PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Modélisation numérique d'écoulements turbulents à l'aide de décompositions matricielles
Auteur: Author:	Daniel Lévesque
Date:	2023
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Lévesque, D. (2023). Modélisation numérique d'écoulements turbulents à l'aide de décompositions matricielles [Ph.D. thesis, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/55108/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/55108/
Directeurs de recherche: Advisors:	Steven Dufour
Programme: Program:	Mathématiques

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Modélisation numérique d'écoulements turbulents à l'aide de décompositions matricielles

DANIEL LÉVESQUE
Département de mathématiques et de génie industriel

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
Mathématiques

Août 2023

© Daniel Lévesque, 2023.

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Cette thèse intitulée :

Modélisation numérique d'écoulements turbulents à l'aide de décompositions matricielles

présentée par **Daniel LÉVESQUE**
en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

Serge PRUDHOMME, président
Steven DUFOUR, membre et directeur de recherche
Jérôme VÉTEL, membre
Marius PARASCHIVOIU, membre externe

DÉDICACE

À ma famille, mes amis et ma chérie, qui ont persisté en choeur :
« Carry on my wayward son, there'll be peace when you are done… »

À Guy Vaudrin, pour sa vision extraordinaire et sa grande générosité.
Il aura été le dernier à m'entendre dire :
« Suivre les cours de physique et de chimie, mais pour quoi faire ?! »

À Joseph Smagorinsky, je tire mon (filtre) chapeau en hommage
à celui qui a créé cette merveilleuse méthode il y a 60 ans,
et qui permet toujours de voir grand.

Une pensée à George Box, pour avoir écrit :
« All models are wrong, but some models are useful. »

Et pour terminer, comme dirait la grande petite philosophe Charlotte :
« Et voilà ! »

REMERCIEMENTS

Cette thèse, ainsi que mes études aux cycles supérieurs à Polytechnique, n'auraient certainement pas été possibles sans l'accueil chaleureux du professeur Steven Dufour. Il a su me trouver une place dans son équipe et a tout fait en son pouvoir pour supporter et assurer ma réussite. Ce travail vient conclure un long retour aux études, qui a repris à partir du niveau secondaire il y a plus de 16 ans, et le professeur Dufour a su m'accompagner jusqu'à la ligne d'arrivée. Je lui serai toujours reconnaissant pour ses précieux apprentissages, la grande liberté dont j'ai pu bénéficier, la confiance qu'il m'a accordée et la patience sans limite dont il a fait preuve. Merci pour tout.

Le maître d'enseignement Donatien N'Dri a aussi joué un rôle profond dans mon passage aux études supérieures. La sagesse de ses précieux conseils en matière d'enseignement n'est surpassée que par la bienveillance de son amitié. Même si j'ai réussi à lui soutirer d'innombrables conseils d'analyse numérique au cours des dernières années, je reste convaincu qu'il m'en a davantage appris sur la compassion. Du fond du cœur, merci.

Je remercie mes collègues, dont la compagnie me manque déjà, et qui ont su me supporter à travers ce parcours laborieux. Wissem, Yann-Meing, Antonin, Damien, Alexis, Kenan, Maxime et Michel, à bientôt ! Je remercie également Olivier Rouch pour sa grande générosité et pour m'avoir appris pourquoi les méthodes numériques sont si importantes en ingénierie.

Il serait impardonnable de ne pas souligner l'influence du professeur Jérôme Vétel, et de son excellent cours sur la turbulence. Je compte sur les doigts de la main le nombre de professeurs que j'ai autant apprécié en classe (et hors cours aussi). Merci pour les généreux conseils en plus d'accepter une fois de plus de faire partie du jury.

Je remercie chaleureusement le professeur Serge Prudhomme d'avoir accepté d'évaluer ce travail. Il saura poser les questions qui me feront le plus réfléchir. Je remercie aussi sincèrement le professeur Marius Paraschivoiu d'avoir accepté de faire partie du jury et d'évaluer ce travail ainsi que le professeur Bruno Blais d'avoir accepté le rôle de représentant de la directrice des études supérieures. Vos expertises me seront grandement bénéfiques.

