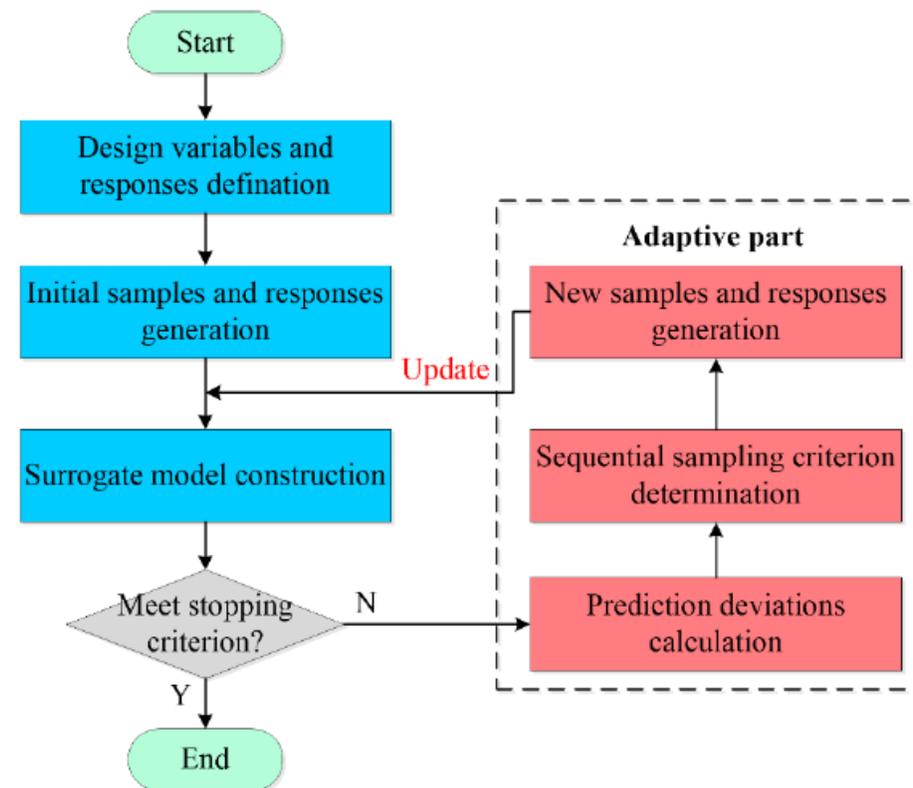
Apprentissages par enrichissement [Wang *et al.*, 2022]

Méthodes « one shot »



Adapaté de [Wang *et al.*, 2022]

Méthodes séquentielles



De [Wang *et al.*, 2022]

Notations et définitions

Soit $x \in \mathbb{R}^d$ le vecteur de design de dimension d . On note:

- $Y(\cdot)$ le simulateur coûteux (par exemple un solveur élément finis) de sortie scalaire
- X la variable aléatoire associée au vecteur x de la loi de probabilité f_X
- $Y = Y(X)$ la variable aléatoire associée à la sortie $Y(x)$ de la loi de probabilité f_Y
- Γ l'ensemble des vecteurs de design possibles
- **q le quantile que l'on cherche à estimer**

Le modèle coûteux $Y(\cdot)$ est approximé par un processus Gaussien caractérisé par:

- Un modèle de tendance
- Un modèle de covariance

Une fois le processus Gaussien appris, on dispose d'une caractérisation du processus Gaussien conditionné par les données initiales $A_n = \left(x^k, Y(x^k) \right)_{k \in \llbracket 1, n \rrbracket}$:

$$Y|A_n \sim \mathcal{N}(m_n(\cdot), k_n(\cdot, \mathbf{x})) \text{ et } s_n(\mathbf{x})^2 = k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x})$$

Sommaire.



Page 2 Introduction

Page 5 Apprentissage actif pour l'estimation de quantile

Page 9 Parallélisation de l'active learning

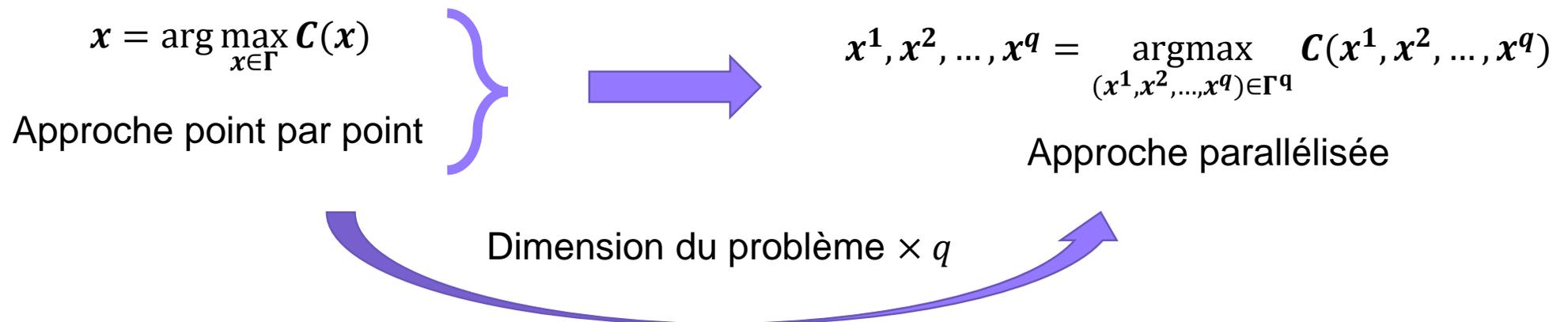
Page 14 Vérification de la méthode sur des fonctions benchmark

Page 20 Application pour le calcul d'une force à rupture

Page 24 Conclusion

Parallélisation de la démarche

- En général, l'ajout de points d'apprentissage se fait un par un. Pour réduire le nombre d'itérations, il est possible de **paralléliser** la procédure, comme proposé par Ginsbourger *et al.*, 2012
- En pratique, à chaque étape, on cherche à déterminer q points à la fois au lieu d'un seul
- **Les points sont déterminés en maximisant un critère d'enrichissement $\mathcal{C}(\cdot)$.** La parallélisation du problème de maximisation utilisé pour l'enrichissement est le suivant comme suit (*cf.* Ginsbourger *et al.*, 2012):



Adaptation du critère de contour à la parallélisation



	Approche "point par point"	Approche parallélisée
Fonction d'amélioration pour la recherche de minimum	$I_{mono}(x) = \max(Y(x) - \min(Y) , 0)$ <p>[Jones <i>et al.</i>, 1998]</p>	$I(x^1, x^2, \dots, x^q) = \max(I_{mono}(x^1), \dots, I_{mono}(x^q))$ <p>[Ginsbourger <i>et al.</i>, 2012]</p>
Fonction d'amélioration pour la recherche de quantile	$I_{mono}^q(x) = (2s(x))^2 - \min((Y(x) - q)^2, (2s(x))^2)$ <p>[Ranjan <i>et al.</i>, 2008]</p>	$I^q(x^1, x^2, \dots, x^q) = (\underbrace{I_{mono, S_1}^q(x^1)}, \dots, \underbrace{I_{mono, S_q}^q(x^q)})$ <p>Métamodèles différents [Viana <i>et al.</i>, 2012]</p>

$$I^q(x) = \max(I_{mono}^q(x^1), \dots, I_{mono}^q(x^q))$$

Proposition



Finalement, le critère final correspond à: $C(x^1, x^2, \dots, x^q) =$

$$\int_{\mathbb{R}^q} \max(I_{mono}^q(x^1), \dots, I_{mono}^q(x^q)) dY(x^1) \dots dY(x^q)$$

