

# Introduction à l'analyse de sensibilité de modèles numériques

J.-B. Blanchard<sup>1,a</sup> et B. Iooss<sup>2,b</sup>

<sup>1</sup>Den-Service de thermo-hydraulique et de mécanique des fluides (STMF), CEA, Université Paris-Saclay, F-91191, Gif-sur-Yvette, France

<sup>2</sup>EDF R&D, 6 Quai Watier, 78401 Chatou, France

**Résumé** Cette note introduit la procédure d'analyse de sensibilité en discutant de son intérêt pour différents cadres d'application possibles. Une description de la méthodologie générale est d'abord faite en introduisant quelques principes répandus, mais aussi en citant des concepts plus poussés (pour lesquels seules des références sont fournies pour complétude). À partir d'un problème physique simple, plusieurs méthodes sont testées permettant différents niveaux d'analyse et de conclusion.

## 1 Introduction

De nombreuses problématiques scientifiques et industrielles sont complexes, au sens où un grand nombre d'inconnus sont en entrée du système étudié, mais aussi où l'analyse de la physique sous-jacente n'est pas analytiquement réalisable. Associée à l'utilisation de modèles numériques décrivant le système, l'analyse de sensibilité est alors un outil précieux, car elle permet de distinguer les variables influentes de celles que l'on peut négliger dans l'analyse, de quantifier cette influence, d'identifier les effets d'interaction entre variables. . . Il devient alors possible d'améliorer les étapes de quantification d'incertitudes, de vérification, de calage et de validation de modèles [1].

Cette note introduit différents concepts généraux liés à l'analyse de sensibilité, en discutant l'intérêt de la visualisation graphique, les outils de criblage et les mesures d'importances. Elle met aussi l'accent sur l'analyse de robustesse des résultats d'une étude statistique aux modèles probabilistes sous-jacents. Certaines méthodes seront appliquées à un cas physique simple détaillé dans la section 1.1.

### 1.1 Présentation du cas d'application

Le dispositif expérimental est constitué d'une plaque plane, immergée dans un écoulement fluide de température constante (de valeur  $T_\infty$ ) dont les conditions d'écoulement sont connues. Ce problème est unidimensionnel (*c.f.* fig. 1) : la largeur du solide est fixée à  $2e$  (suivant la direction  $x$ ) et la longueur est considérée infinie (suivant la direction  $y$ ).

Le but de cette expérience est de mesurer la température de la plaque en tout point (suivant  $x$ ) et tout temps (noté  $t$ ), qu'on exprime en terme de jauge thermique, notée  $\theta$ , à partir de la température initiale de la plaque (notée  $T_i$ ), comme :

$$\theta(x, t) = \frac{T(x, t) - T_i}{T_\infty - T_i}. \quad (1)$$

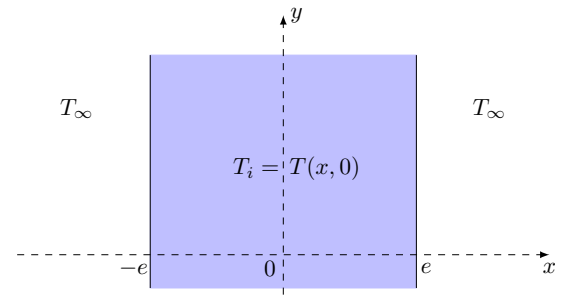


FIGURE 1: Schéma du dispositif expérimental.

Cette mesure est utile pour estimer des propriétés de l'interface solide-liquide (e.g. le nombre de Biot  $B_i$ ). Le calcul de la jauge thermique peut être fait de manière analytique, sous certaines conditions en calculant la série infinie suivante :

$$\theta(x_{ad}, t_{ad}) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \cos(\omega_n x_{ad}) \exp\left(-\frac{1}{4} \omega_n^2 t_{ad}\right) \quad (2)$$

où les paramètres d'origine ( $x$  et  $t$ ) sont remplacés par des grandeurs adimensionnées (annotées *ad*), définies comme  $x_{ad} = x/e$  et  $t_{ad} = t \times \frac{4\lambda}{e^2 \rho C_p}$ . La position adimensionnée évolue entre -1 et 1 (de manière symétrique, donc on se focalisera sur l'intervalle  $[0, 1]$ ) et le temps adimensionné (qui est un temps caractéristique) sera compris entre 0 et 10. Les grandeurs  $e$ ,  $\lambda$ ,  $\rho$  et  $C_p$  sont les propriétés physiques du matériau composant la plaque, introduites plus en détails ci-après (*c.f.* table 1). Les hypothèses d'écoulement et les termes spécifiques ( $\beta_n$ ,  $\gamma_n$  et  $\omega_n$ ) ne seront pas discutés ici (*c.f.* Ref [2] pour plus de détails).