On ne peut pas passer autant de temps au département de MAGI sans ressentir une profonde appréciation pour les gens formidables qui y travaillent. Merci à vous toutes et à vous tous. Je tiens à remercier en particulier Marie-Carline Lajeunesse, merci pour ton soutien.

Je dois énormément à ma famille et à mes proches, qui ont tous été indéfectibles depuis le début de mon parcours. Vous êtes irremplaçables, merci.

Enfin, à ma douce MC, qui a véritablement compris la signification du terme « rubber duck ». Merci pour ton support inconditionnel.

RÉSUMÉ

Les modèles de viscosité turbulente basés sur le tenseur de gradient de vitesse sont nombreux. Ils sont difficiles à sélectionner pour une application particulière, ils peuvent introduire des calculs qui sont numériquement instables et ils mesurent des fluctuations du champ de vitesse qui sont restreints au voisinage du point où ils sont évalués.

L'objectif de cette thèse est de produire un modèle de viscosité turbulente qui est basé sur les décompositions matricielles. On explore la décomposition en valeurs singulières (SVD) et la factorisation matricielle non négative (NMF) à l'aide de quelques exemples simples et les données d'un jet turbulent. Ces deux décompositions matricielles arrivent à identifier les fluctuations du champ de vitesse. La SVD permet de le faire de manière optimale au sens des moindres carrés, ce qui permet d'obtenir une estimation précise de l'énergie représentée par l'approximation des fluctuations du champ de vitesse qui est utilisée. La NMF permet d'isoler des caractéristiques qui ont un sens physique, mais on doit définir ce sens afin de pouvoir l'exploiter. Plus de travail est donc requis pour rendre la NMF utile dans ce contexte, d'autant plus qu'elle ne partage pas les propriétés recherchées, que l'on retrouve avec la SVD (existence, unicité, optimalité, orthogonalité). Néanmoins, la NMF semble être une bonne candidate pour de futurs travaux.

On choisit donc de poursuivre l'étude à l'aide de la SVD. On réussit à développer deux relations importantes qui peuvent servir à indiquer le niveau de turbulence présent dans l'écoulement. Pour y arriver, on utilise la variation de l'énergie des fluctuations du champ de vitesse à travers toutes les échelles présentes dans les données de l'écoulement. La première relation est l'évolution des valeurs singulières lors des mises à jour de la SVD pendant l'évolution en temps de l'écoulement. Ceci nous donne accès à une séquence d'ensembles de valeurs singulières et nous permet d'observer le transfert de l'énergie à travers les fluctuations du champ de vitesse à toutes les échelles présentes dans les données de l'écoulement. La seconde relation permet d'estimer la dérivée des valeurs singulières de chaque SVD au moment où elles sont calculées. Cette estimation permet de prédire la fluctuation de l'énergie des fluctuations du champ de vitesse qui sont exprimées par la SVD à cet instant.

On constate que ces deux relations semblent un peu en accord avec les plus grandes échelles de l'écoulement, mais elles ne sont pas cohérentes pour toutes les échelles des fluctuations, en particulier pour les petites échelles. On explique cette anomalie par la nature des quantités exprimées par chaque relation. La variation des valeurs singulières, lors de la mise à jour de la SVD, ne peut pas être interprétée comme étant la variation de l'énergie d'une fluctuation précise du champ de vitesse puisque l'expression de cette fluctuation change lors de la mise à jour de la SVD. Néanmoins, cette

interprétation reste approximativement correcte pour les plus grandes échelles et peut être utilisée pour estimer l'énergie qui transite des grandes échelles vers les petites échelles de l'écoulement. L'estimation de la dérivée des valeurs singulières prédit l'énergie des fluctuations exprimées par la SVD à cet instant comme si elles conservaient leur forme, comme c'est approximativement le cas pour les plus grandes échelles sur les courtes périodes de temps considérées.

On termine la thèse en calculant une viscosité turbulente à l'aide d'une approximation des fluctuations turbulentes du champ de vitesse. Un algorithme est donné pour montrer comment ce modèle peut être mis en œuvre. Une série de paramètres initiaux est proposée.