Problème d'active learning parallélisé

- Expression du critère infill à q points:

$$C(x^1, x^2, \dots, x^q) = \int_{\mathbb{R}^q} \max(I_{mono}^q(x^1), \dots, I_{mono}^q(x^q)) dY(x^1) \dots dY(x^q)$$

- Problème de maximisation à résoudre pour déterminer les points d'enrichissements (cf. Ginsbourger *et al.*, 2012):

$$x^1, x^2, \dots, x^q = \underset{(x^1, x^2, \dots, x^q) \in \Gamma^q}{\operatorname{argmax}} C(x^1, x^2, \dots, x^q)$$

Difficultés:

- Calcul du critère infill qui correspond à une intégrale en dimension q
- Résolution du problème d'optimisation en grande dimension: $d \times q$

Mise en œuvre de l'estimation de quantile

La suite de ce travail est structurée de la façon suivante:

Etape 2

Etape 3

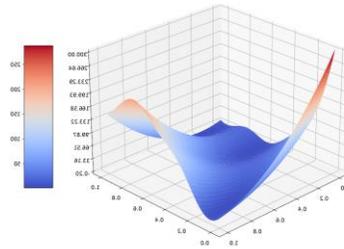
Etape 1

Présentation de la démarche de test

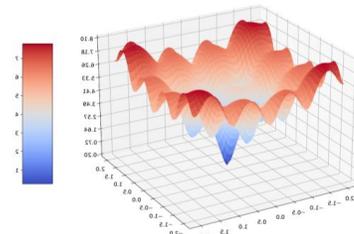


Vérification de la démarche avec des fonctions benchmark:

- Fonction de Branin (dimension 2)

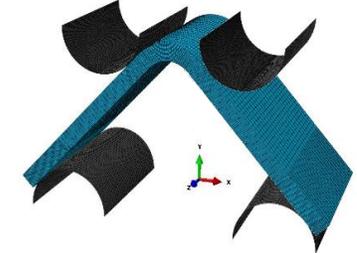


- Fonction d'Ackley (dimension 6):



Estimation de la force à rupture d'une cornière en flexion 3 points

- Présentation du cas test mécanique



- Estimation du quantile à 10% de la force à rupture

Sommaire.



Page 2 Introduction

Page 5 Apprentissage actif pour l'estimation de quantile

Page 9 Parallélisation de l'active learning

Page 14 Vérification de la méthode sur des fonctions benchmark

Page 20 Application pour le calcul d'une force à rupture

Page 24 Conclusion

Démarche de Test (1/2)

Que l'on utilise ou pas une approche parallélisée, la procédure d'estimation est soumise à de nombreuses **sources d'aléa**, en particulier:

- Échantillons pour calculer le critère d'enrichissement
- Échantillons du plan d'expérience d'initial

Il faut donc **évaluer la robustesse** de la méthode, ce qui est fait en répétant la procédure d'estimation (20 fois) quantifiée par un écart inter-quartile

Etapas des calculs:



Paramètres de réglages globaux:

- Le plan d'expérience initial est un LHS généré par le module OpenTURNS [Baudin *et al*, 2016].
- La maximisation du critère infill est réalisée par un simplexe mis en œuvre dans NLOpt [Johnson, 2005] implémentée dans OpenTURNS [Baudin *et al*, 2016]. et est associé à un multi-start (50 initialisations)
- Le modèle de krigeage retenu est composé d'une base linéaire et le noyau est un Matérn 3/2 à partir d'OpenTURNS [Baudin *et al*, 2016].

Démarche de Test (2/2)

Indicateurs de performances choisis:

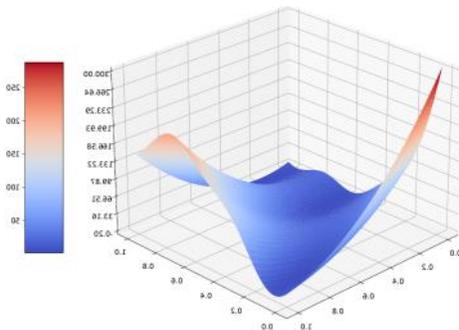
- Evaluation de la convergence de l'estimation de la valeur ainsi que d'une erreur d'estimation proposée dans [Labopin-Richard & Picheny, 2018]:

$$\varepsilon = \frac{\widehat{q}^\alpha - q_{ex}^{0.05}}{q_{ex}^{0.95} - q_{ex}^{0.05}}$$

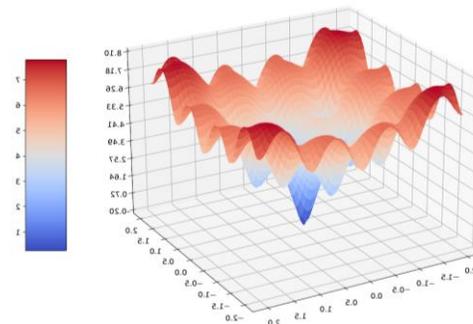
Avec $q_{ex}^{0.05}$ le quantile « exact » à 5%, $q_{ex}^{0.95}$ le quantile « exact » à 95%, calculé avec 5×10^6 échantillons de Monte-Carlo et \widehat{q}^α le quantile que l'on recherche.

Fonctions benchmark évalués:

Fonction de Branin (dimension 2)

