

Planification séquentielle d'expériences

La planification séquentielle d'expériences fait référence à un processus itératif qui consiste à sélectionner, à chaque itération, un point ou un ensemble de points pour compléter le plan d'expériences initial. La Figure 5.1 montre comment elle s'intègre dans un workflow de méta-modélisation dans un contexte simple ou multi-fidélité. En multi-fidélité, la stratégie de planification séquentielle doit également déterminer le niveau de fidélité devant être évalué. Dans cette thèse, nous proposons des méthodes de planification séquentielle d'expériences adaptées à des applications en ingénierie de réservoir, notamment dans un cadre multi-fidélité.

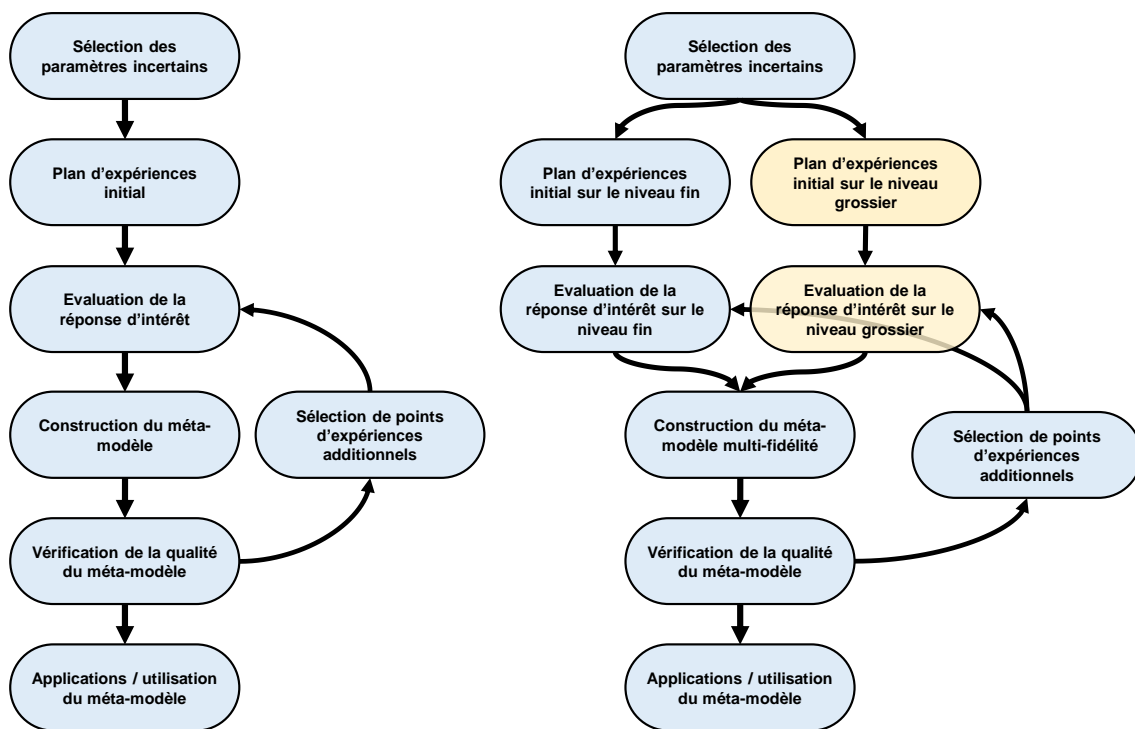


Figure 5.1 : Schéma d'un workflow basé sur la méta-modélisation utilisant une planification séquentielle d'expériences : à gauche dans un cadre simple fidélité, à droite dans un cadre multi-fidélité à deux niveaux.

Ce chapitre est découpé en quatre parties. En partie 5.1, nous introduisons la planification séquentielle d'expériences et ses enjeux. On s'intéresse aux stratégies visant la conception d'un méta-modèle prédictif sur l'ensemble de l'espace des paramètres incertains, en particulier lorsque des modèles de krigage ou co-krigage multi-fidélité sont considérés. Dans les parties 5.2 et 5.3, nous décrivons en détail

les algorithmes de planification séquentielle que nous suggérons pour la conception de méta-modèles prédictifs, en simple et multi-fidélité, respectivement. Ces algorithmes sont notamment adaptés à la méta-modélisation vectorielle de la fonction objectif proposée précédemment (partie 3.3). Les stratégies détaillées permettent de sélectionner itérativement un point d'expérience additionnel. Une extension permettant la sélection d'un ensemble de points à chaque itération est proposée dans la partie 5.4.

5.1 Introduction

La planification d'expériences via l'échantillonnage par hypercube latin (LHS), décrite en section 2.2.1, est une méthode simple et efficace pour définir des plans d'expériences qui explorent l'espace des paramètres. Cependant, il n'est pas possible de savoir si la taille du LHS choisi permettra la construction d'un méta-modèle suffisamment prédictif pour l'application désirée. En effet, outre la méthode de planification d'expériences considérée, la prédictivité d'un méta-modèle dépend de la taille n du plan d'expériences utilisé. Or, la relation entre n et la prédictivité du méta-modèle est a priori inconnue. Une pratique courante consiste à définir des plans d'expériences de grande taille afin de s'assurer de la bonne prédictivité du méta-modèle. Une telle approche présente toutefois des inconvénients. D'une part, un grand plan d'expériences ne garantit pas que la prédictivité du méta-modèle soit suffisante. Si elle ne l'est pas, il faut revoir le plan d'expériences en considérant des points d'expériences additionnels. D'autre part, cette approche ne permet pas de minimiser n . Ainsi, on peut considérer des plans d'expériences plus grands que nécessaire, et donc gaspiller le temps de calcul pour les évaluations superflues.

Principe

La planification séquentielle d'expériences consiste à définir un plan d'expériences initial, puis à le compléter itérativement par un point, ou un ensemble de points, jusqu'à l'épuisement du budget en temps de simulation ou l'obtention d'un méta-modèle de la qualité souhaitée. Ainsi, une planification séquentielle peut permettre la définition d'un plan d'expériences dont la taille n est déterminée par la prédictivité du méta-modèle.

Les méthodes de planification d'expériences présentées en partie 2.1, comme les LHS, ne sont généralement pas séquentielles. Une exception notable est celle des suites à faible discrédance, pour lesquelles la sélection de points additionnels peut se faire naturellement via le calcul des termes suivants de la suite. Il est ainsi possible d'utiliser un critère géométrique ou statistique pour choisir les points d'expériences qui sont ajoutés au fur et à mesure. Toutefois, un intérêt majeur de la planification séquentielle d'expériences est qu'elle permet de choisir les prochains points d'expériences à partir des informations fournies par le méta-modèle actuel. On parle alors de planification séquentielle adaptative et de plans adaptatifs. Il faut dans ce cas définir une stratégie de sélection des prochains points d'expériences, aussi appelé critère de remplissage. Une stratégie séquentielle judicieusement choisie peut permettre de construire plus efficacement des méta-modèles prédictifs qu'une planification d'expériences non adaptative.

Planification séquentielle et krigeage

Le choix du critère de remplissage dépend avant tout du but à atteindre. On distingue ainsi les stratégies visant l'optimisation de celles visant l'obtention d'un méta-modèle prédictif sur l'ensemble de l'espace. Dans le cadre d'une optimisation, les points d'expériences peuvent être ajoutés à proximité d'optima ou dans les zones susceptibles d'en contenir, afin de déterminer l'optimum global. Un critère

populaire avec le krigeage est celui de l'amélioration espérée (*Expected Improvement*) [Jones et al., 1998]. Différentes stratégies séquentielles ayant pour but l'optimisation sont décrites et passées en revue dans [Jones, 2001] et [Forrester and Keane, 2009].

Dans cette thèse, on cherche à construire des méta-modèles prédictifs sur l'ensemble de l'espace des paramètres. On s'intéresse donc à des stratégies séquentielles permettant d'améliorer rapidement la prédictivité globale du méta-modèle. L'idée la plus intuitive est de considérer des critères exploratoires afin de sélectionner des points permettant de combler les trous dans le plan d'expériences. Pour un modèle de krigeage, cette idée peut se traduire par la recherche du point qui maximise la variance de krigeage [Sacks et al., 1989]. En effet, la variance de krigeage (Équation 2.5) dépend de la distance du point par rapport aux points du plan d'expériences ainsi que des hyper-paramètres λ représentant les longueurs de corrélation dans les différentes directions. Elle peut ainsi être considérée comme une mesure de la distance entre le point considéré et les points du plan d'expériences. Suivant une idée similaire, un critère plus efficace consiste à intégrer la variance sur l'ensemble de l'espace, où IMSE (*Integrated Mean Square Error*), puis à sélectionner le point maximisant la réduction de l'IMSE [Bates et al., 1996] [Picheny et al., 2010].

Les stratégies basées sur la variance de krigeage sont d'une efficacité limitée lorsque la réponse d'intérêt a un comportement fortement non linéaire, par exemple lorsqu'elle présente de fortes variations de manière localisée dans l'espace. Dans ce cas, il peut être judicieux de densifier le plan d'expériences dans les zones où la réponse d'intérêt présente un comportement plus complexe afin d'améliorer le méta-modèle. Pour cela, on peut placer des points dans les zones de l'espace où l'erreur de prédiction du méta-modèle est la plus forte. Un critère basé sur la variance de krigeage est alors inadapté, car cette dernière ne contient pas d'information sur l'erreur réelle entre la prédiction du méta-modèle et la réponse d'intérêt.