ABSTRACT

The subgrid scale models used with LES, that are based on the velocity gradient tensor, are large in number, difficult to chose properly for a given application, can introduce dynamical procedures that are numerically unstable and can only measure velocity fluctuations in a small neighborhood of a given point.

The goal of this study is to create a subgrid scale model that is based on matrix factorization techniques. The SVD and the NMF are studied with the help of simple examples and data sets of a turbulent jet. These two matrix factorizations are capable of identifying velocity field fluctuations. The SVD can optimally achieve this the sens of least squares, that allows for an accurate estimate of the energy content of the approximated velocity field fluctuations. The NMF makes it possible to express data characteristics in a meaningful manner, but the meaning must be defined first. More work needs to be done to use the NMF in a meaningful way and it does not share the well behaved properties of the SVD (existence, unicity, optimality, orthogonality). Nevertheless, the NMF is a good candidate for future work.

We therefore continue our study based on the SVD exclusively. We are able to obtain two important estimates of the evolution of turbulence by measuring energy variations of velocity field fluctuations across all the scales contained in the flow data. The first estimate involves the variation of the singular values at each update of the SVD, during the time dependent flow. This generates a sequence of sets of singular values that expresses the energy transfer across all scales of the velocity field data of the flow. The second estimate involves the derivative of the singular values at a given time for each set of singular values. This estimate allows for the prediction of the variation of the energy content of each velocity field fluctuations as they are expressed by the SVD if they were to remain in their form at that given time.

These two estimates kind of agree with each other at best, when the largest scales completely disagree with the smallest scales of the flow. We can explain this disagreement by looking at the nature of each estimate. The variation of the singular values at each SVD update cannot be seen as the variation on the energy content of each flow scale as they are expressed by the SVD, since its update modifies the expression of the flow scales. However, this interpretation is somewhat good for the largest scales of the flow, and can be used to estimate the energy transfer from the large scales to the small scales. The singular value derivative estimate can be used to predict the energy content variation for the velocity fluctuations as they are expressed by the SVD at that moment, on short time intervals, as it is observed for the largest scales of the flow.

We conclude the thesis by calculating a subgrid scale model using the turbulent fluctuations approximation we developed. An algorithm is proposed to show how this subgrid scale model can be implemented, and a series of initial parameters is proposed to help with this task.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iii

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vii

TABLE DES MATIÈRES ix

LISTE DES FIGURES xii

LISTE DES SYMBOLES ET ABRÉVIATIONS xvi

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE 5
2.1 Introduction à la modélisation numérique de la turbulence 5
2.2 Validité et portée des modèles LES 7
2.3 Filtres LES isotropes et anisotropes 8
2.4 Modèles de viscosité turbulente 9
2.5 Gestion de l'erreur pour l'approche LES 10
2.6 Méthodes d'apprentissage automatique appliquées à la modélisation de la turbulence 11
2.7 Approches statistiques 12

CHAPITRE 3 MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES ÉCOULEMENTS TURBULENTS 14
3.1 Modèle LES 14
3.1.1 Filtres isotropes 15
3.1.2 Filtres anisotropes et filtres non homogènes 16
3.1.3 Commutativité du filtre LES et de la dérivée spatiale 17
3.1.4 Équations de Navier-Stokes 18
3.1.5 Équations de Navier-Stokes filtrées 18
3.1.6 Modélisation du tenseur de Reynolds 19
3.1.7 Hypothèse de la diffusion numérique ($\mu_t = 0$) 27
3.1.8 En résumé 27

3.2 Discrétisation des équations 28
3.2.1 Espaces fonctionnels 28
3.2.2 Formes faibles 30
3.2.3 Discrétisations 30

CHAPITRE 4 DÉCOMPOSITIONS NAÏVES D'UNE MATRICE SIMPLE 35
4.1 Application de la SVD 36
4.2 Application de la NMF 39
4.3 Application d'un filtre chapeau 45
4.4 Décompositions en blocs 46
4.5 En résumé 54