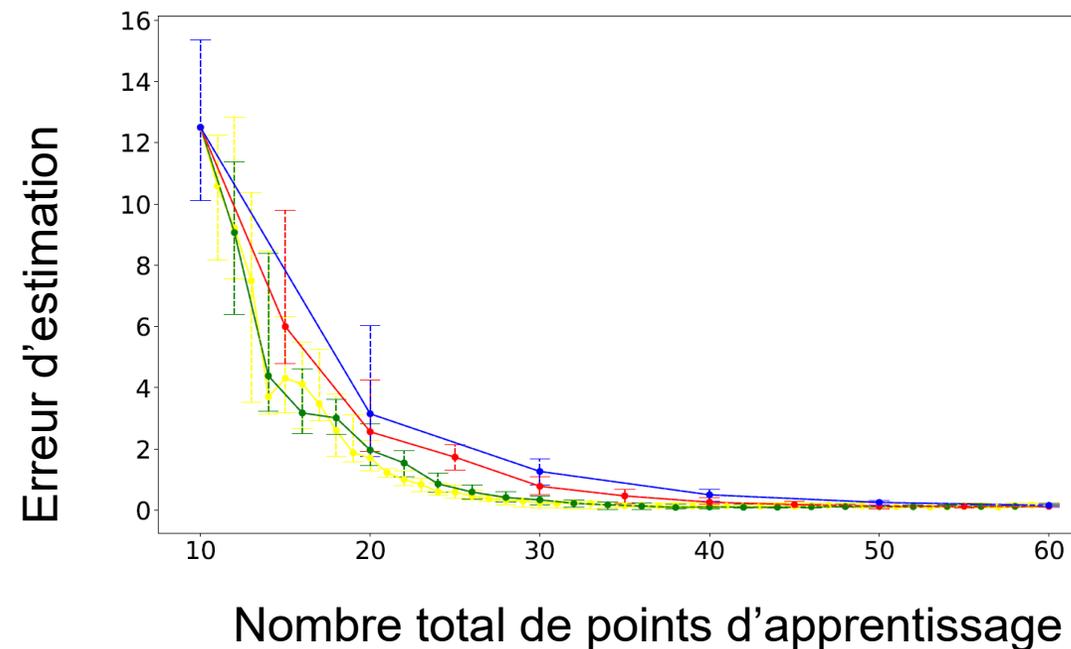
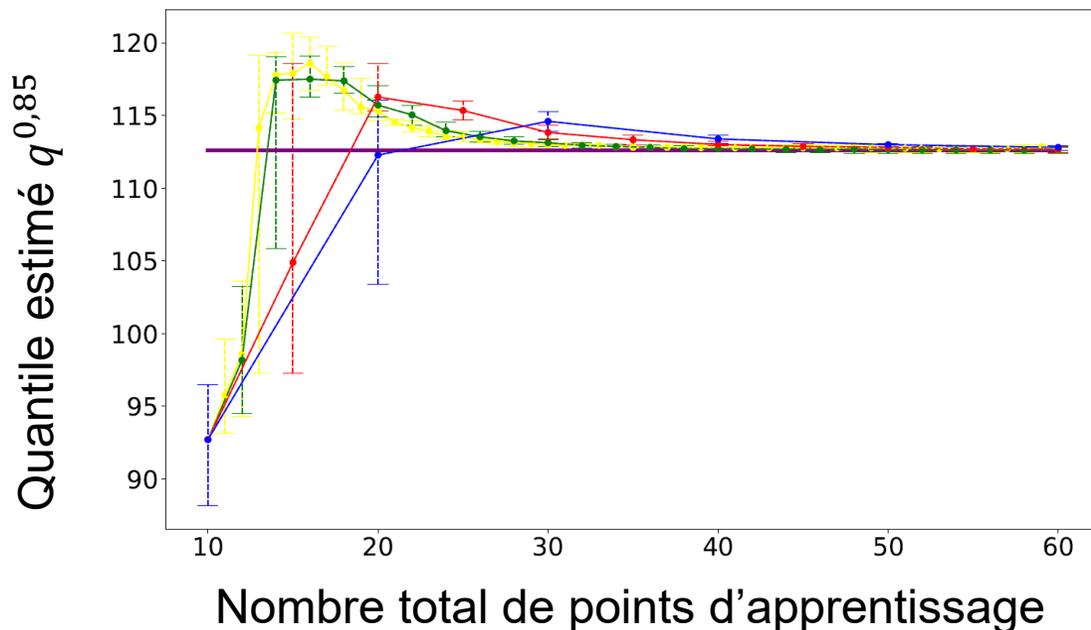


Fonction d'Ackley (dimension 6)



Estimation du quantile à 85% de la fonction de Branin

Fonction de Branin [Molga & Smutnicki, 2005] : $f(x_c, y_c) = \left(y_c - \frac{5.1}{4\pi^2} x_c^2 + \frac{5x_c}{\pi} - 6\right)^2 + \left(10 - \frac{10}{8\pi} \cos(x_c)\right) + 10$
 avec $x_c = 15x - 10$ et $y_c = 15y$ avec $(x, y) \sim \mathcal{U}([0,1]^2)$.

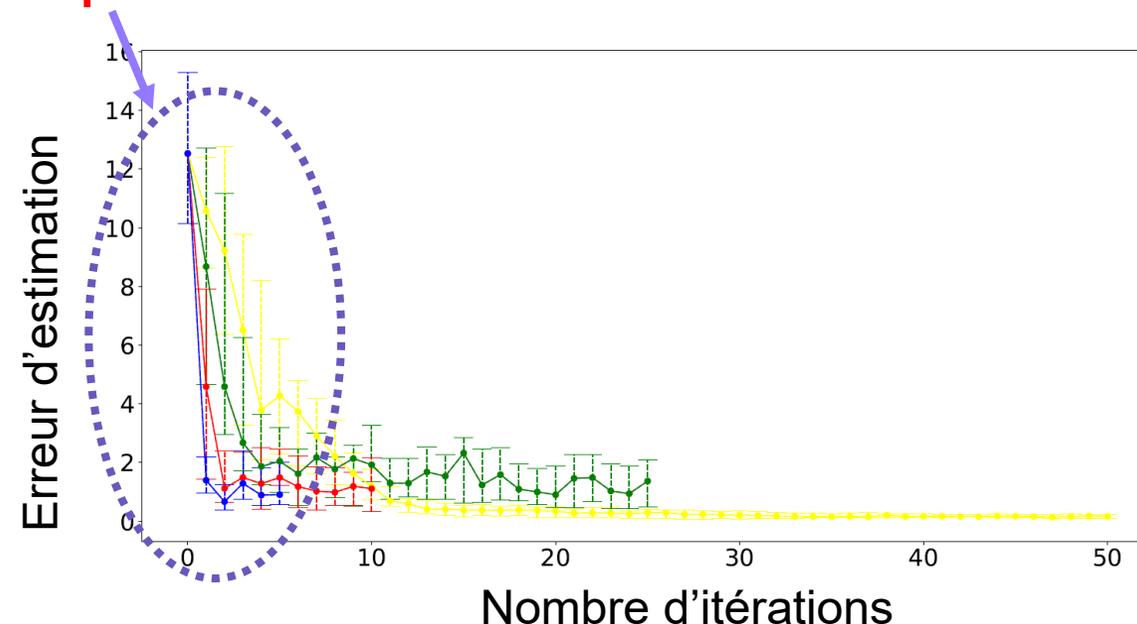
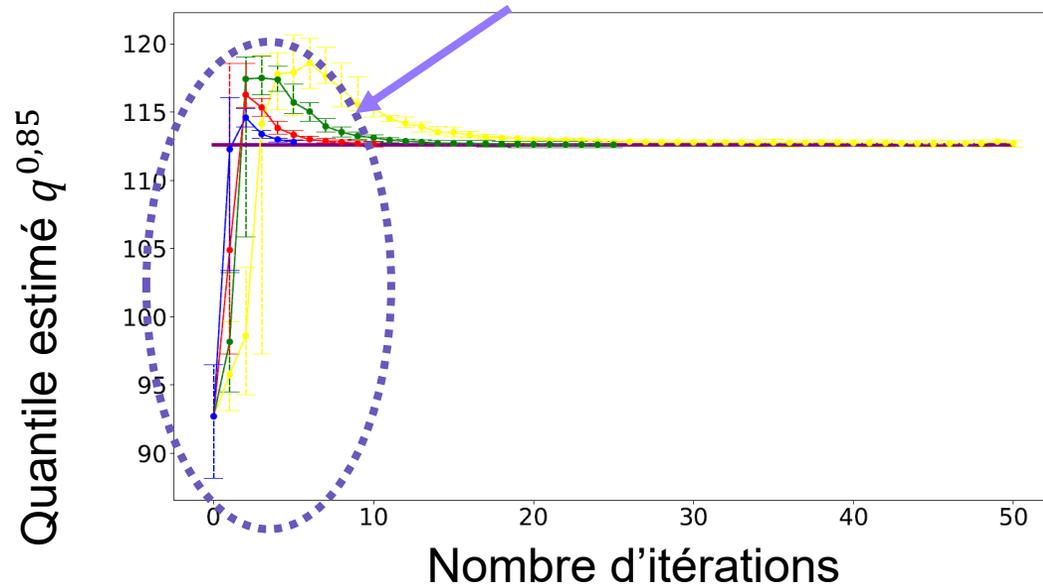