Les évolutions de la jauge thermique seront considérées pour une valeur de profondeur adimensionnée fixée, en observant l'évolution en fonction du temps adimensionné. Le modèle d'incertitude utilisé à travers cette note est simple : on suppose que tous les paramètres d'entrée (les propriétés physiques du Téflon) suivent une loi normale (*c.f.* table 1 où valeur et incertitude sont les moyenne et écart type).

a. e-mail : jean-baptiste.blanchard@cea.fr

b. e-mail : bertrand.iooss@edf.fr

	Valeur	Incertitude
Épaisseur $\times 10^{-3}$ [m] : $e$	10	0.05
Conductivité thermique $\times 10^{-3}$ [W/(m.K)] : $\lambda$	250	1.5
Capacité thermique massique [J/(kg.K)] : $C_p$	1300	15.6
Masse volumique [kg/m <sup>3</sup> ] : $\rho$	2200	4.4

TABLE 1: Résumés des propriétés physiques du Téflon.

## 2 Importance de la visualisation

Si un ensemble de données est disponible (un jeu de calculs du modèle), il est possible d’avoir une première intuition des résultats d’une analyse de sensibilité par la visualisation. Une visualisation par paires représentant une matrice de taille  $n_V \times n_V$ ,  $n_V$  rassemble le nombre de variables d’entrée ( $d$ ) et de sortie. La diagonale de cette matrice montre les distributions de chacune des variables, tandis que les éléments croisés sont des nuages de points représentant la variable de la colonne  $j$  en fonction de celle de la ligne  $i$ .

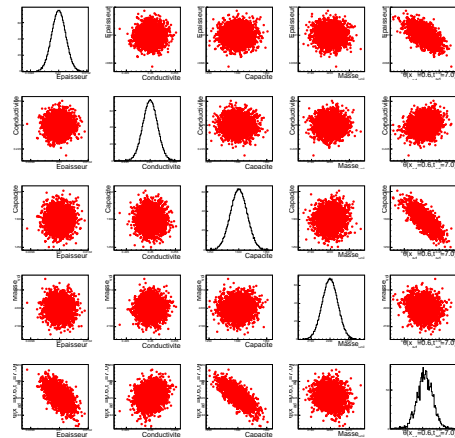
La fig. 2a montre une visualisation par paires pour le cas d’application introduit en section 1.1, avec les quatre paramètres d’entrée définis dans la table 1 et une variable de sortie scalaire  $\theta$  (configuration de la jauge où  $(x_{ad}, t_{ad}) = (0.6, 7)$ ). On voit clairement les distributions gaussiennes des lois d’entrée et de la sortie correspondante. En regardant particulièrement la dernière colonne, on voit que la valeur de la jauge semble plus sensible à l’épaisseur (première ligne) et à la capacité thermique (troisième ligne) qu’à la masse volumique par exemple (quatrième ligne).

La fig. 2b introduit une autre manière de visualiser ces données, par graphe en coordonnées parallèles ou *Cobweb plot* [1], qui donne à voir chaque donnée comme une ligne passant par la valeur de chacune des variables. Il est alors aisé de mettre en exergue une zone d’intérêt particulière (ici les queues de distributions de la jauge, en rouge et bleu) pour voir si ces dernières sont issues de zones précises des entrées (révélant possiblement des effets d’interaction). La forte anti-corrélation entre notre sortie (dernier axe) et la capacité thermique (axe du milieu) est confirmée.

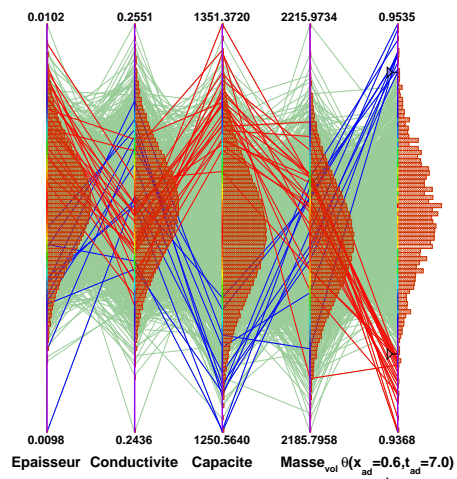
Ces techniques simples peuvent être difficiles à utiliser dans le cas d’un grand nombre de variables d’entrée. Les techniques de criblage peuvent alors être appliquées au préalable pour réduire la dimension du problème.