CHAPITRE 5 APPLICATION DE LA SVD ET DE LA NMF AUX DONNÉES EXPÉRIMENTALES D'UN JET 55
5.1 SVD des blocs B_1 et B_2 58
5.2 SVD monolithique 59
5.3 SVD et NMF de l'énergie 66
5.4 Choix de la meilleure stratégie et problèmes à venir 67

CHAPITRE 6 DÉCOMPOSITION D'UNE COLLECTION DE DONNÉES SIMPLE . . . 74
6.1 Application des décompositions matricielles 77
6.1.1 SVD 77
6.1.2 NMF 77
6.2 Choix de la meilleure stratégie et propriété d'additivité 77
6.3 En résumé 80

CHAPITRE 7 DÉCOMPOSITION D'UN ENSEMBLE DE DONNÉES DE JET CONFINÉ 83
7.1 Application de la SVD 83
7.2 Application de la NMF 88
7.3 En résumé 92

CHAPITRE 8 APPROXIMATION DES DONNÉES D'UN ÉCOULEMENT TURBULENT 93
8.1 Matrice des états de l'écoulement et fluctuations du champ de vitesse 93
8.2 Analyse de la SVD de la matrice des états 97
8.3 Analyse de la NMF 104

CHAPITRE 9 SIMULATION NUMÉRIQUE D'UN JET TURBULENT CONFINÉ 110
9.1 Simulation numérique d'un jet turbulent 110

9.1.1 Géométrie, conditions aux limites et propriétés du fluide 110
9.1.2 Maillage 111
9.1.3 Résultats 111

CHAPITRE 10 MODÉLISATION DE LA VISCOSITÉ TURBULENTE 118
10.1 Identification des fluctuations turbulentes d'un écoulement 118
10.1.1 Fluctuations exprimées par la SVD 118
10.1.2 Évolution des valeurs singulières dans le temps 127
10.2 Modèle de viscosité turbulente 133
10.3 Visualisation du modèle de viscosité turbulente proposé 134
10.4 Algorithme pour la mise en œuvre du modèle de viscosité turbulente 138
10.4.1 Choix des paramètres initiaux 139

CHAPITRE 11 CONCLUSION 140
11.1 Synthèse des travaux 140
11.1.1 Modélisation numérique d'écoulements turbulents 140
11.1.2 Décompositions matricielles d'un ensemble de données 141
11.1.3 Modélisation numérique d'écoulements turbulents à l'aide de décompositions matricielles 144
11.2 Limitations de la méthodologie proposée 147
11.3 Améliorations futures et pistes de recherche 148

RÉFÉRENCES 149

LISTE DES FIGURES

Figure 4.1 Illustration de la matrice A (cf. équation (4.1)) pour laquelle $a_{ij} = 0$ ou $a_{ij} = 1$. 35
Figure 4.2 Approximations de rang k de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la SVD. 37
Figure 4.3 Matrices de rang 1 de la SVD de A (cf. équation (4.1)). 38
Figure 4.4 Distribution des valeurs singulières σ_i de la matrice A (cf. équation (4.1)). . 40
Figure 4.5 Approximations de rang k de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la NMF. 42
Figure 4.6 NMF de rang 2 de la matrice A (cf. équation (4.1)). 43
Figure 4.7 NMF de rang 3 de la matrice A (cf. équation (4.1)). 43
Figure 4.8 Comparaison de l'approximation de rang 2 de la matrice A obtenue par la SVD et la NMF de la matrice A (cf. équation (4.1)). 44
Figure 4.9 Application du filtre chapeau à la matrice A (cf. équation (4.1)), cas isotropes a), c), e) et anisotropes b), d), f). 46
Figure 4.10 Distribution des valeurs singulères σ_i de la SVD par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)). 48
Figure 4.11 Approximations de rang k par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la SVD. 49
Figure 4.12 Approximations de rang k par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la NMF. 50
Figure 4.13 NMF de rang 2 par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)). 51
Figure 4.14 NMF de rang 3 par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)). 52
Figure 4.15 Comparaison des approximations de rang 2 de la matrice A (cf. équation (4.1)) par blocs obtenue par la SVD et la NMF. 53
Figure 5.1 Schéma de la répartition des points de mesure du jet turbulent confiné. . . . 56
Figure 5.2 Mesures du champ de vitesse du jet confiné. 57
Figure 5.3 Valeurs singulières des différentes SVD (cf. équations (5.1) à (5.3)) et coefficients α_i de la NMF de rang 39 (cf. équation (5.4)). 58
Figure 5.4 Matrices $\sigma_i^\ell \boldsymbol{u}_i^\ell (\boldsymbol{v}_i^\ell)^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($i = 1, 2, 3, 4$). 60
Figure 5.5 Matrices $\sigma_i^\ell \boldsymbol{u}_i^\ell (\boldsymbol{v}_i^\ell)^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($i = 8, 16, 24, 32$). 61