C'est pour cette raison que d'autres stratégies, basées sur une estimation de l'erreur réelle de prédiction, ont été suggérées par [Kleijnen and Van Beers, 2004], [Busby, 2009] ou encore [Le Gratiet and Cannamela, 2015]. Elles utilisent les erreurs de validation croisée, c'est-à-dire les erreurs entre la prédiction par validation croisée et la valeur observée de la réponse d'intérêt, pour déterminer les zones dans lesquelles l'erreur de prédiction du méta-modèle est susceptible d'être importante. Par exemple, dans [Busby, 2009], un maillage adaptatif de l'espace est calculé à chaque itération. Ce maillage définit des cellules dans lesquelles on estime la qualité du méta-modèle à partir des erreurs de validation croisée. On sélectionne ensuite le point d'expérience additionnel en priorité dans la cellule présentant l'erreur de validation croisée la plus forte. La méthode proposée par [Le Gratiet and Cannamela, 2015] consiste à ajuster la variance de krigeage par les erreurs de validation croisée. Nous détaillons par la suite cette approche en section 5.2.1.

Planification séquentielle et co-krigeage multi-fidélité

Dans un contexte multi-fidélité, la stratégie de planification séquentielle d'expériences doit également déterminer le niveau de fidélité devant être évalué [Huang et al., 2006], [Le Gratiet and Cannamela, 2015]. Ce choix est un enjeu majeur en multi-fidélité car il influence directement la performance du méta-modèle. En effet, l'optimisation de la qualité du méta-modèle passe par la détermination de la meilleure allocation des évaluations par niveau de fidélité. Cela est notamment illustré à travers les résultats obtenus sur le cas PUNQ. Cependant, cette allocation est difficile à déterminer car elle dépend du cas d'étude, et plus précisément de la qualité de la corrélation entre les niveaux grossiers et fin, ainsi que des temps relatifs à l'évaluation de ces niveaux. Dans un contexte d'optimisation, une solution basée sur une version modifiée de l'amélioration espérée (EI), prenant notamment en compte les ratios des temps d'évaluation, est suggérée dans [Huang et al., 2006].

Des plans adaptatifs visant l'obtention d'un méta-modèle prédictif en multi-fidélité ont été proposés

par [Xiong et al., 2013] et [Le Gratiet and Cannamela, 2015]. Dans [Xiong et al., 2013], une approche multi-fidélité à deux niveaux est considérée. Le ratio entre le nombre d'expériences sur les niveaux fin et grossier est choisi au préalable par l'utilisateur. Le plan d'expériences initial est ensuite élargi de manière à obtenir des LHS imbriqués. La méthode proposée par [Le Gratiet and Cannamela, 2015] est généralisable à un nombre quelconque de niveaux de fidélité. Le choix du point d'expérience est déterminé par un critère basé sur la variance de krigeage/co-krigeage et les erreurs de validation croisée. Puis, le choix des niveaux de fidélité évalués se fait selon un arbitrage entre la réduction de l'IMSE et le coût en temps de l'évaluation, pour chacun des niveaux. Un avantage de cette approche est sa robustesse. En effet, elle reste pertinente quelle que soit la qualité de la corrélation entre les différents niveaux de fidélité.

5.2 Planification séquentielle et krigeage

Nous présentons dans cette partie l'algorithme que nous avons développé et utilisé au cours de cette thèse pour construire rapidement des méta-modèles globalement prédictifs dans un cadre simple fidélité. Comme expliqué dans la section 5.2.1, cet algorithme reprend en partie les idées du critère introduit dans la thèse de [Le Gratiet, 2013b] pour l'amélioration de la prédictivité d'un modèle de krigeage. Plus précisément, il peut être vu comme une adaptation de l'algorithme de [Le Gratiet, 2013b] au contexte de l'ingénierie de réservoir, et notamment à la modélisation vectorielle de la fonction objectif introduite précédemment (partie 3.3). Il est décrit, étape par étape, dans la section 5.2.2.

5.2.1 Présentation de l'algorithme proposé

Les propriétés ou réponses d'intérêt que l'on cherche à approcher en ingénierie de réservoir sont issues de la simulation d'écoulement (*cf.* partie 3.1). En pratique, ces réponses présentent généralement un comportement très complexe, fortement non linéaire. Pour cette raison, il est pertinent de privilégier un algorithme dont le critère de remplissage incorpore une estimation de l'erreur de prédiction réelle, comme ceux proposés par [Busby, 2009] ou [Le Gratiet and Cannamela, 2015]. Cette estimation sur l'erreur du méta-modèle peut être déduite de l'erreur de validation croisée lorsque l'on considère une observation comme inconnue (LOO-CV *Leave-One-Out Cross-Validation*).

Erreur de validation croisée normalisée

Nous reprenons ici les notations introduites dans le chapitre 2, notamment lors de la présentation du krigeage en section 2.2.2 et de la validation croisée en section 2.4.2. On note donc y la réponse d'intérêt que l'on souhaite approcher avec un méta-modèle, et $\mathbf{D} = \{\mathbf{x}_1; \dots; \mathbf{x}_n\}$ un plan d'expériences sur lequel on connaît les observations de y . On peut alors construire un modèle de krigeage à partir des observations de y sur \mathbf{D} d'estimateur \hat{y} et de variance \hat{s}^2 (Equations 2.7 et 2.8).

On rappelle aussi que la validation croisée consiste à supposer que l'observation i n'est pas connue, puis à construire un modèle de krigeage de y avec les $n - 1$ autres évaluations. On note $\hat{y}_{-i}(\mathbf{x})$ et $\hat{s}_{-i}^2(\mathbf{x})$ l'estimateur de krigeage et la variance associée calculés par validation croisée lorsque l'observation i n'est pas connue. L'erreur de validation croisée au point \mathbf{x}_i du plan d'expériences \mathbf{D} est alors $y(\mathbf{x}_i) - \hat{y}_{-i}(\mathbf{x}_i)$. On peut également calculer $\eta(\mathbf{x}_i)$ l'erreur de validation croisée normalisée par la variance de validation croisée aux points de \mathbf{D} :

$$\eta(\mathbf{x}_i) = \frac{(y(\mathbf{x}_i) - \hat{y}_{-i}(\mathbf{x}_i))^2}{\hat{s}_{-i}^2(\mathbf{x}_i)} \text{ pour } i = 1, \dots, n. \quad (5.1)$$

L'erreur de validation croisée peut être utilisée au sein d'une stratégie séquentielle afin de caractériser les zones dans lesquelles le modèle de krigeage n'est pas prédictif. En effet, une forte erreur pour un point d'expérience signifie que l'erreur de prédiction du méta-modèle serait forte si l'observation associée était inconnue. On en déduit que les erreurs de prédiction du méta-modèle au voisinage de ce point sont vraisemblablement importantes. On peut ainsi se servir de l'Équation 5.1 comme d'un moyen pour évaluer l'erreur réelle de prédiction du méta-modèle au voisinage des points du plan d'expériences.

On remarque toutefois qu'un plan d'expériences "malchanceux" peut être trompeur, et amener à la construction d'un méta-modèle erroné partout, sauf aux points du plan d'expériences (*cf.* [Jones, 2001]). Ainsi, même si l'erreur de validation croisée est nulle (ou faible), il est toujours possible que l'erreur de prédiction au voisinage de ce point soit importante. Toutefois, un tel cas de figure reste en pratique peu probable.

La normalisation par la variance de l'erreur de validation croisée est importante. Elle permet notamment de faire la distinction entre deux points d'expériences dont l'erreur serait similaire. En effet, une forte variance indique qu'une erreur importante peut être envisagée en ce point par le modèle de krigeage. En revanche, si pour un point on observe une variance très faible et une erreur très forte, le modèle n'est pas une bonne approximation au voisinage de ce point. On remarque d'ailleurs qu'une expression similaire à $\eta(\mathbf{x})$ (sans l'élevation au carré) est introduite dans [Jones et al., 1998] afin de tester la validité des modèles de krigeage.

Un critère basé sur une variance ajustée [Le Gratiet, 2013b]

Un critère de remplissage, basé à la fois sur la variance de krigeage et les erreurs de validation croisée normalisées, est suggéré dans [Le Gratiet, 2013b]. Plus précisément, il s'agit de maximiser la variance de krigeage après ajustement par l'erreur de validation croisée $\eta(\mathbf{x})$. Cette dernière n'étant connue qu'aux points de \mathbf{D} , [Le Gratiet, 2013b] introduit les cellules de Voronoi $(V_i)_{i=1,\dots,n}$ associées au plan d'expériences $\mathbf{D} = \{\mathbf{x}_1; \dots; \mathbf{x}_n\}$, définies de la manière suivante pour $i, j \in [1, n]$:

$$V_i = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|, \forall j \neq i \right\} \quad (5.2)$$

Un exemple de découpage de l'espace par des cellules de Voronoi est présenté sur la Figure 5.2. L'idée est ensuite d'attribuer $\eta(\mathbf{x}_i)$, l'erreur de validation croisée associée au point \mathbf{x}_i , à tous les points se trouvant dans la cellule de Voronoi V_i . Ainsi, le critère introduit par [Le Gratiet, 2013b] pour la sélection d'un point additionnel \mathbf{x}_{new} se résume à la résolution du problème suivant :

$$\mathbf{x}_{new} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} \left\{ s^2(\mathbf{x}) \left(1 + \sum_{i=1}^n \eta(\mathbf{x}_i) \mathbf{1}_{\mathbf{x} \in V_i} \right) \right\} \quad (5.3)$$

avec $\mathbf{1}_{\mathbf{x} \in V_i}$ une fonction indicatrice valant 1 si $\mathbf{x} \in V_i$ et 0 sinon. Ce critère consiste donc à maximiser la variance de krigeage $s^2(\mathbf{x})$ qui est élargie au voisinage des points d'expérience présentant une forte erreur de validation croisée. On note que ce critère ne nécessite pas le calcul du diagramme de Voronoi (*cf.* Figure 5.2). Il faut seulement déterminer la cellule de Voronoi dans laquelle on se trouve, ce qui est équivalent à un calcul de distance.