## 3 Techniques de criblage

Les techniques de criblage permettent souvent une exploration rapide (au sens du nombre de calculs à réaliser avec le modèle) du comportement du processus analysé, pour en identifier les contributions les plus négligeables. La méthode la plus connue dans l’ingénierie est celle dite *One At*



(a) Visualisation par paires



(b) Visualisation parallèle

FIGURE 2: Visualisation d’un jeu de données ( $n = 2000$ ).

*a Time* (OAT) pour laquelle chaque variable est modifiée en fixant la valeur de toutes les autres, ce qui est limitatif.

Parmi toutes les méthodes de criblage existantes, nous mettons l’accent sur la méthode de Morris qui ne requiert pas d’hypothèses sur la régularité du modèle. La méthode de Morris [3] permet de classer les entrées en trois groupes de variables (détaillés ci-après) en transformant l’espace des entrées, de dimension  $d$ , en un hypercube  $[0, 1]^d$ , discrétisé en  $p$  niveaux. Un déplacement élémentaire est choisi ( $\Delta$ ) afin de réaliser une première trajectoire  $t$  : à partir d’un point de départ aléatoire de l’hypercube discrétisé (première estimation par le code) on effectue un mouvement dans une direction (variable d’entrée  $i$ ) choisie au hasard (amenant une seconde estimation). On calcule alors pour ce déplacement élémentaire, l’effet élémentaire  $EE_i$ , comme

$$EE_i^t = \frac{y(X_1^t, \dots, X_i^t + \Delta, \dots, X_d^t) - y(X_1^t, \dots, X_i^t, \dots, X_d^t)}{\Delta}.$$

Cette opération est répétée pour chaque direction, complétant la trajectoire  $t$ , le tout étant refait ensuite autant de fois que le nombre de trajectoire demandé ( $n_t$ ). Une interprétation statistique des effets élémentaires est faite en calculant l'effet moyen absolu ( $\mu_i^*$ ) et l'écart type des effets moyens ( $\sigma_i$ ) pour chaque variable d'entrée, comme

$$\mu_i^* = \frac{1}{n_t} \sum_{t=1}^r |EE_i^t| \text{ et } \sigma_i^2 = \frac{1}{n_t - 1} \sum_{t=1}^{n_t} (EE_i^t - \mu_i)^2.$$

On peut alors classer ces variables en trois groupes : celles négligeables ( $\mu_i^*$  et  $\sigma_i$  faibles), celles dont l'effet est linéaire et sans interaction avec les autres variables ( $\sigma_i$  faible mais  $\mu_i^*$  important) et celles dont l'effet est non linéaire et/ou avec interaction avec les autres ( $\sigma_i$  et  $\mu_i^*$  importants).

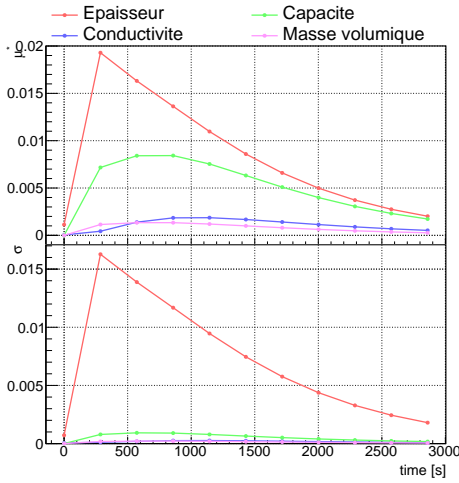


FIGURE 3: Evolutions temporelles de  $\mu^*$  (haut) et  $\sigma$  (bas).

Les résultats de cette méthode (en prenant  $r = 10$ ) appliquée à la plaque de Téflon sont donnés pour une position adimensionnée  $x_{ad}$  de 0.8. La fig. 3 représente les évolutions du  $\mu^*$  (haut) et du  $\sigma$  (bas) en fonction du temps. Les premières constatations de la visualisation (*c.f.* section 2) sont confirmées : les variables les plus importantes semblent être l'épaisseur et la capacité thermique. On en déduit aussi que la jauge thermique ne dépend pas linéairement de l'épaisseur ( $\sigma$  du même ordre de grandeur que  $\mu^*$ ).

## 4 Mesure d'importance

### 4.1 Hypothèse de linéarité ou monotonie

Pour obtenir une indication quantitative de l'impact de chaque entrée, il est possible d'utiliser des grandeurs simples à estimer, comme le coefficient de corrélation de Pearson ou le coefficient SRC<sup>1</sup> [1]. Ils sont valides sous l'hypothèse

(à valider par des critères de qualité) d'un modèle sous-jacent linéaire. Si le modèle ne peut être considéré linéaire mais monotone, un équivalent des coefficients introduits ci-dessus peut être estimé à partir des rangs des observations (non plus des valeurs). Ces derniers s'appellent alors coefficient de Spearman et SRRC<sup>2</sup> et leur interprétation reste également conditionnée à la valeur des critères de qualité.