- Trajectoire sans parallélisation
- Parallélisation sur 2 points
- Parallélisation sur 5 points
- Parallélisation sur 10 points
- Valeur exacte

Convergence de l'estimation

On étudie maintenant cette convergence au regard nombre d'itérations.

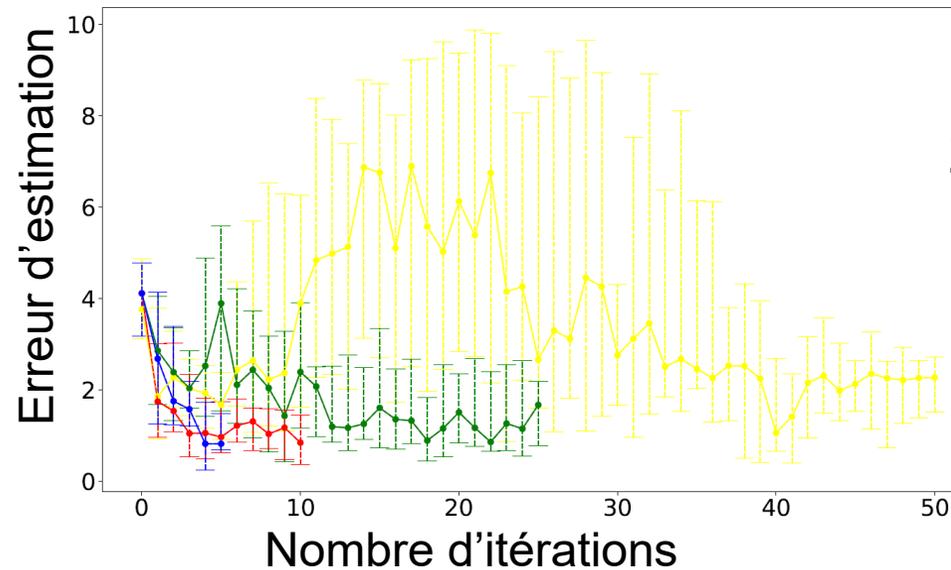
Au regard du nombre d'itérations, on comprend l'intérêt d'utiliser une approche parallélisée : **en une itération de 10 points, on a quasiment trouvé la valeur exacte**



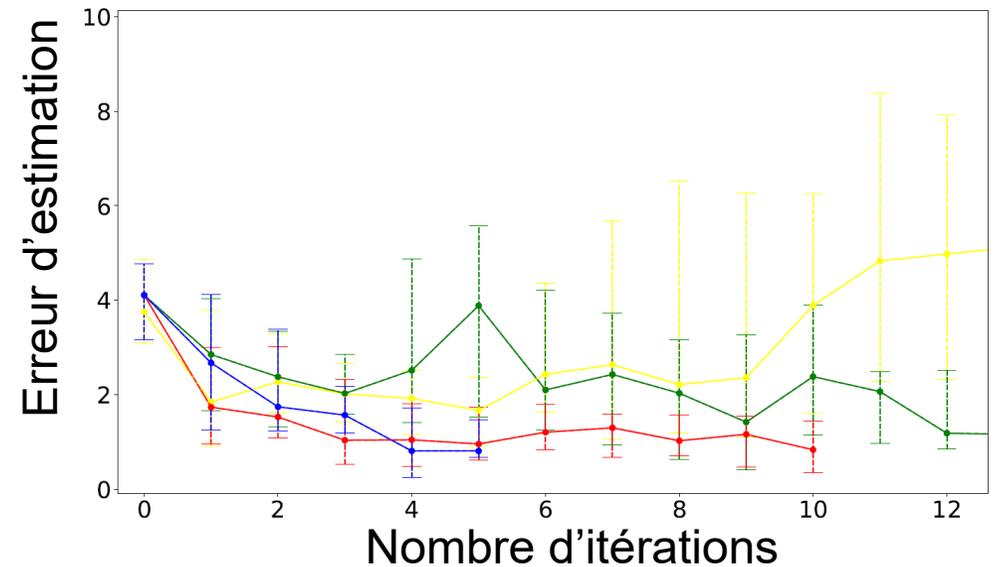
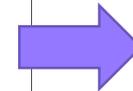
- Trajectoire sans parallélisation
- Parallélisation sur 2 points
- Parallélisation sur 5 points
- Parallélisation sur 10 points
- Valeur exacte

Estimation du quantile à 15% de la fonction d'Ackley

Fonction d'Ackley [Molga & Smutnicki, 2005] : $f(x) = 20 + \exp\left(-0.2\sqrt{\frac{1}{6}\sum_{i=1}^6 x_i^2}\right) + 20\exp\left(-\frac{1}{6}\sum_{i=1}^6 \cos(2\pi x_i)\right) - e$
avec $x \sim \mathcal{U}([0,1]^6)$.



Zoom



-  Trajectoire sans parallélisation
-  Parallélisation sur 2 points
-  Parallélisation sur 5 points
-  Parallélisation sur 10 points

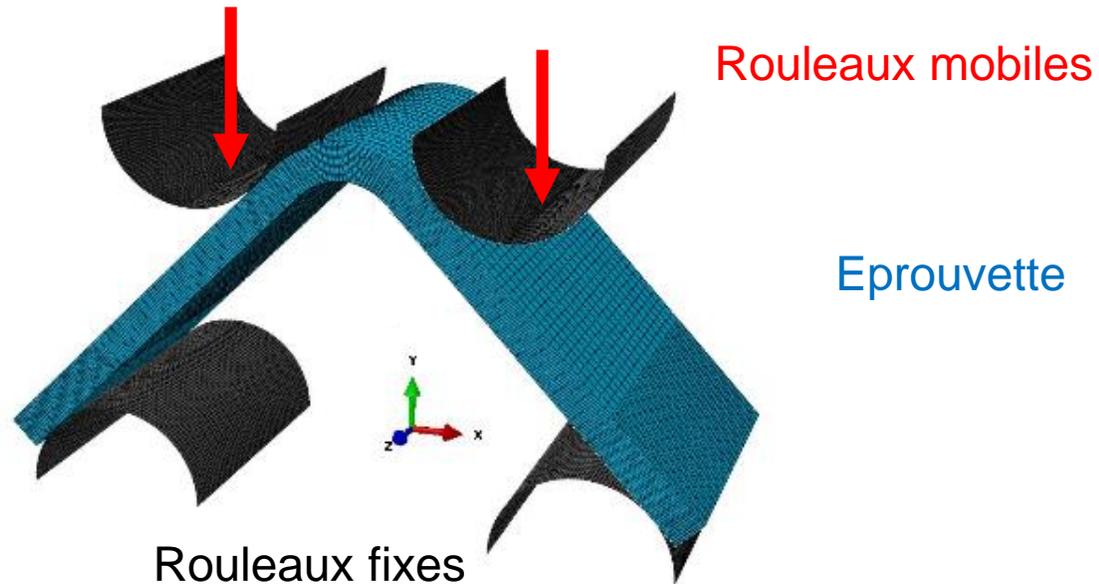
- Comme précédemment, on observe une convergence du quantile vers sa valeur exacte
- On observe toujours l'accroissement de la vitesse de convergence avec le nombre de points rajoutés
- Ici, la parallélisation sur 5 points semble donner un meilleur résultat qu'avec 10, ce qui peut venir de la trop grande dimension de l'espace de recherche