[Le Gratiet, 2013b] suggère de résoudre l'Équation 5.3 par l'utilisation couplée d'un algorithme évolutionnaire (ou un tirage de Monte-Carlo) et d'un algorithme de descente classique. L'idée est qu'en se plaçant dans une cellule de Voronoi donnée, le problème se résume à la recherche du point maximisant la variance, ce qui peut être résolu par une méthode d'optimisation classique (*e.g.* gradients

conjugués, Newton, *etc*). Il suffit de répéter cette opération dans chacune des cellules de Voronoi pour déterminer \mathbf{x}_{new} . Un tirage aléatoire ou un algorithme évolutionnaire peuvent alors définir des points de départ dans chacune des cellules de Voronoi. On remarque que l'auteur a montré la pertinence du critère associé à l'équation 5.3 à travers des comparaisons avec d'autres critères sur différentes fonctions tests, à savoir la minimisation de l'*IMSE* [Bates et al., 1996] et le critère proposé par [Kleijnen and Van Beers, 2004] basé sur la validation croisée et le jackknife (une autre méthode de ré-échantillonnage). De plus, ce critère a été étendu à une utilisation dans un cadre multi-fidélité dans [Le Gratiet and Cannamela, 2015].

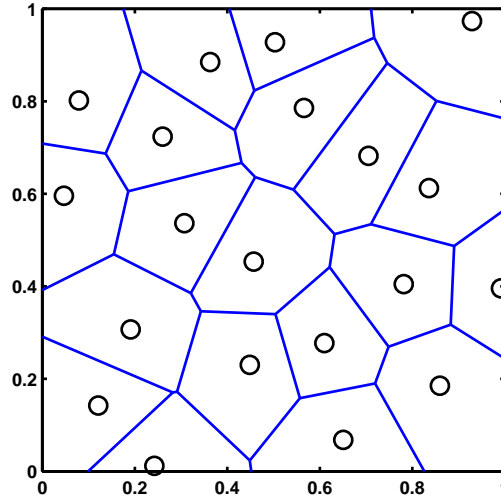


Figure 5.2 : Diagramme de Voronoi associé à un plan d'expériences LHS en dimension 2.

Principe de l'algorithme proposé

Nous suggérons dans cette thèse un critère semblable à celui proposé par [Le Gratiet, 2013b] (Équation 5.3). La différence principale est que notre critère limite la recherche du nouveau point à la cellule de Voronoi associée à la plus forte erreur de validation croisée normalisée. Dans cette cellule, nous sélectionnons le point maximisant la variance de krigeage. Une seconde différence réside dans la méthode de sélection de ce point. En effet, au lieu d'utiliser une optimisation, nous proposons d'effectuer la sélection du point maximisant la variance via l'échantillonnage d'un grand nombre de points dans la cellule de Voronoi concernée.

Notre approche reprend ainsi les éléments proposés par [Le Gratiet, 2013b] pour définir le critère de remplissage, c'est-à-dire l'utilisation de la variance de krigeage pondérée par les erreurs de validation croisée. Toutefois, notre critère donne priorité à l'information apportée par les erreurs de validation croisée par rapport à celle venant de la variance de krigeage. Ce choix est motivé par la complexité du comportement des réponses que l'on cherche à approcher en ingénierie de réservoir.

D'autre part, notre approche simplifie le problème à résoudre car elle réduit l'espace de recherche du nouveau point à la cellule de Voronoi associée à la plus grande erreur de validation croisée. De plus, l'approche par échantillonnage garantit que le point sélectionné se trouve dans la cellule de Voronoi désignée. Elle est souvent plus rapide qu'une optimisation et ne nécessite pas le calcul des frontières de la cellule de Voronoi. Toutefois, le point sélectionné n'est qu'une approximation du point maximisant la variance.

Une autre caractéristique du critère que nous proposons est qu'il est rapide à calculer. En effet, un

objectif essentiel de notre algorithme est qu'il puisse être applicable avec la modélisation vectorielle de la fonction objectif introduite en partie 3.3. A travers le cas d'étude PUNQ, nous avons montré que cette approche est plus efficace que la méta-modélisation directe, mais qu'elle est également plus complexe vis-à-vis du nombre de modèles de krigeage qu'elle nécessite (*c.f.* section 4.3.4). L'évaluation d'un tel méta-modèle (notamment l'évaluation de sa variance) peut être non négligeable en temps de calcul, et durer jusqu'à quelques secondes. C'est notamment pour cette raison que nous privilégions l'échantillonnage à la réalisation de multiples optimisations. En effet, il est bien plus rapide de faire simultanément un grand nombre d'évaluations via un calcul matriciel, plutôt que de réaliser séquentiellement un moindre nombre d'évaluations du méta-modèle.

5.2.2 Description de l'algorithme proposé

Algorithme 1 : Stratégie de planification séquentielle pour améliorer la prédictivité d'un modèle de krigeage - Ajout d'un unique point par itération

On note $(V_i)_{i=1,\dots,n}$ les cellules de Voronoi associées au plan d'expériences \mathbf{D} .

- 1 Définition et évaluation du plan d'expériences initial \mathbf{D} .
 - 2 Sélection et évaluation d'un point d'expérience additionnel \mathbf{x}_{new} .
 - (a) Construction du modèle de krigeage à partir des observations de (\mathbf{D}) .
 - (b) Calcul de $\mathbf{x}_{bad} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbf{D}} \{\eta(\mathbf{x})\}$. Soit V_{bad} la cellule de Voronoi associée à \mathbf{x}_{bad} .
 - (c) Échantillonnage de N points dans V_{bad} . Soit S l'ensemble de ces points.
 - (d) Sélection de $\mathbf{x}_{new} = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} \{s^2(\mathbf{x})\}$.
 - (e) Évaluation du point \mathbf{x}_{new} et mise à jour du plan d'expériences : $\mathbf{D} = \mathbf{D} \cup \mathbf{x}_{new}$.
 - 3 Répétition de l'étape 2 jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint.
-

Détail de l'Algorithme 1 étape par étape

Etape 1, on définit un plan d'expériences initial de petite taille en utilisant les LHS (section 2.2.1). La taille du plan d'expériences peut être prise égale à $d + 1$, avec d la dimension de l'espace des paramètres. On réalise des simulations d'écoulement pour chacun des points du plan d'expériences, puis on collecte les observations de la réponse d'intérêt en ces points.

Etape 2, il s'agit du processus de sélection d'un point additionnel pour le plan d'expériences. On répète cette étape jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint.

Etape 2a, à partir du plan d'expériences et des observations associées de la réponse d'intérêt, on construit un méta-modèle de la réponse d'intérêt en utilisant le krigeage (section 2.2.2).

Etape 2b, pour chacun des points du plan d'expériences, on calcule l'erreur de validation croisée normalisée η (Équation 5.1). On considère alors la cellule de Voronoi V_{bad} associée au point présentant la plus forte erreur de validation croisée.

Etape 2c, on échantillonne un nombre important N de points dans la cellule de Voronoi V_{bad} . Cet échantillonnage peut être réalisé grâce à une suite à faible discrédance (partie 2.1), comme celle de Sobol' [Sobol', 1967]. En effet, on peut calculer rapidement les termes de cette suite [Antonov and Saleev, 1979] afin de générer des points répartis régulièrement dans l'espace. Ensuite, il suffit de conserver uniquement les points appartenant à la cellule de Voronoi que l'on souhaite échantillonner, ce qui ne nécessite que des calculs de distance. On répète ce processus jusqu'à l'obtention d'un échantillon de points de la taille N souhaitée. Une grande valeur de N permettra de fournir une meilleure approximation du point maximisant la variance. On remarque que le temps de calcul associé à un tel

échantillonnage est généralement faible (quelques secondes). Cependant, ce temps est amené à croître avec la taille du plan d'expériences, dans la mesure où la taille des cellules de Voronoi va diminuer. Dans nos études, nous avons souvent considéré $N = 10000$.

Etape 2d, on calcule la variance de krigeage pour l'ensemble des points échantillonnés. On sélectionne le point pour lequel la variance est maximale.

Etape 2e, le point sélectionné est ajouté au plan d'expériences. On réalise une simulation d'écoulement et on collecte l'observation de la réponse d'intérêt pour ce nouveau point.

Etape 3, le critère d'arrêt peut être une valeur cible sur la prédictivité du méta-modèle. Celle-ci peut être évaluée par le coefficient Q^2 sur une base de test (si disponible) ou par validation croisée (partie 2.4). Le critère d'arrêt peut également être un budget en temps de calcul, qui en pratique serait défini par un nombre maximal de simulations d'écoulement.