### 4.2 Décomposition fonctionnelle de la variance

Considérons le cas général d'une fonction  $y = f(x_1, \dots, x_d)$  de carré intégrable sur son domaine  $\Omega$  ( $\{x_i\}_{1 \leq i \leq d} \in \mathbb{R}$ ). Elle peut être décomposée en fonctions élémentaires [4], comme :

$$y = f_0 + \sum_{i=1}^d f_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j}^d f_{i,j}(x_i, x_j) + \dots + f_{x_1, \dots, x_d}(x_1, \dots, x_d).$$

Cette décomposition est unique [5] si  $f_0 = \mathbb{E}[f(\mathbf{x})]$ ,  $\int_{\Omega} f_i d\mathbf{x} = 0 \forall i$  et  $\int_{\Omega} f_k f_l d\mathbf{x} = 0 \forall k \neq l$ .

Dans le cadre statistique, avec un vecteur aléatoire  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$  et  $Y = f(\mathbf{X})$ , sous l'hypothèse d'indépendance des entrées, on obtient en passant à la variance :

$$\text{Var}[Y] = \text{Var}[f(\mathbf{X})] = \sum_{i=1}^d V_i + \sum_{1 \leq i < j \leq d} V_{i,j} + \dots + V_{x_1, \dots, x_d},$$

où  $V_i = \text{Var}[f_i(X_i)]$ . En normalisant par  $\text{Var}[Y]$ , on obtient une décomposition fonctionnelle de la variance : la somme de tous les indices (au nombre de  $2^d - 1$ , appelés indices de Sobol) vaut 1. L'indice du premier ordre  $S_i$  ( $i \in [1, d]$ ), quantifie la fraction de la variance de la sortie due à l'entrée  $i$  sans considération des interactions avec les autres entrées. L'indice total  $S_{T_i}$  est une somme de tous les indices pour lesquels l'entrée  $i$  contribue.

La fig. 4 montre les mesures de indices du premier ordre (haut) et totaux (bas) pour une position adimensionnée  $x_{ad}$  de 0.8, en fonction du temps. Les distributions sont très proches entre indices du premier ordre et indices totaux montrant une très faible valeur d'interaction entre les entrées. Les barres verticales représentent l'incertitude due à l'estimation de ces indices par échantillonnage Monte Carlo qui nécessite un nombre d'évaluations du modèle élevée ( $N = 10000$  ici).

Il existe de nombreux autres indices de sensibilité quantifiant la sensibilité d'un phénomène à ses variables d'entrées, comme les indices de Shapley [6] qui permettent de réaliser l'analyse de sensibilité pour des variables d'entrée corrélées entre elles et les indices HSIC [7] qui permettent de capturer des dépendances beaucoup plus complexes.

## 5 Analyse de robustesse aux lois

L'une des hypothèses les plus critiquées en quantification d'incertitudes est le choix des distributions de probabilité assignées aux variables d'entrée qui se propagent à

1. Standard Regression Coefficient

2. Standard Rank Regression Coefficient

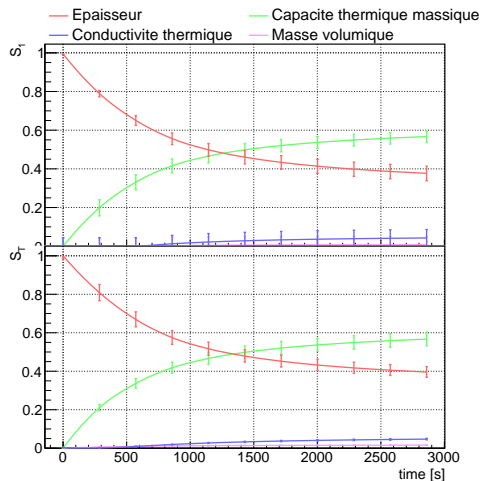


FIGURE 4: Distribution des  $S_i$  (haut) et  $S_{T_i}$  (bas).

travers le modèle numérique. Par conséquent, il est souvent nécessaire de quantifier l’impact des lois de probabilités sur les quantités d’intérêt calculées (moyenne, variance, probabilité de défaillance, quantile...). Cette question est différente de celles posées par les méthodes d’analyse de sensibilité présentées précédemment. Les indices PLI (“Perturbed-Law based Indices”) permettent de répondre à cette question de manière rigoureuse et élégante (*c.f.* [8]). Leur principe consiste à évaluer l’influence d’une perturbation d’un moment de la loi d’une entrée sur la quantité d’intérêt. Les lois perturbées sont calculées par minimisation de la divergence de Kullback-Leibler par rapport à la loi initiale. Par exemple, une loi gaussienne dont la moyenne est perturbée reste une loi gaussienne, ce qui n’est pas le cas d’une loi uniforme.