Figure 5.6 Approximations de rang k obtenues par la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($k = 1, 2, 3, 4$). 62
Figure 5.7 Approximations de rang k obtenues par la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($k = 8, 16, 24, 32$). 63
Figure 5.8 Matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD monolithique (cf. équation (5.2)) de $A = \begin{bmatrix} B_1 B_2 \end{bmatrix}$. 64
Figure 5.9 Approximations de rang k obtenues par la SVD monolithique (cf. équation (5.2)) de $A = \begin{bmatrix} B_1 B_2 \end{bmatrix}$. 65
Figure 5.10 Matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.3)). 69
Figure 5.11 Approximations de rang k obtenues par la SVD de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.3)). 70
Figure 5.12 Approximations de rang k obtenue par une NMF de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.4)). 71
Figure 5.13 Matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 d'une NMF de rang 8 de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.4)). 72
Figure 5.14 Matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 d'une NMF de rang 39 de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.4)). 73
Figure 6.1 Ensembles de données $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^{126}$ ($N = 4$) de la fleur avec perturbations. . 74
Figure 6.2 Matrice $A = [\boldsymbol{a}_1\ \boldsymbol{a}_2\ \boldsymbol{a}_3\ \boldsymbol{a}_4]$ de l'exemple de la fleur avec perturbations. . . . 76
Figure 6.3 Valeurs singulières de la SVD et coefficients α_i de la NMF de rang 39 de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2). 78
Figure 6.4 Vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ de la SVD et vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ d'une NMF de rang 4 de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2). 79
Figure 6.5 Ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$, vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ (SVD) et vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ (NMF) de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2), pour le cas additif. 81
Figure 6.6 Ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$, vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ (SVD) et vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ (NMF) de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2), pour le cas non additif. 82
Figure 7.1 Valeurs singulières σ_i de la SVD et coefficients α_i d'une NMF de rang maximal (39), pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné. 84

Figure 7.2 Colonnes $\boldsymbol{a}_i$ de la matrice A qui représentent l'énergie du jet confiné à différents moments t_i, où $t_{i+1} > t_i$, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné. 85
Figure 7.3 Vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ de la SVD de la matrice A, où $i = 1$ à 6, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné. 86
Figure 7.4 Vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ de la SVD de la matrice A, où $i \in \{7, 8, 9, 12, 16, 20\}$, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné. . . 87
Figure 7.5 Vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ d'une NMF de rang maximal de la matrice A, où $i =$ 1 à 6, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné. 89
Figure 7.6 Vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ d'une NMF de rang maximal de la matrice A, où $i \in \{7, 8, 9, 12, 16, 20\}$, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné. 90
Figure 7.7 Différence entre la valeur moyenne des colonnes $\boldsymbol{a}_i$ de A et le vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ de la SVD de A ainsi qu'avec le vecteur positif $\hat{\boldsymbol{w}}_1$. 91
Figure 9.1 Géométrie du domaine et conditions aux limites pour la simulation numérique du jet confiné. 112
Figure 9.2 Maillage pour la simulation numérique du jet confiné. 113
Figure 9.3 Condition initiale sur l'énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet. 114
Figure 9.4 Énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet ($t = 50, 100, 200$). 115
Figure 9.5 Énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet ($t = 300, 400, 500$). 116
Figure 9.6 Énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet ($t = 600, 700, 791$). 117
Figure 10.1 Vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A ($i = 1, 2, \ldots, 8$). 122
Figure 10.2 Vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A ($i = 9, 10, \ldots, 16$). 123
Figure 10.3 Vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A ($i = 17, 18, \ldots, 24$). 124
Figure 10.4 Superposition des k premiers vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A. 125
Figure 10.5 Partie résiduelle A' générée par la superposition des k premiers vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A. 126
Figure 10.6 Évolution des valeurs singulières de A_r dans le temps pour $r = 8$, 12 et 24. 128
Figure 10.7 Estimation de la dérivée des valeurs singulières $\frac{d\sigma_i}{dt}$ pour $N_t = 24$ à $t = 110$. 132
Figure 10.8 Estimation de la dérivée des valeurs singulières $\frac{d\sigma_i}{dt}$ pour $N_t = 24$ à différents pas de temps. 133