Application à la fonction objectif

Dans le cadre d'une méta-modélisation directe de la fonction objectif (*cf.* section 3.3.1), l'Algorithme 1 peut être directement utilisé en considérant le modèle de krigeage de la fonction objectif (FO^{dir}).

Dans le cadre d'une méta-modélisation vectorielle de la fonction objectif (*cf.* section 3.3.2), l'Algorithme 1 peut aussi être directement utilisé. Il faut alors l'appliquer au méta-modèle de la fonction objectif FO^{vec} , dont l'estimateur et la variance associés sont donnés par les Équations 3.16 et 3.20, respectivement. On utilise également les estimations par validation croisée de ce méta-modèle, décrites dans la section 3.3.3.

5.3 Planification séquentielle et co-krigeage multi-fidélité

La planification séquentielle d'expériences est une approche pratique et efficace pour concevoir des méta-modèles prédictifs en simple fidélité. Dans un cadre multi-fidélité, la stratégie de planification doit sélectionner les points additionnels pour compléter le plan d'expériences, mais aussi choisir les niveaux de fidélité sur lesquels les nouveaux points doivent être évalués. Cette seconde tâche est cruciale car elle conditionne la pertinence d'une approche multi-fidélité pour la méta-modélisation (*cf.* Chapitre 4). Une allocation judicieuse des évaluations sur les différents niveaux de fidélité est indispensable pour que la méta-modélisation multi-fidélité soit plus performante que la méta-modélisation simple fidélité.

Dans cette partie, nous présentons l'algorithme développé et utilisé pour construire le plus rapidement possible des méta-modèles globalement prédictifs dans un cadre multi-fidélité. Cet algorithme est spécifiquement conçu pour une utilisation en ingénierie de réservoir. Le principe de la stratégie séquentielle suggérée, ainsi que les conditions d'application pour des performances optimales, sont décrits dans la section 5.3.1. L'algorithme est ensuite détaillé étape par étape dans la section 5.3.2.

5.3.1 Présentation de l'algorithme proposé

L'algorithme que nous proposons peut être vu comme une extension au cadre multi-fidélité de l'Algorithme 1 (section 2.2.2). Il se base sur les prédictions du méta-modèle pour les différents niveaux de fidélité obtenus grâce à la formulation récursive du co-krigeage multi-fidélité (section 2.3.2). Cet algorithme est ici décrit dans le cas de deux niveaux.

Résultats issus de la formulation réursive du co-krigeage multi-fidélité

Nous reprenons ici les notations introduites dans le chapitre 2, notamment lors de la présentation du co-krigeage multi-fidélité en section 2.3.2 et de la validation croisée en section 2.4.2. On note donc y_f et y_g la réponse d'intérêt aux niveaux fin et grossier, respectivement. On considère aussi un plan d'expériences imbriqué $\mathbf{D}_f \subset \mathbf{D}_g$ et les observations associées $y_f(\mathbf{D}_f)$ et $y_g(\mathbf{D}_g)$ pour construire un méta-modèle de y_f par co-krigeage multi-fidélité. On note \hat{y}_f et \hat{s}_f^2 l'estimateur du co-krigeage multi-fidélité et la variance associée pour le niveau fin (équations 2.29 et 2.30). Par construction, le calcul de \hat{y}_f et \hat{s}_f^2 dépend de celui de \hat{y}_g et \hat{s}_g^2 .

On peut également calculer les erreurs de validation croisée normalisées par les variances de validation croisée pour les niveaux fin et grossier, notées $\eta_f(\mathbf{x})$ et $\eta_g(\mathbf{x})$, respectivement :

$$\eta_f(\mathbf{x}_i) = \frac{(y_f(\mathbf{x}_i) - \hat{y}_{f,-i}(\mathbf{x}_i))^2}{\hat{s}_{f,-i}^2(\mathbf{x}_i)} \text{ pour } i = 1, \dots, n_f$$

$$\text{et } \eta_g(\mathbf{x}_i) = \frac{(y_g(\mathbf{x}_i) - \hat{y}_{g,-i}(\mathbf{x}_i))^2}{\hat{s}_{g,-i}^2(\mathbf{x}_i)} \text{ pour } i = 1, \dots, n_g$$
(5.4)

On dispose ainsi de tous les éléments nécessaires pour la résolution du critère de remplissage défini par l'équation 5.3 sur les niveaux fin et grossier. Ainsi, une stratégie basée sur la maximisation d'une variance ajustée par les erreurs de validation croisée peut être appliquée sur le niveau fin pour sélectionner le prochain point. C'est la méthode suggérée dans [Le Gratiet and Cannamela, 2015]. Ces auteurs proposent ensuite de déterminer les niveaux de fidélité devant être évalués. Pour cela, ils comparent la contribution des différents niveaux de fidélité à la valeur de la variance au nouveau point $\hat{s}_f^2(\mathbf{x}_{new})$ tout en prenant en compte les temps d'évaluation des différents niveaux. Cette approche est judicieuse car l'algorithme adapte la répartition des évaluations sur les niveaux fin et grossier en fonction du niveau de corrélation. Toutefois, pour nos applications, nous pouvons simplifier le choix du niveau de fidélité à évaluer.

Principe de l'algorithme proposé

Dans un contexte de méta-modélisation en ingénierie de réservoir, il est possible de faire des hypothèses permettant de simplifier le choix du niveau de fidélité devant être évalué. Ainsi, en considérant un modèle réservoir grossier construit à partir d'une mise à l'échelle d'un modèle réservoir fin, on peut émettre les hypothèses suivantes.

1. Une simulation d'écoulement sur le modèle grossier est significativement plus rapide qu'une simulation d'écoulement sur le modèle de réservoir fin.
2. Les réponses dynamiques issues des simulations sur les modèles réservoir fin et grossier sont corrélées.

Sous ces hypothèses, nous proposons une stratégie simple pour déterminer le niveau de fidélité devant être évalué, résumée sur la Figure 5.3. Cette approche comprend deux étapes. Dans un premier temps, on applique l'Algorithme 1 pour améliorer le méta-modèle approchant la réponse au niveau grossier. Les nouveaux points ne sont donc simulés que sur ce niveau. Puis, une fois obtenu un méta-modèle prédictif au niveau grossier, de nouveaux points sont ajoutés selon l'Algorithme 1 pour améliorer le méta-modèle multi-fidélité de la réponse au niveau fin. Les nouveaux points sont alors simulés sur les deux niveaux de résolution. Le principe de cette stratégie est donc de chercher à exploiter au maximum

le niveau grossier en supposant que celui-ci est informatif sur le niveau fin. Les évaluations sur le niveau fin n'interviennent que dans un second temps, l'objectif étant de limiter leur nombre autant que possible. L'un des points clés de l'approche est donc le choix du critère d'arrêt de l'algorithme sur le niveau grossier seul, déclenchant les évaluations au niveau fin.

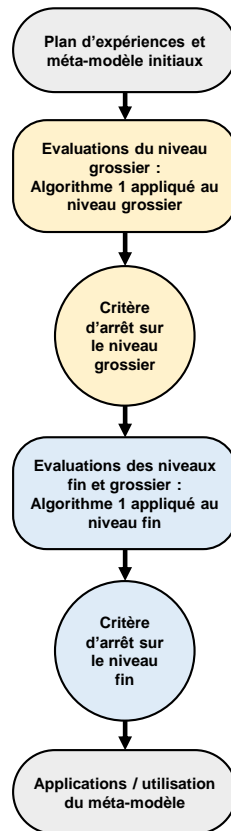


Figure 5.3 : Schéma de la stratégie séquentielle de planification d'expériences dans un cadre multi-fidélité à deux niveaux.

La validité des deux hypothèses est dépendante de la mise à l'échelle et du cas d'étude considéré. Le choix de la mise à l'échelle dépend de l'utilisateur. Cependant, le but d'une mise à l'échelle étant la réduction du temps de simulation, on peut raisonnablement considérer que le rapport des temps d'évaluation pour les deux modèles réservoir soit de l'ordre de la dizaine, voire davantage selon les cas. On peut ainsi s'attendre à ce que la simulation sur le niveau grossier soit dix fois plus rapide que celle sur le niveau fin.

La seconde hypothèse dépend également de la mise à l'échelle. En effet, l'objectif de la mise à l'échelle est de réduire les temps de calcul, tout en respectant autant que possible le comportement dynamique du modèle réservoir initial, *i.e.* le modèle le plus fin. Ainsi, les réponses dynamiques du modèle grossier sont des approximations de celles du modèle fin. D'une manière générale, le comportement d'une réponse dynamique sera souvent similaire sur les deux niveaux. On pourra donc trouver des corrélations à chaque pas de temps pour une réponse dynamique donnée. La qualité de ces corrélations dépend toutefois de la qualité de la mise à l'échelle et du cas d'étude considéré.

Critère d'arrêt sur le niveau grossier

Le critère d'arrêt sur le niveau grossier est une étape clé de l'algorithme. Il permet de déterminer quand passer de la phase d'évaluation du niveau grossier seul à l'évaluation des deux niveaux fin et

grossier. Ce critère est ici basé sur la prédictivité du méta-modèle simple fidélité sur le niveau grossier, estimée par le calcul du coefficient $Q_{cv,g}^2$ de validation croisée (cf. section 2.4.2) :

$$Q_{cv,g}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n_g} (y_g(\mathbf{x}_i) - \hat{y}_{g,-i}(\mathbf{x}_i))^2}{\sum_{i=1}^{n_g} (y_g(\mathbf{x}_i) - \bar{y}_g)^2} \quad (5.5)$$

\bar{y}_g est la réponse moyenne de $y_g(\mathbf{x})$ sur le plan d'expériences \mathbf{D}_g .