Sommaire.



Page 2	Introduction
Page 5	Apprentissage actif pour l'estimation de quantile
Page 9	Parallélisation de l'active learning
Page 14	Vérification de la méthode sur des fonctions benchmark
Page 20	Application pour le calcul d'une force à rupture
Page 24	Conclusion

Présentation du cas test : dépliement de cornière



Paramètres du cas test:

- Cornière en matériau composite stratifié unidirectionnel (carbone/epoxy)
- Empilement étudié: $[0^\circ; 0^\circ; 90^\circ]_s$

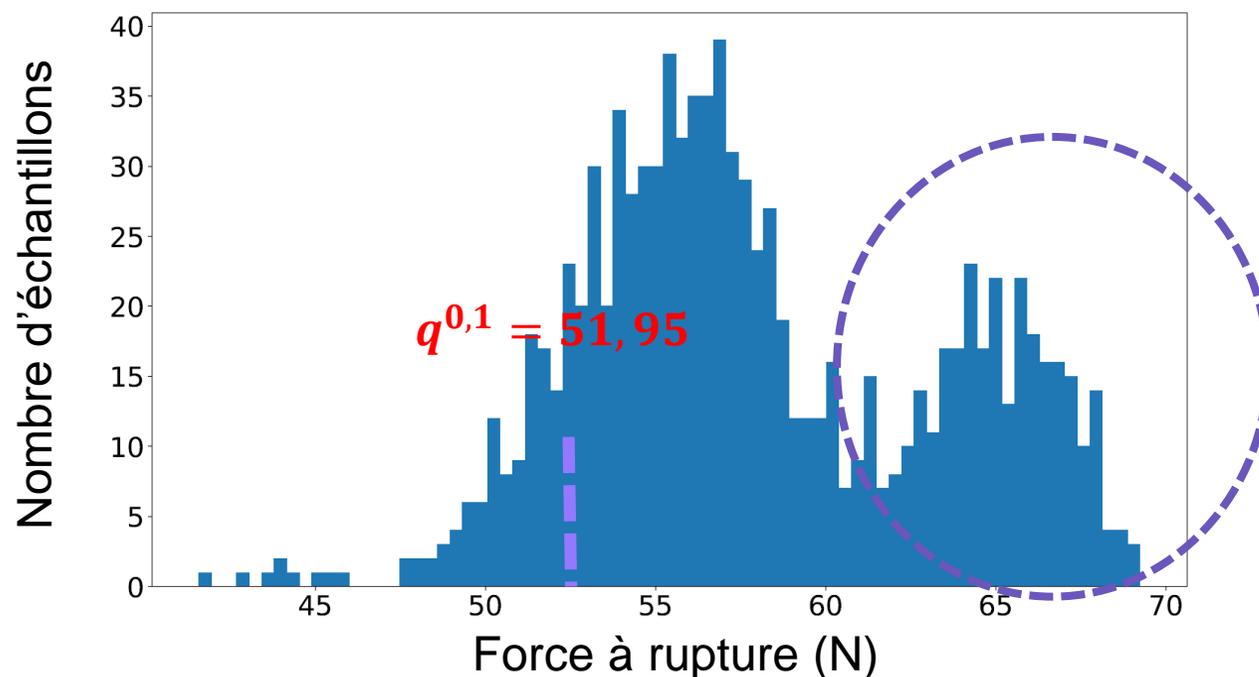
Paramètres de design

- Loi de comportement du pli de base (**élasticité**, viscosité, endommagement, **rupture**)
- Paramètre de l'empilement (nombre, arrangement, orientations et épaisseurs des plis)
- Paramètres de l'expérience (taille de l'éprouvette, sollicitation)

Première estimation du quantile

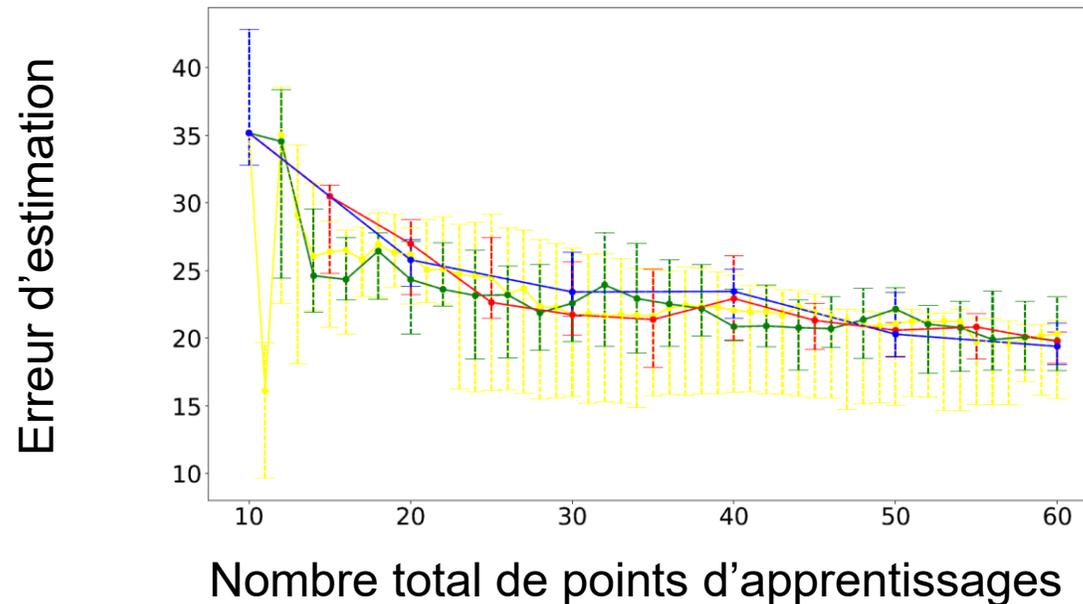
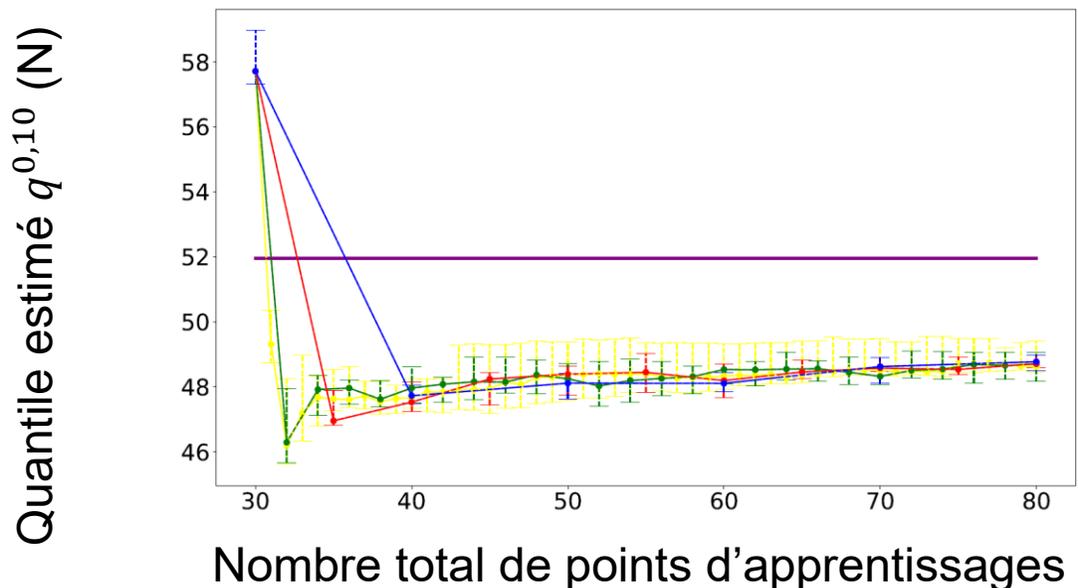
Pour réduire la taille de l'espace de recherche qui est dimension $d = 14$, on procède à une analyse de sensibilité de type Morris [Morris,1991] à partir de la librairie GEMSEO [Gallard,2018]. On retient :