Figure 10.9 Viscosité turbulente $\nu_T = C_s \Delta \sqrt{|\boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}}(A - A_k)\boldsymbol{\tau}_{N_t})|}$ pour k = 4, 8 et 12, calculée pour les données de simulation numérique du jet turbulent confiné (cf. figures 9.3 à 9.6). 136

Figure 10.10 Illustrations du modèle de viscosité turbulente proposé, du modèle de Smagorinsky et de la vorticité pour les données numériques du jet turbulent confiné (cf. figures 9.3 à 9.6). 137

LISTE DES SYMBOLES ET ABRÉVIATIONS

AMD	Anisotropic Minimal-Dissipation
ANN	Artificial Neural Networks
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
DNS	Direct Numerical Simulation
EDP	Équation aux Dérivées Partielles
LES	Large Eddy Simulation
NMF	Nonnegative Matrix Factorisation
PCA	Principal Component Analysis
POD	Proper Orthogonal Decomposition
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
ROM	Reduced Order Model
SVD	Singular Value Decomposition
SVS	Shear and Vortex Sensor
WALE	Wall Adapting Large Eddy

Re	Nombre de Reynolds
$\langle\psi\rangle$	Valeur moyenne de ψ
$\overline{\psi}$	Valeur filtrée de ψ
Δ	Taille du filtre LES (cas isotrope)
Δ_i	Taille du filtre LES selon la direction i
Δt	Pas de temps
$\dot{\gamma}(\boldsymbol{u})$	Tenseur de vitesse de déformation
∇	Opérateur gradient
$\boldsymbol{\sigma}$	Tenseur de Reynolds
μ_t	Viscosité turbulente
$\boldsymbol{e}_i$	Vecteur i de la base cannonique
$\|A\| \equiv \|A\|_{\mathrm{F}}$	Norme de Frobenius de A
$A = U\Sigma V$	Décomposition en valeurs singulières (SVD)
$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$	Approximation de rang k de la SVD
$\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$	Matrice de rang 1 de la SVD
$A = WH$	Factorisation matricielle non négative
E_r	Erreur de représentation d'une NMF de rang r
N_t	Nombre d'états contenus dans la matrice des états

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

L'ordinateur est un laboratoire incroyable puisqu'il permet de faire l'étude virtuelle des écoulements turbulents. À l'aide de quelques équations, et d'un peu de programmation informatique, on peut reproduire un des phénomènes les plus captivants et les plus importants de notre environnement. Ceci permet non seulement d'étudier plusieurs phénomènes physiques souvent inaccessibles, mais aussi de concevoir et d'améliorer plusieurs technologies importantes. On peut mentionner, entre autres, la météorologie, les centrales hydroélectriques, le système de refroidissement d'une centrale nucléaire, la furtivité des sous-marins, l'analyse de la performance de valves aortiques, l'évolution d'incendies à l'intérieur d'un bâtiment, la dispersion de polluants et de substances dangereuses dans l'eau ou dans l'air, l'aérodynamisme, la chambre à combustion d'un moteur, etc.