Un critère d'arrêt possible consiste alors à définir une valeur cible pour le coefficient $Q_{cv,g}^2$ par exemple $Q_{cv,g}^2 > 0,95$ ou $0,99$. Toutefois, selon la complexité du cas d'étude, un tel critère peut mener à la réalisation d'un très grand nombre d'évaluations sur le niveau grossier. Or, l'information apportée par ce niveau sur la réponse d'intérêt au niveau fin est limitée. Un trop grand nombre d'évaluations sur le niveau grossier peut ainsi être contre-productif.

Une alternative est de considérer un critère hybride combinant une valeur cible sur le $Q_{cv,g}^2$ et une limite sur l'évolution de ce coefficient au cours des itérations. On propose de calculer cette évolution $\gamma(k)$ à l'itération k via l'utilisation de moyennes glissantes :

$$\gamma(k) = \left[\sum_{i=k-p+1}^k Q_{cv,g}^2(i) - \sum_{i=k-2p+1}^{k-p} Q_{cv,g}^2(i) \right] \quad (5.6)$$

avec $Q_{cv,g}^2(i)$ le coefficient $Q_{cv,g}^2$ calculé à l'itération i . L'indice p représente la partie entière du rapport entre le temps d'évaluation moyen du niveau fin et le temps d'évaluation moyen du niveau grossier divisé par deux. On note qu'on ne peut pas calculer γ lorsque $k < 2p$. Le calcul de γ permet de caractériser l'apport en termes de prédictivité des dernières évaluations sur le niveau grossier. Définir une valeur seuil pour γ est équivalent à définir une limite sous laquelle on considère que l'amélioration de la prédictivité du méta-modèle au niveau grossier (via le $Q_{cv,g}^2$) est négligeable par rapport au nombre d'évaluations sur le niveau grossier qu'elle nécessite. Un critère hybride peut ainsi être défini via l'instauration de valeurs seuils à la fois pour le coefficient $Q_{cv,g}^2$ et pour son évolution γ .

5.3.2 Description de l'algorithme proposé

Les différentes étapes de l'Algorithme 2 sont détaillées ci-dessous.

Etape 1, on définit un plan d'expériences initial de petite taille en utilisant les LHS (section 2.2.1). La taille du plan d'expériences peut être prise égale à $d + 1$, avec d la dimension de l'espace des paramètres. On réalise des simulations d'écoulement pour chacun des points du plan d'expériences, sur les niveaux de fidélité fin et grossier, puis on collecte les observations de la réponse d'intérêt.

Etape 2, il s'agit du processus de sélection d'un point additionnel pour le niveau grossier uniquement. Cette étape peut être vue comme une application de l'Algorithme 1 au niveau grossier. C'est un processus itératif qui est répété jusqu'à ce que le critère d'arrêt sur le niveau grossier soit atteint.

Etape 2a, à partir du plan d'expériences et des observations associées de la réponse d'intérêt sur le niveau grossier, on construit un méta-modèle de la réponse d'intérêt au niveau grossier en utilisant le krigeage (section 2.2.2).

Etape 2b, pour chacun des points du plan d'expériences défini sur le niveau grossier, on calcule l'erreur de validation croisée normalisée au niveau grossier (Equation 5.4). On considère ensuite les cellules de Voronoi associées aux points du plan d'expériences défini sur le niveau grossier, et on sélectionne

Algorithme 2 : Stratégie de planification séquentielle pour améliorer la prédictivité d'un modèle de co-krigeage multi-fidélité - Ajout d'un unique point par itération

On note $(V_i^f)_{i=1,\dots,n_f}$ et $(V_i^g)_{i=1,\dots,n_g}$ les cellules de Voronoi associées aux plans d'expériences \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g , respectivement.

- 1 Définition et évaluation du plan d'expériences initial constitué de \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g .
 - 2 Sélection d'un point d'expérience additionnel \mathbf{x}_{new} et évaluation de ce point sur le niveau grossier.
 - (a) Construction d'un modèle de krigeage à partir des observations de \mathbf{D}_g .
 - (b) Calcul de $\mathbf{x}_{bad} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbf{D}_g} \{\eta_g(\mathbf{x})\}$. Soit V_{bad}^g la cellule de Voronoi associée à \mathbf{x}_{bad} .
 - (c) Echantillonnage de N points dans V_{bad}^g . Soit S l'ensemble de ces points.
 - (d) Sélection de $\mathbf{x}_{new} = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} \{s_g^2(\mathbf{x})\}$.
 - (e) Evaluation sur le niveau grossier du point \mathbf{x}_{new} et mise à jour du plan d'expériences avec $\mathbf{D}_g = \mathbf{D}_g \cup \mathbf{x}_{new}$.
 - 3 Répétition de l'étape 2 jusqu'à ce que le critère d'arrêt sur le niveau grossier soit atteint.
 - 4 Sélection d'un point d'expérience additionnel \mathbf{x}_{new} et évaluation de ce point sur les deux niveaux de fidélité.
 - (a) Construction d'un modèle de co-krigeage multi-fidélité à partir des observations de \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g .
 - (b) Calcul de $\mathbf{x}_{bad} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbf{D}_f} \{\eta_f(\mathbf{x})\}$. Soit V_{bad}^f la cellule de Voronoi associée à \mathbf{x}_{bad} .
 - (c) Echantillonnage de N points dans V_{bad}^f . Soit S l'ensemble de ces points.
 - (d) Sélection de $\mathbf{x}_{new} = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} \{s_f^2(\mathbf{x})\}$.
 - (e) Evaluation sur les deux niveaux de fidélité du point \mathbf{x}_{new} et mise à jour du plan d'expériences avec $\mathbf{D}_f = \mathbf{D}_f \cup \mathbf{x}_{new}$ et $\mathbf{D}_g = \mathbf{D}_g \cup \mathbf{x}_{new}$.
 - 5 Répétition de l'étape 4 jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint.
-

tionne la cellule de Voronoi V_{bad}^g correspondant au point présentant la plus forte erreur de validation croisée sur le niveau grossier.

Etape 2c, on échantillonne un nombre important N de points dans la cellule de Voronoi V_{bad}^g . Les méthodes relatives à cette étape sont les mêmes que celles décrites dans le cas simple fidélité (section 5.2.2, étape 2c).

Etape 2d, on calcule la variance de co-krigeage multi-fidélité sur le niveau grossier pour l'ensemble des points échantillonnés. On sélectionne le point pour lequel cette variance est maximale.

Etape 2e, le point sélectionné est ajouté au plan d'expériences défini pour le niveau grossier. On réalise ensuite la simulation d'écoulement au niveau grossier pour ce nouveau point, puis on collecte l'observation de la réponse d'intérêt.

Etape 3, le critère d'arrêt sur le niveau grossier peut être défini par deux conditions (cf. section 5.3.1) : l'une sur la valeur de $Q_{cv,g}^2$ (Equation 5.5) et l'autre sur la valeur de γ (Equation 5.6). Typiquement, cela peut être $Q_{cv,g}^2 > 0,9$ qui indique une prédictivité correcte du méta-modèle. On peut ensuite prendre $\gamma > 0,005$: l'évolution de $Q_{cv,g}^2$ doit être supérieure à 0,005 pour un nombre d'évaluations du niveau grossier équivalent en temps de simulation à une évaluation sur le niveau fin. Afin de s'assurer de la fiabilité du critère, on peut attendre que l'une de ces deux conditions soit vérifiée sur un ensemble d'itérations consécutives avant de considérer le critère comme atteint.

Etape 4, il s'agit du processus de sélection d'un point additionnel pour les niveaux fin et grossier. Cette étape peut être vue comme une application de l'Algorithme 1 au niveau fin. C'est un processus itératif qui est répété jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint.

Etape 4a, à partir du plan d'expériences et des observations associées de la réponse d'intérêt sur les deux niveaux, on construit un méta-modèle de la réponse d'intérêt en utilisant le co-krigeage multi-fidélité (section 2.3.2).

Etape 4b, pour chacun des points du plan d'expériences défini sur le niveau fin, on calcule l'erreur de validation croisée normalisée au niveau fin. On considère ensuite les cellules de Voronoi associées aux points du plan d'expériences défini sur le niveau fin, puis on sélectionne la cellule de Voronoi V_{bad}^f correspondant au point présentant la plus forte erreur de validation croisée sur le niveau fin.

Etape 4c, on échantillonne un nombre important N de points dans la cellule de Voronoi V_{bad}^f . Les méthodes relatives à cette étape sont les mêmes que celles décrites dans le cas simple fidélité (section 5.2.2, étape 2c).

Etape 4d, on calcule la variance du co-krigeage multi-fidélité sur le niveau fin pour l'ensemble des points échantillonnés. On sélectionne le point pour lequel cette variance est maximale.

Etape 4e, le point sélectionné est ajouté aux plans d'expériences \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g . On réalise ensuite la simulation d'écoulement en ce nouveau point sur les deux niveaux de fidélité, puis on collecte les observations associées de la réponse d'intérêt.