- Variables de design finale: E_1, E_2, G_{12} et Z_t
- Distribution des variables normalisée $\mathcal{N}(0, I_4)$ tronquée à ± 3 pour chaque composante



- Estimation d'intervalle de confiance à 95% par bootstrap: [51,6 N; 52,5 N]
- Distribution bi-modale du quantile: 2 modes de ruptures dont 1 presque exclusivement lié à Z_t

Estimation du quantile à 10% de la force à rupture



—— Trajectoire sans parallélisation
—— Parallélisation sur 2 points

—— Parallélisation sur 5 points
—— Parallélisation sur 10 points
—— Valeur exacte

Premières observations:

- Toutes les méthodes semblent converger vers la une valeur qui semble proche du quantile exact
- Quelque soit la méthode, l'estimation semble atteindre un régime de saturation qui est inférieur à 4 N de la valeur exacte
- La ligne de niveau associée au quantile d'intérêt correspond à des valeurs de Z_t , se situant dans une des queues de sa distribution \Rightarrow la procédure apprend d'abord le méta-modèle avant de se concentrer sur l'apprentissage du quantile

Sommaire.



Page 2	Introduction
Page 5	Apprentissage actif pour l'estimation de quantile
Page 9	Parallélisation de l'active learning
Page 14	Vérification de la méthode sur des fonctions benchmark
Page 20	Application pour le calcul d'une force à rupture
Page 24	Conclusion

Conclusion



Résumé de la présentation

- Adaptation d'un critère infill parallélisé pour l'estimation de quantile
- Démonstration de la convergence des estimations sur des fonctions benchmark
- Illustration de l'intérêt de l'utilisation d'une démarche parallélisée
- Application en cours à un cas test de dépliement de cornière

Perspectives de travail:

- Terminer la procédure appliquée au cas test unfolding simplifié
- Augmenter la complexité du cas test en utilisant des empilements plus réalistes (gestion des erreurs de calculs EF)
- Améliorer le calcul du critère infill en prenant en compte l'incertitude sur l'estimation du quantile

Merci de votre attention

Bibliographie (1/3)



- [Baudin *et al.*, 2017] Baudin, M. & Lebrun, R. & Iooss, B. & Popelin, A.-L. (2016). OpenTURNS: An Industrial Software for Uncertainty Quantification in Simulation. 10.1007/978-3-319-12385-1_64.
- [Cannamela *et al.*, 2008] Cannamela, C., Garnier, J., & Iooss, B. (2008). Controlled Stratification for Quantile Estimation. *The Annals of Applied Statistics*, **2**(4), 1554–1580. <http://www.jstor.org/stable/30245147>
- [Cornuet *et al.*, 2012] Cornuet, J. M., Marin, J. M., Mira, A., & Robert, C. P. (2012). Adaptive multiple importance sampling. *Scandinavian Journal of Statistics*, **39**(4), 798-812
- [David & Nagaraja, 2003] David and Nagaraja (2003). Order Statistics. Wiley.
- [Echard *et al.*, 2011] Echard, B., Gayton, N., & Lemaire, M. (2011). AK-MCS: an active learning reliability method combining Kriging and Monte Carlo simulation. *Structural Safety*, **33**(2), 145-154.
- [Egloff & Leippold, 2010] Egloff, D., & Leippold, M. (2010). Quantile estimation with adaptive importance sampling. *The Annals of Statistics*, **38**(2), 1244–1278. <http://www.jstor.org/stable/25662275>
- [Gallard *et al.*, 2018] Gallard, F., Vanaret, C., Guénot, D, et al. [GEMS: A Python Library for Automation of Multidisciplinary Design Optimization Process Generation](#). In : 2018 AIAA/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference. 2018. p. 0657.
- [Ginsbourger *et al.*, 2010] Ginsbourger, D., Le Riche, R., Carraro, L. (2010). Kriging Is Well-Suited to Parallelize Optimization. In: Tenne, Y., Goh, CK. (eds) Computational Intelligence in Expensive Optimization Problems. Adaptation Learning and Optimization, vol 2. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-10701-6_6

Bibliographie (2/3)



- [Jala *et al.*, 2012] Jala, M., Lévy-Leduc, C., Moulines, E., Conil, E., & Wiart, J. (2012). Sequential design of computer experiments for parameter estimation with application to numerical dosimetry. In *2012 Proceedings of the 20th European Signal Processing Conference (EUSIPCO)* (pp. 909-913). IEEE.
- [Jala *et al.*, 2016] Jala, M., Lévy-Leduc, C., Moulines, É., Conil, E., & Wiart, J. (2016). Sequential design of computer experiments for the assessment of fetus exposure to electromagnetic fields. *Technometrics*, **58**(1), 30-42.
- [Johnson, 2005] Johnson, S.G. (2005). The NLOpt nonlinear-optimization package
- [Jones *et al.*, 1998] Jones, D.R., Schonlau, M. & Welch, W.J. (1998). Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Functions. *Journal of Global Optimization* **13**, 455–492. <https://doi.org/10.1023/A:1008306431147>
- [Labopin-Richard & Picheny, 2016] Labopin-Richard, Tatiana & Picheny, Victor. (2016). Sequential design of experiments for estimating percentiles of black-box functions. *Statistica Sinica*. 10.5705/ss.202016.0160.
- [Laurin, 2005] Laurin, F., Approche multiéchelle des mécanismes de ruine progressive des matériaux stratifiés et analyse de la tenue de structures composites (Doctoral dissertation, Besançon).
- [Metropolis & Ulam, 1949] Metropolis, N., & Ulam, S. (1949). The Monte-Carlo method. *Journal of the American statistical association*, **44**(247), 335-341.
- [Molga & Smutnicki, 2005] Molga, M., & Smutnicki, C. (2005). Test functions for optimization needs. Test functions for optimization needs, **101**, 48.