L’avantage de cette technique est qu’elle ne requiert pas de nouveaux appels au modèle numérique que ceux déjà réalisés. Elle est intéressante pour appuyer les évaluations statistiques de critères de sûreté par code de calcul, par exemple pour l’estimation d’un quantile de la sortie. La fig. 5 l’illustre sur le cas de la jauge (avec  $(x_{ad}, t_{ad}) = (0.6, 7)$ ) avec un échantillon de calculs de taille  $n = 2000$ . L’indice est positif (resp. négatif) quand le quantile augmente (resp. diminue). On constate qu’en changeant la moyenne de la capacité de 1276 à 1324, le quantile varie de plus ou moins 0.25%.

## 6 Conclusion

L’analyse de sensibilité a été introduite dans cette note en présentant plusieurs méthodologies, dépendant du but de l’étude considérée et des hypothèses sur le modèle sous-jacent. En pratique, le choix de la méthode est souvent dictée par le nombre d’évaluations qu’il est possible de faire avec le code de calcul (fortement lié au nombre de variables d’entrée) et les hypothèses de régularité que l’on peut faire sur le modèle. Ce coût est particulièrement élevé pour l’estimation

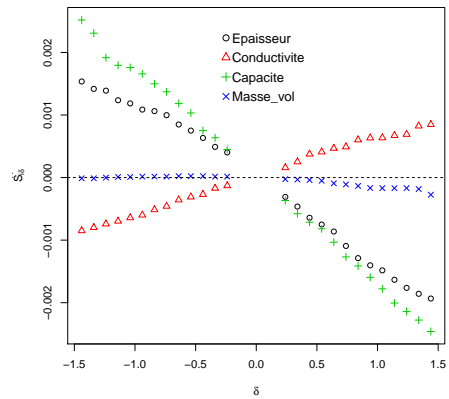


FIGURE 5: Indices PLI : déviation relative du quantile à 95% de la jauge thermique en fonction de perturbations  $\delta$  (en nombre d’écart type) des moyennes des lois des entrées.

des indices de Sobol. Utiliser des plans d’expériences adéquats ou des techniques de métamodèles permet souvent de réduire ce coût. Une revue méthodologique est disponible dans [9] et [10] (référence qui contient également les descriptions complètes d’un grand nombre de techniques).

## Références

1. A. Saltelli, K. Chan, and E. Scott, *Sensitivity Analysis*. New York : Wiley, 2008.
2. J-B. Blanchard, G. Damblin, J-M. Martinez, G. Arnaud, and F. Gaudier, “The uranie platform : an open-source software for optimisation, meta-modelling and uncertainty analysis,” *EPJ Nuclear Sci. Technol.*, vol. 5, p. 4, 2019.
3. M. Morris, “Factorial sampling plans for preliminary computational experiments,” *Technometrics*, vol. 33, pp. 161–174, 1991.
4. W. Hoeffding, “A class of statistics with asymptotically normal distribution,” in *Breakthroughs in Statistics*, pp. 308–334, Springer, 1992.
5. I. Sobol’, “Sensitivity indices for nonlinear mathematical models,” *Mathematical Modelling and Computational Experiment 1*, 1993.
6. A. B. Owen, “Sobol’ indices and shapley value,” *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification*, vol. 2, no. 1, pp. 245–251, 2014.
7. S. Da Veiga, “Global sensitivity analysis with dependence measures,” *Journal of Statistical Computation and Simulation*, vol. 85, no. 7, pp. 1283–1305, 2015.
8. P. Lemaître, E. Sergienko, A. Arnaud, N. Bousquet, F. Gamboa, and B. Iooss, “Density modification based reliability sensitivity analysis,” *Journal of Statistical Computation and Simulation*, vol. 85, pp. 1200–1223, 2015.
9. B. Iooss and P. Lemaître, “A review on global sensitivity analysis methods,” in *Uncertainty management in Simulation-Optimization of Complex Systems : Algorithms and Applications* (C. Meloni and G. Dellino, eds.), pp. 101–122, Springer, 2015.
10. R. Ghanem, D. Higdon, and H. Owahdi, eds., *Springer Handbook on Uncertainty Quantification*. Springer, 2017.