Etape 5, le critère d'arrêt peut être une valeur cible sur la prédictivité du méta-modèle. Celle-ci peut être évaluée via le calcul du coefficient Q^2 sur une base de test (si disponible) ou par validation croisée sur le niveau fin. Le critère d'arrêt peut également être un budget en temps de simulation.

On remarque, pour l'étape 2a, qu'au lieu de construire un modèle de krigeage sur le niveau grossier, il est également possible de construire un méta-modèle de co-krigeage multi-fidélité à partir des observations de \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g . En effet, le calcul du modèle de co-krigeage multi-fidélité inclut le calcul des estimateurs de krigeage sur le niveau grossier. Cette option allonge les temps de calcul puisqu'elle implique la construction d'un modèle de krigeage supplémentaire. Toutefois, elle présente l'avantage de fournir directement un estimateur sur le niveau fin et permet ainsi de suivre l'évolution de la prédictivité du méta-modèle lorsque l'on ajoute des points sur le niveau grossier. Nous suivrons cette seconde approche lors des tests d'applications sur le cas BRUGGE (*cf.* Chapitre 6).

Application à la fonction objectif

Dans le cadre d'une méta-modélisation directe de la fonction objectif (*cf.* section 3.3.1), l'Algorithme 2 peut être directement utilisé en considérant le modèle de co-krigeage multi-fidélité de la fonction objectif ($FO^{dir,f}$) et le modèle de krigeage sur le niveau grossier associé ($FO^{dir,g}$).

Dans le cadre d'une méta-modélisation vectorielle de la fonction objectif (*cf.* section 3.3.2), l'Algorithme 2 peut aussi être directement utilisé. Il faut alors l'appliquer au méta-modèle de la fonction objectif $FO^{vec,f}$, dont l'estimateur et la variance associés sont respectivement donnés par les Équations 3.18 et 3.23 sur le niveau fin, et par les Équations 3.19 et 3.25 sur le niveau grossier. On utilise également les estimations par validation croisée de ce méta-modèle pour les niveaux fin et grossier, décrites dans la section 3.3.3.

5.4 Extension à des évaluations en parallèle

Le temps associé à la construction d'un méta-modèle correspond essentiellement au temps nécessaire aux évaluations des points du plan d'expériences. Ainsi, lorsqu'il est possible de réaliser plusieurs simulations en parallèle (sur un cluster de calcul par exemple), le temps de calcul associé à la construction

d'un méta-modèle prédictif peut être grandement réduit. Afin de profiter d'une telle situation, nous proposons une extension des Algorithmes 1 et 2 permettant la sélection de q points d'expériences à chaque itération.

Nous décrivons tout d'abord le principe de cette extension dans la section 5.4.1, puis nous la déclinons dans les cadres simple et multi-fidélité dans les sections 5.4.2 et 5.4.3, respectivement.

5.4.1 Sélection de q points par itération

Le principe de l'extension que nous proposons consiste à sélectionner q points dans q cellules de Voronoi différentes. Plus précisément, on sélectionne les q cellules de Voronoi associées aux points du plan d'expériences présentant les plus fortes erreurs de validation croisée. Puis, un point est sélectionné séquentiellement dans chacune de ces cellules selon l'Algorithme 1. Le premier point est choisi dans la cellule de Voronoi avec la plus forte erreur, puis le second dans la cellule de Voronoi présentant la deuxième erreur la plus forte, *etc.* Dans ce cas, il est nécessaire de mettre à jour l'estimateur de la variance chaque fois qu'un nouveau point est ajouté afin d'éviter qu'il ne soit sélectionné plusieurs fois au cours d'une même itération. En effet, si deux points doivent être sélectionnés dans deux cellules de Voronoi voisines, il est possible que le point maximisant la variance se trouve sur la frontière commune de ces deux cellules.

L'expression de la variance du krigeage et du co-krigeage multi-fidélité ne dépend pas directement des observations. Par exemple, pour le krigeage, l'expression est la suivante :

$$s^2(\mathbf{x}) = \sigma^2 \left(1 - \mathbf{r}^\top(\mathbf{x})\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}(\mathbf{x})\right) \quad (5.7)$$

avec \mathbf{R} la matrice de corrélation de \mathbf{D} et $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = (R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1), \dots, R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n))^\top$ le vecteur de corrélation. Il est donc possible de mettre à jour la prédiction de la variance $s^2(\mathbf{x})$ en prenant en compte la position du nouveau point x_{new} sélectionné sans ré-estimer les hyper-paramètres $\boldsymbol{\lambda}$ (dans la fonction de corrélation R) ni σ^2 . On la note alors $\tilde{s}^2(\mathbf{x})$:

$$\tilde{s}^2(\mathbf{x}) = \sigma^2 \left[1 - \begin{pmatrix} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n) \\ R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{new}) \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} 1 & \cdots & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_{new}) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \cdots & 1 & R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{new}) \\ R(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}_1) & \cdots & R(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}_n) & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n) \\ R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{new}) \end{pmatrix} \right] \quad (5.8)$$

Cette stratégie, appelée krigeage séquentiel menteur, est suggérée dans la thèse de [Le Gratiet, 2013b] comme méthode de sélection de q points pour une stratégie séquentielle basée sur un modèle de krigeage. Elle a été étendue à un cadre d'optimisation dans [Ginsbourger et al., 2010].

On remarque pour finir que la sélection de q points dans q cellules de Voronoi différentes est cohérente avec une stratégie d'exploration de l'espace. Toutefois, si la valeur de q est élevée, il peut être intéressant de choisir plusieurs points au sein de la même cellule de Voronoi. Cela peut se faire avec l'approche proposée ici.

5.4.2 Algorithme dans un cadre simple fidélité

Algorithme 3 : Stratégie de planification séquentielle pour améliorer la prédictivité d'un modèle de krigeage - Ajout de q points par itération

On note $(V_i)_{i=1,\dots,n}$ les cellules de Voronoi associées au plan d'expériences \mathbf{D} .

- 1 Définition et évaluation du plan d'expériences initial \mathbf{D} .
 - 2 Sélection et évaluation de q points d'expérience additionnels $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q$.
 - (a) Construction du modèle de krigeage à partir des observations $y(\mathbf{D})$. Soit $\mathbf{D}' = \mathbf{D}$.
Pour $i = 1, \dots, q$
 - (b) Calcul de $\mathbf{x}_{bad}^i = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbf{D}'} \{\eta(\mathbf{x})\}$. Soit $V_{bad,i}$ la cellule de Voronoi associée à \mathbf{x}_{bad}^i .
 - (c) Echantillonnage de N points dans $V_{bad,i}$. Soit S l'ensemble de ces points.
 - (d) Sélection de $\mathbf{x}_{new}^i = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} \{\tilde{s}^2(\mathbf{x})\}$. Mise à jour de \mathbf{D}' : $\mathbf{D}' = \mathbf{D}' - \{\mathbf{x}_{bad}^i\}$.
 - (e) Mise à jour de \tilde{s}^2 pour prendre en compte $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^i$.**FinPour**
 - (f) Evaluation des points $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q$ et mise à jour de \mathbf{D} : $\mathbf{D} = \mathbf{D} \cup \{\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q\}$.
 - 3 Répétition de l'étape 2 jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint.
-

On note que dans le cas où $q = 1$, cet algorithme est équivalent à l'Algorithme 1.

Détail de l'Algorithme 3 étape par étape

Etape 1, on définit un plan d'expériences initial de petite taille en utilisant les LHS (section 2.2.1). La taille du plan d'expériences peut être prise égale à $d + 1$, avec d la dimension de l'espace des paramètres. On réalise des simulations d'écoulement pour chacun des points du plan d'expériences, puis on collecte les observations de la réponse d'intérêt en ces points.

Etape 2, on sélectionne q points additionnels pour le plan d'expériences. On répète cette étape jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint.

Etape 2a, à partir du plan d'expériences et des observations associées de la réponse d'intérêt, on construit un méta-modèle de la réponse d'intérêt en utilisant le krigeage (section 2.2.2). On définit également l'ensemble D' . Cet ensemble contient initialement l'ensemble des points du plan D , auquel on enlève par la suite les points correspondant aux cellules de Voronoi qui ont déjà été échantillonnées afin que les nouveaux points ne soient pas sélectionnés dans ces cellules.

Etape 2b, on rentre dans une boucle qui va permettre la sélection séquentielle de q points d'expériences. On calcule alors une première fois les erreurs de validation croisée normalisées (Equation 5.1). Puis, on sélectionne les q cellules de Voronoi associées aux points présentant les plus fortes erreurs de validation croisée.

Etape 2c, on échantillonne un nombre important N de points dans les q cellules de Voronoi où l'erreur de validation croisée est la plus importante. On remarque que cette étape peut se faire simultanément pour les q cellules de Voronoi. On peut ainsi économiser du temps de calcul en la réalisant en parallèle.

Etape 2d, on calcule la variance du krigeage pour l'ensemble des points échantillonnés. On sélectionne le point pour lequel la variance est maximale.

Etape 2e, on met à jour l'estimateur de la variance chaque fois qu'un point est sélectionné (cf. Equation 5.8), et on retourne à l'étape 2b jusqu'à ce que q points aient été sélectionnés.

Étape 2f, on ajoute les nouveaux points au plan d'expériences, on réalise les simulations d'écoulement pour chacun d'entre eux et on collecte leurs observations.