Bibliographie (3/3)



- [Morio, 2012] Morio, Jérôme. "Extreme quantile estimation with nonparametric adaptive importance sampling." *Simulation Modelling Practice and Theory* **27** (2012): 76-89.
- [Morris, 1991] Morris, M. D. (1991). Factorial Sampling Plans for Preliminary Computational Experiments. *Technometrics*, **33**(2), 161–174. <https://doi.org/10.2307/1269043>
- [Oakley, 2004] Oakley, J. (2004). Estimating Percentiles of Uncertain Computer Code Outputs. *Journal of the Royal Statistical Society. Series C (Applied Statistics)*, **53**(1), 83–93. <http://www.jstor.org/stable/3592688>
- [Ranjan *et al.*, 2008] Ranjan, P., Bingham, D., & Michailidis, G. (2008). Sequential Experiment Design for Contour Estimation from Complex Computer Codes. *Technometrics*, **50**(4), 527–541. <http://www.jstor.org/stable/25471535>
- [Viana *et al.*, 2012] Viana, F.A.C., Haftka, R.T. & Watson, L.T. (2012). Sequential sampling for contour estimation with concurrent function evaluations. *Struct Multidisc Optim* **45**, 615–618. <https://doi.org/10.1007/s00158-011-0733-9>
- [Wang *et al.*, 2022] Wang, A., Liang, H., McDannald, A., Takeuchi, I., & Kusne, A. G. (2022). Benchmarking active learning strategies for materials optimization and discovery. *Oxford Open Materials Science*, **2**(1), itac006.
- [Zhang, 1996] Zhang, P. (1996). Nonparametric importance sampling. *Journal of the American Statistical Association*, **91**(435), 1245-1253.

Résolution du problème d'apprentissage (cf. Ginsbourger *et al.*)

Approche Directe

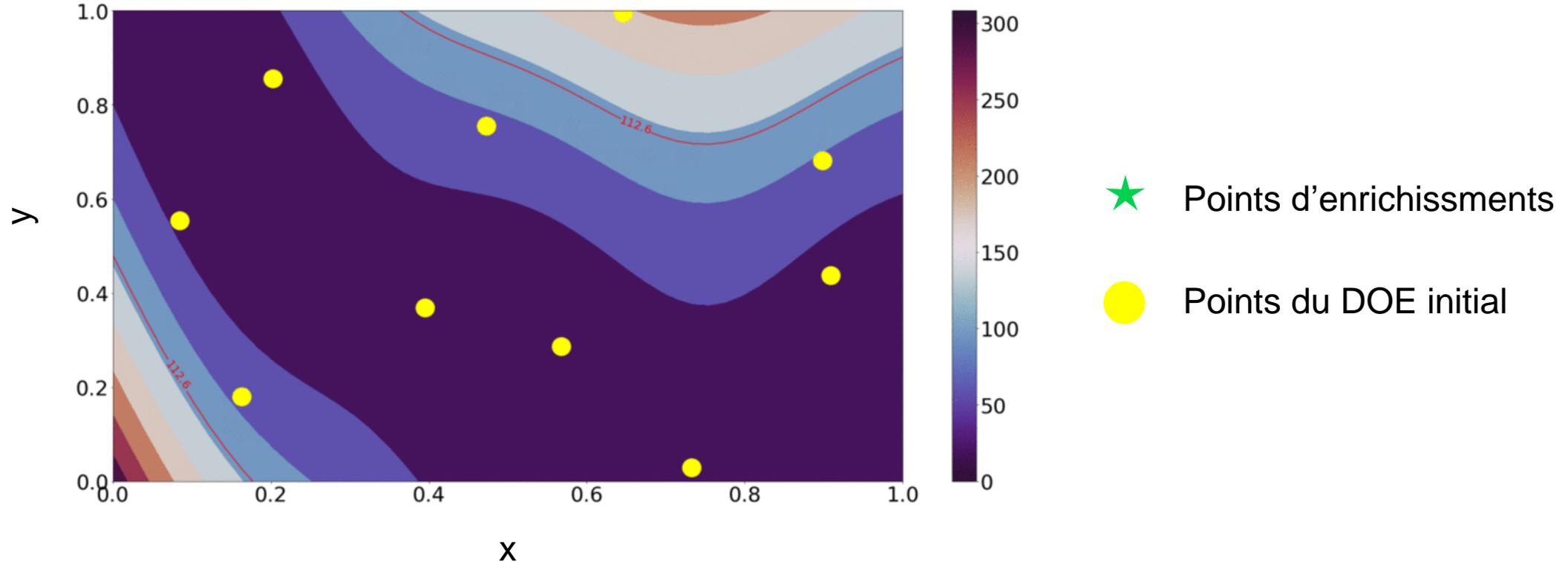
- Calcul du critère infill par Monte-Carlo
- Recherche en dimension $d \times q$ des points d'enrichissement

Approche « Kriging Believer » / « Constant Liar »

- Simplification de la résolution du problème d'enrichissement
- Substitution d'un problème de dimension $d \times q$ en q problèmes de dimension d chacun
- Bien que l'on gagne en simplicité, par rapport à une approche directe, les résultats sont généralement dégradés

- Dans cette première mise en œuvre, on choisit d'utiliser une méthode directe, quitte ensuite à étudier plus en avant la performance des méthodes simplifiées.