Étape 3, le critère d'arrêt peut être une valeur cible sur la prédictivité du méta-modèle. Celle-ci peut être évaluée via le calcul du coefficient Q^2 sur une base de test (si disponible) ou via une validation croisée (cf. partie 2.4). Le critère d'arrêt peut également être un budget en temps de simulation, qui en pratique serait défini par un nombre maximal de simulations d'écoulement.

5.4.3 Algorithme dans un cadre multi-fidélité

Dans le cas multi-fidélité, l'extension de l'Algorithme 2 pour sélectionner q points par itération se fait de manière identique. Elle consiste à appliquer la procédure de sélection de q points lorsque l'on évalue uniquement le niveau grossier (étape 2), et à l'appliquer à nouveau lorsque l'on évalue les niveaux fin et grossier (étape 4). Il faut seulement mettre à jour la variance de co-krigeage multi-fidélité aux niveaux fin et grossier, notées respectivement \tilde{s}_f^2 et \tilde{s}_g^2 , chaque fois qu'un point d'expérience supplémentaire est sélectionné. Cette mise à jour se calcule de manière similaire à celle du krigeage (Equation 5.8).

Algorithme 4 : Stratégie de planification séquentielle pour améliorer la prédictivité d'un modèle de co-krigeage multi-fidélité - Ajout de q points par itération

On note $(V_i^f)_{i=1,\dots,n_f}$ et $(V_i^g)_{i=1,\dots,n_g}$ les cellules de Voronoi associées aux plans d'expériences \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g , respectivement.

- 1 Définition et évaluation du plan d'expériences initial constitué de \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g .
 - 2 Sélection de q points d'expérience additionnels $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q$ et évaluation sur le niveau grossier.
 - (a) Construction d'un modèle de krigeage à partir des observations de \mathbf{D}_g . Soit $\mathbf{D}'_g = \mathbf{D}_g$.
 - Pour** $i = 1, \dots, q$
 - (b) Calcul de $\mathbf{x}_{bad}^i = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbf{D}'_g} \{\eta_g(\mathbf{x})\}$. Soit $V_{bad,i}^g$ la cellule de Voronoi associée à \mathbf{x}_{bad}^i .
 - (c) Echantillonnage de N points dans $V_{bad,i}^g$. Soit S l'ensemble de ces points.
 - (d) Sélection de $\mathbf{x}_{new}^i = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} \{\tilde{s}_g^2(\mathbf{x})\}$. Mise à jour de \mathbf{D}'_g : $\mathbf{D}'_g = \mathbf{D}'_g - \{\mathbf{x}_{bad}^i\}$.
 - (e) Mise à jour de \tilde{s}_g^2 pour prendre en compte $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^i$.
 - FinPour**
 - (f) Evaluation des points $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q$ et mise à jour de \mathbf{D}_g : $\mathbf{D}_g = \mathbf{D}_g \cup \{\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q\}$.
 - 3 Répétition de l'étape 2 jusqu'à ce que le critère d'arrêt sur le niveau grossier soit atteint.
 - 4 Sélection de q points d'expérience additionnels $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q$ et évaluation de ces points sur les deux niveaux de fidélité.
 - (a) Construction du modèle de co-krigeage multi-fidélité à partir des observations de \mathbf{D}_f et \mathbf{D}_g . Soit $\mathbf{D}'_f = \mathbf{D}_f$.
 - Pour** $i = 1, \dots, q$
 - (b) Calcul de $\mathbf{x}_{bad}^i = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbf{D}'_f} \{\eta_f(\mathbf{x})\}$. Soit $V_{bad,i}^f$ la cellule de Voronoi associée à \mathbf{x}_{bad}^i .
 - (c) Echantillonnage de N points dans $V_{bad,i}^f$. Soit S l'ensemble de ces points.
 - (d) Sélection de $\mathbf{x}_{new}^i = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} \{\tilde{s}_f^2(\mathbf{x})\}$. Mise à jour de \mathbf{D}'_f : $\mathbf{D}'_f = \mathbf{D}'_f - \{\mathbf{x}_{bad}^i\}$.
 - (e) Mise à jour de \tilde{s}_f^2 pour prendre en compte $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^i$.
 - FinPour**
 - (f) Evaluation des points $\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q$ et mise à jour de \mathbf{D}_g et \mathbf{D}_f : $\mathbf{D}_g = \mathbf{D}_g \cup \{\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q\}$ et $\mathbf{D}_f = \mathbf{D}_f \cup \{\mathbf{x}_{new}^1, \dots, \mathbf{x}_{new}^q\}$.
 - 5 Répétition de l'étape 4 jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint.
-

CHAPITRE 6

Etude de cas : BRUGGE

Le cas d'étude BRUGGE est inspiré du cas de référence Brugge, un autre cas « benchmark » en ingénierie de réservoir [Peters et al., 2010]. Les études que nous avons menées sur ce cas ont pour but de tester les différentes méthodes de planification séquentielle d'expériences introduites dans le Chapitre 5. Ces méthodes sont appliquées pour la création de méta-modèles prédictifs de la fonction objectif, en considérant une approche directe ou vectorielle, dans des cadres simple et multi-fidélité (Chapitres 2 et 3).

Ce chapitre est divisé en trois parties. Comme pour le cas PUNQ, la construction du cas BRUGGE multi-fidélité est basée sur la création d'une version raffinée du modèle de référence Brugge. Les détails de cette construction, ainsi que la description du cas d'étude BRUGGE, sont réunis au sein de la partie 6.1. Ensuite, dans la partie 6.2, nous présentons et discutons les résultats obtenus sur ce cas. Il s'agit essentiellement de comparaisons sur la prédictivité des méta-modèles en fonction des différentes approches considérées. Une application à l'analyse de sensibilité est finalement proposée dans la partie 6.3.

6.1 Description du cas BRUGGE multi-fidélité

Nous appelons BRUGGE ou BRUGGE multi-fidélité ce cas d'étude. Il est inspiré du cas Brugge, un cas benchmark en ingénierie de réservoir introduit dans le cadre d'un workshop (*Applied Technology Workshop*) de la SPE (*the Society of Petroleum Engineers*) qui s'est déroulé à Bruges en juin 2008. Nous décrivons rapidement le cas Brugge initialement proposé dans la section 6.1.1. La construction de notre cas BRUGGE à partir du cas de référence est ensuite détaillée dans la section 6.1.2. Dans la section 6.1.3, nous précisons la paramétrisation ainsi que la définition de la fonction objectif utilisées. Enfin, une comparaison des modèles BRUGGE fin et grossier est proposée en section 6.1.4 via la représentation des réponses dynamiques simulées et de la fonction objectif pour les deux niveaux.

6.1.1 Le cas Brugge original

Le cas Brugge est issu d'un projet mis en place lors du workshop SPE à Bruges en 2008. Il s'agit d'un modèle réservoir pour lequel on dispose d'un ensemble de 104 réalisations de propriétés pétrophysiques formant un ensemble de modèles respectant les données de puits et géologiques. Ce cas de référence a été construit dans le but de comparer des méthodes pour l'optimisation de l'injection d'eau, ainsi que pour le calage d'historique. On dispose de l'historique de production sur 10 ans. L'optimisation de la production se fait sur les 20 années suivantes. Les résultats de cette étude ont été publiés par [Peters et al., 2010]. On trouve également dans cet article une description complète du cas de référence. Des

données supplémentaires ont été fournies par la suite dans [Peters et al., 2013].

Le champ Brugge est un champ pétrolifère synthétique représentant un champ typique de la Mer du Nord. Sa structure prend la forme d'un demi dôme allongé avec la présence d'une faille interne. Elle est visible sur la Figure 6.1. Ses dimensions sont d'environ $10 \times 3 \text{ km}^2$. La grille du modèle est composée de 9 couches réparties au sein de 4 formations ou zones de réservoir différentes: Schelde, Maas, Waal et Schie. Chacune des couches est divisée en 139×48 mailles dont les dimensions moyennes sont $65 \times 65 \times 5 \text{ m}^3$. La grille comprend donc environ 60000 mailles.

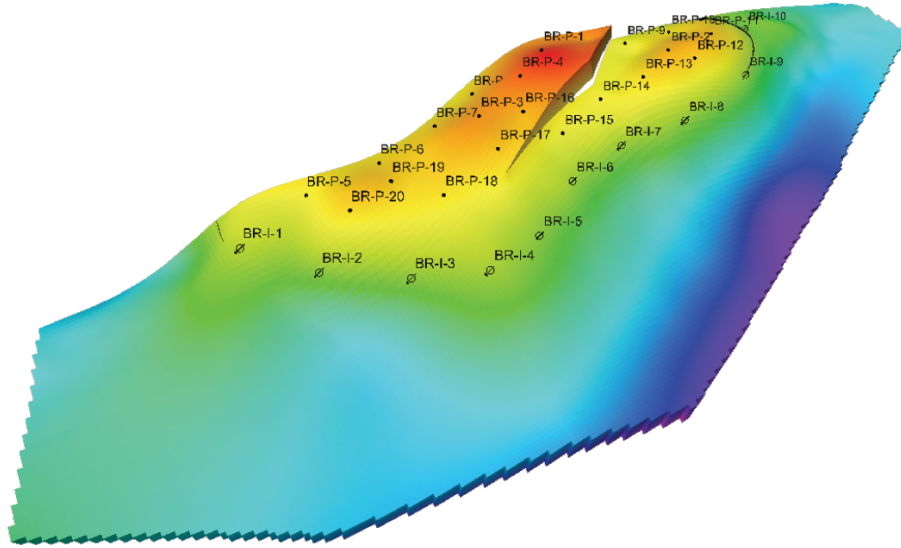


Figure 6.1 : Structure du champ Brugge et position des puits (figure adaptée de [Peters et al., 2010]).

Les caractéristiques principales des différentes formations composant le réservoir Brugge sont données par le Tableau 6.1. Les zones les plus perméables (Waal et Schelde) alternent avec des formations moins perméables (Maas et Schie). Les deux couches supérieures du réservoir correspondent à Schelde, les trois suivantes à Maas, les trois autres à Waal. Schie se résume à la neuvième couche.

Formation	Épaisseur moyenne (m)	Porosité moyenne (%)	Perméabilité moyenne (mD)	Ratio net/brut moyen (%)	Environnement de dépôt
Schelde	10	20,7	1105	60	Fluvial
Maas	20	19,0	90	88	Shoreface inférieur
Waal	26	24,1	814	97	Shoreface supérieur
Schie	5	19,4	36	77	Plateau sableux

Tableau 6.1 : Caractéristiques principales des formations de Brugge et leur environnement de dépôt. Les valeurs de porosité et perméabilité correspondent à celles des sables. La proportion de sable par formation est indiquée par le ratio net/brut.

Brugge est un cas diphasique (eau/huile) car la pression au sein du réservoir est supérieure à la pression du point de bulle pour l'huile. On dénombre 30 puits dont 20 producteurs et 10 injecteurs. Les puits producteurs (notés BR-P-* sur la Figure 6.1) sont tous situés dans la partie centrale du dôme contenant l'huile, tandis que les injecteurs (notés BR-I-* sur la Figure 6.1) sont répartis autour du contact eau/huile (en vert clair sur la Figure 6.1). Ce dernier se situe initialement à 1678 m de profondeur.

Le planning de production associé au cas Brugge s'étend sur 10 années. Les puits producteurs ont un objectif de production fixé à 2000 barils par jour ($318 \text{ m}^3/\text{jour}$) et ne doivent pas passer sous la pression limite de 725 psi (50 bar). Les puits producteurs sont successivement mis en production à raison de un par mois. Tous les puits producteurs sont actifs à partir du 20ième mois. Le débit d'injection des puits injecteurs est de 4000 barils par jour ($636 \text{ m}^3/\text{jour}$) et ne doit pas dépasser une pression limite de 2611 psi (180 bar). Ces puits sont également mis en place successivement après les puits producteurs. Tous les puits injecteurs sont donc actifs à partir du 30ième mois.

6.1.2 Construction d'un cas BRUGGE multi-fidélité

Le cas Brugge a été choisi afin de tester les algorithmes de planification d'expériences proposés dans le Chapitre 5. C'est un cas d'étude intéressant pour sa complexité, en termes de nombre de puits et de mailles. Le nombre de mailles de Brugge est toujours faible comparé aux nombres considérés pour un cas réel. Toutefois, cela fait de Brugge un cas plus réaliste que le cas PUNQ. De plus, c'est un cas de référence en ingénierie de réservoir qui a fait l'objet de nombreuses publications [Mohamed et al., 2010], [Chen and Oliver, 2010], [Asadollahi et al., 2014], [Foroud et al., 2016], *etc.* Afin de pouvoir l'étudier dans le cadre d'une méta-modélisation multi-fidélité, nous avons construit un cas multi-fidélité à partir des données du cas Brugge. On note que son processus de construction est similaire en de nombreux points à celui mis en place pour obtenir le cas PUNQ à partir du cas de référence PUNQ-S3 (section 4.1.2).

Définition des niveaux de fidélité et temps moyens de simulation

Comme pour le cas PUNQ, nous considérons deux niveaux de fidélité correspondant à deux niveaux de résolution pour la grille du modèle.

1. Le « modèle grossier » est défini sur une grille identique à celle du cas Brugge original. Elle contient $139 \times 48 \times 9$ mailles dont 44550 sont actives. On appelle ce modèle BRUGGE grossier.
2. Le « modèle fin » possède une grille obtenue après un raffinement de la grille de BRUGGE grossier. Chaque maille sur le niveau grossier est divisée par $2 \times 2 \times 3$ selon les axes X, Y et Z. La grille fine contient donc $278 \times 96 \times 27$ mailles dont 534600 sont actives. On note ce modèle BRUGGE fin.

Bien que le cas Brugge de référence fournisse les données de production pour 10 ans, nous limitons la simulation aux 8 premières années afin de limiter les temps de calcul. Elle nécessite en moyenne 1 heure pour BRUGGE fin et 3 min pour BRUGGE grossier. Ainsi, la durée d'une simulation sur le niveau fin est équivalente à celle de 20,5 simulations sur le niveau grossier.

On remarque que le temps de simulation de BRUGGE grossier est semblable à celui de PUNQ fin (~ 3 min) alors que le nombre de mailles actives de BRUGGE grossier est environ 3 fois plus important (44550 au lieu de 15849 mailles). En effet, la période de simulation est deux fois plus courte pour BRUGGE que pour PUNQ et la durée des pas de temps considérés est à peu près équivalente (environ un par mois). De plus, pour des cas équivalents, il est plus rapide de simuler les écoulements en diphasique qu'en triphasique.

Calcul des grilles et position des puits

Nous utilisons le logiciel PumaFlow [PumaFlow, 2016] pour réaliser les simulations d'écoulement. BRUGGE grossier ne diffère du modèle d'origine Brugge que par la distribution des propriétés pétrophysiques (porosité, perméabilité et du ratio net/brut). Comme pour PUNQ, le modèle BRUGGE fin

a ensuite été construit à partir des fichiers de simulation de BRUGGE grossier (*cf.* section 4.1.2). Une différence avec PUNQ est que le maillage de BRUGGE n'est pas régulier. La grille de BRUGGE fin a ainsi été calculée par un raffinement de celle de BRUGGE grossier via le logiciel GOCAD [SKUA-GOCAD, 2016], en réalisant une interpolation linéaire du maillage grossier.

Le calcul des coordonnées des puits sur le niveau fin a également été réalisé grâce à GOCAD. Pour cela, la position des différents puits a été ajoutée sur le modèle à partir des logs des puits disponibles. Il suffit ensuite de repérer sur la grille fine les mailles traversées par les puits. Les logs apportent aussi une information sur la complétion des puits, et on peut en déduire les couches auxquelles les puits sont connectés sur les grilles fine et grossière. De manière générale, tous les puits injecteurs injectent dans les différentes formations. La majorité des puits producteurs produit dans les trois formations supérieures (Schelde, Maas et Waal). Toutefois, certains puits (n°5, 10, 14 et 15) ne produisent que dans Schelde et Maas, et le producteur n°9 n'est ouvert que sur Schelde.

Calcul des propriétés pétrophysiques

Par souci de cohérence entre BRUGGE fin et grossier, nous avons généré les propriétés pétrophysiques (porosité et perméabilité) au niveau de BRUGGE fin, puis calculé ces propriétés sur BRUGGE grossier via une mise à l'échelle. On rappelle que le cas Brugge de référence est fourni avec 104 réalisations de ces propriétés, générées suivant différentes méthodes (modélisation continue, par faciès, objet, *etc.*). Nous avons suivi l'une de ces méthodologies pour générer les propriétés pétrophysiques de BRUGGE fin. On remarque que la méthodologie suivie est similaire à celle utilisée pour générer les propriétés pétrophysiques du cas PUNQ.

La porosité a été générée indépendamment pour chacune des formations à l'aide de la méthode FFT-MA (*FFT Moving Average*) [Le Ravalec et al., 2000]. Les réalisations ont ensuite été conditionnées en réalisant un double krigeage suivant la pratique usuelle décrite dans [Chilès and Delfiner, 1999] pour respecter les données aux puits. On note que les valeurs utilisées pour le conditionnement de la porosité sont déduites des logs fournis avec le cas de référence. Les réalisations de perméabilité ont ensuite été générées par cosimulation en considérant la porosité comme donnée secondaire. On a utilisé pour cela la méthode SGSim (*Sequential Gaussian Simulation*) [Journel and Deutsch, 1998]. Le coefficient de corrélation entre la porosité et le log de la perméabilité horizontale K_h est de 0,75. La perméabilité verticale K_v est prise égale à : $K_v = 0,1K_h$. Pour finir, le ratio net/brut définissant la proportion de roche réservoir (*i.e.* poreuse) par maille est pris constant par formation. Les valeurs caractéristiques utilisées pour générer ces propriétés pétrophysiques sont spécifiées dans le Tableau 6.2. Elles sont inspirées de [Peters et al., 2010] ainsi que de l'étude de l'une des réalisations du cas Brugge, générée suivant une méthodologie identique.

Formation	Schelde	Maas	Waal	Schie
Couche	1-2	3-5	6-8	9
ϕ moyen	0,16	0,15	0,23	0,14
ϕ écart-type	0,063	0,032	0,017	0,058
$\log_{10}(K_h)$ moyen	2,46	1,8	2,91	1
$\log_{10}(K_h)$ écart-type	0,788	0,304	0,242	0,562
Ratio net/brut	0,7	0,9	1	0,8

Tableau 6.2 : Caractéristiques des propriétés pétrophysiques par zone du réservoir avec ϕ la porosité et K_h la perméabilité horizontale.