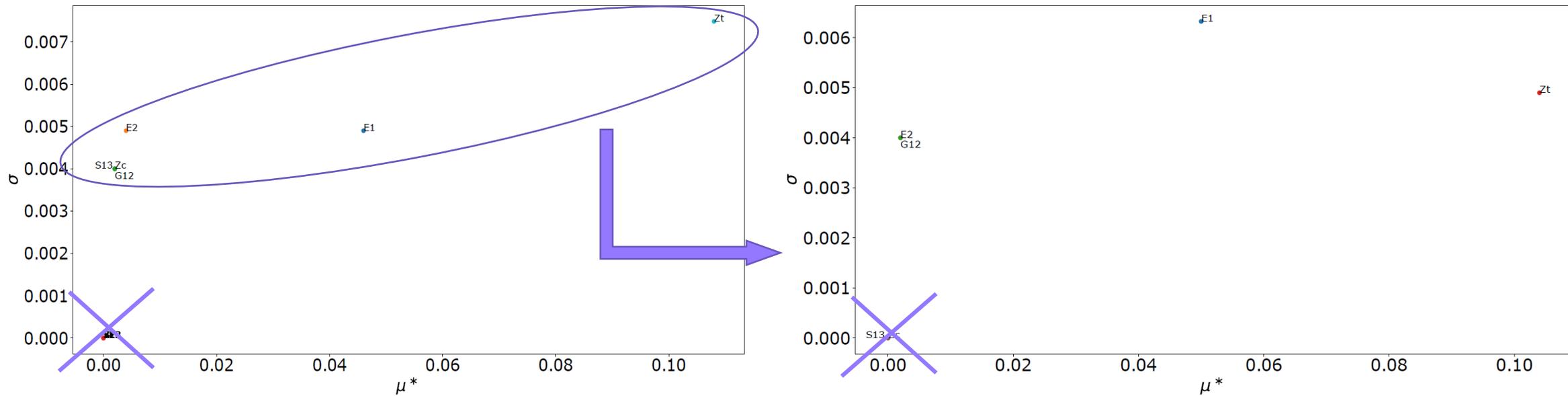
Localisation des points d'enrichissements



- Au début, les points d'enrichissement sont localisés autour de la ligne de niveau associée au quantile
- Assez vite, comme l'estimation du quantile a déjà presque convergé, les points sont envoyés sur la totalité de l'espace de recherche pour améliorer la qualité globale du métamodèle

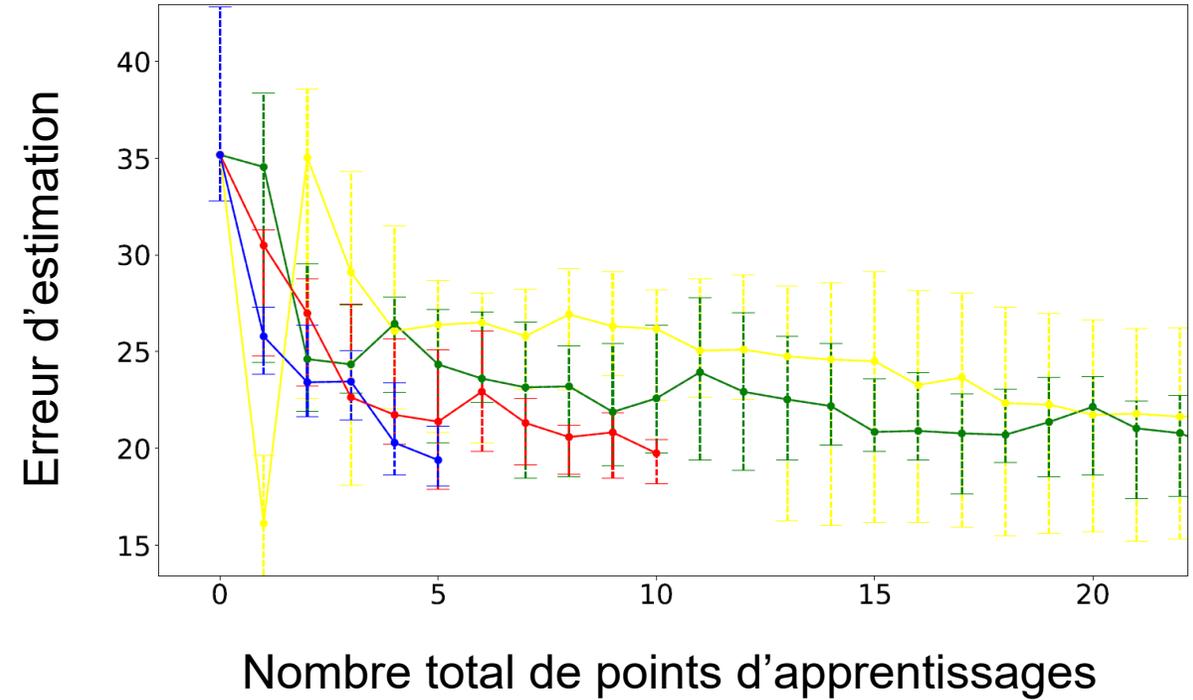
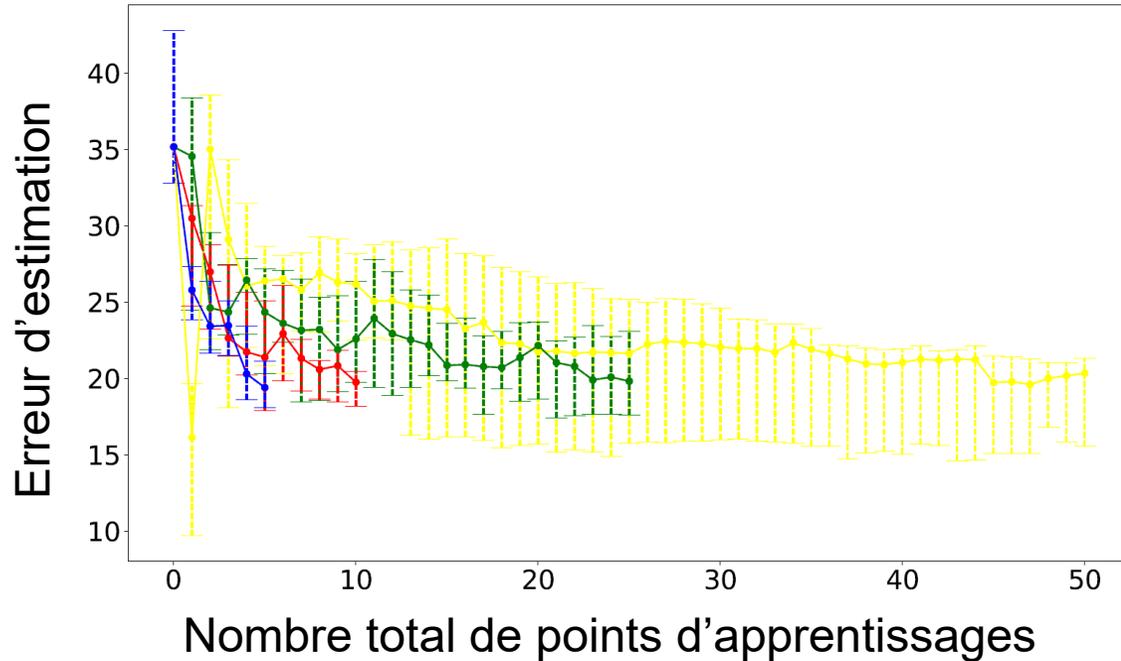
Choix des paramètres de design

- Pour réduire la taille de l'espace de recherche qui est dimension $d = 14$, on procède à une analyse de sensibilité de type Morris [Morris,1991] à partir de la librairie GEMSEO [Gallard,2018].



- Variables de design finale: E_1, E_2, G_{12} et Z_t
- Distribution des variables normalisée $\mathcal{N}(0, I_4)$ tronquée à ± 3 pour chaque composante

Etude de convergence



Observations:

- En dépit de l'erreur résiduelle importante, on observe de nouveau différentes vitesses de convergences
- En particulier avec la méthode point par point, on observe que la dispersion des valeurs du quantiles demeure particulièrement importante