Le choix de la méthode appropriée à utiliser pour faire ce type d'étude virtuelle n'est pas une tâche simple. Il y a de nombreuses méthodes à considérer et elles ne se valent pas toutes. Certaines méthodes nécessitent peu de ressources de calcul, mais elles génèrent des données qui représentent mal la physique. D'autres méthodes génèrent des données qui représentent bien la réalité, mais elles peuvent nécessiter une grande quantité de ressources de calcul. Il y a tout un spectre de possibilités à travers lequel il peut être difficile de s'orienter. Cette difficulté vient de la façon dont on choisit de modéliser la turbulence de l'écoulement étudié. Une grande partie des modèles disponibles nécessitent des connaissances approfondies au sujet des mécanismes de la turbulence et des méthodes de calcul utilisées par ces modèles. Cet obstacle peut limiter l'accessibilité à certaines méthodes qui seraient grandement utiles à la communauté scientifique professionnelle et académique.

Pour remédier à cette situation, on propose d'utiliser un outil numérique moderne dont l'efficacité et la performance a fait ses preuves. On parle d'un outil qui est entre autre utilisé par des compagnies comme Google et Netflix pour analyser des ensembles massifs de données et qui permet d'en extraire de l'information utile. Avant de se lancer dans l'aspect technique de cette étude, on partage deux apprentissages importants qui ont été acquis dans le cadre de ce projet et qui ont permis d'éviter quelques impasses et d'orienter nos efforts dans la bonne direction :

1. La définition de la turbulence ne relève pas du mathématicien, bien qu'il ne recule jamais devant un bon défi. Ses aptitudes sont mieux investies dans la mise au point des outils d'analyse qui permettent ensuite de poser les bonnes questions ;
2. Il faut éviter autant que possible d'utiliser le terme *structure cohérente*, qui a un bagage historique qui remonte aux années 1950, qui a fait son entrée dans les laboratoires dans les années 1970 et qui est finalement devenu l'objet d'expériences numériques dans les années 1980. Ce terme est presqu'aussi fatal que le mot *turbulence* pour le mathématicien. Mieux

vaut s'en tenir à l'expression plus générale « *fluctuation du champ de vitesse* » et ne pas se laisser distraire inutilement. On laissera les spécialistes de la turbulence définir les structures cohérentes d'un écoulement turbulent.

Les équations mathématiques qui décrivent la dynamique d'un fluide contiennent toute l'information requise pour générer les données liées à un écoulement turbulent. L'outil numérique moderne que l'on prévoit utiliser permet d'extraire rapidement et efficacement la structure sous-jacente d'un ensemble de données, même lorsqu'on ne connaît pas la forme exacte de la structure recherchée. Donc, d'un côté on a des équations qui peuvent générer beaucoup d'information qu'on cherche à comprendre et de l'autre, on a une technique qui permet d'extraire de l'information d'un ensemble de données sans qu'on ait à reconnaître parfaitement ce que l'on recherche. La combinaison de ces deux notions est parfaite.

On propose ainsi une étude qui introduit un outil numérique moderne pour faire l'étude virtuelle d'un écoulement turbulent. L'objectif général de cette thèse est d'appliquer les décompositions matricielles à la construction d'un modèle de viscosité turbulente dans le cadre de la simulation numérique d'écoulements turbulents.

Les objectifs spécifiques de ce projet sont de (d') :

1. faire l'inventaire et d'évaluer les modèles de viscosité turbulente les plus utilisés et les mieux connus dans le cadre d'une approche LES (« Large Eddy Simulation ») ;
2. identifier la forme des matrices pour lesquelles les décompositions matricielles permettent de construire une approximation d'un écoulement turbulent et d'identifier des bornes pour l'erreur associée à cette approximation ;
3. appliquer la méthodologie développée aux écoulements turbulents afin d'obtenir un modèle de viscosité turbulente basé sur une décomposition matricielle.

Pour atteindre ces objectifs spécifiques, on propose d'utiliser la méthodologie suivante :

1. On fait une revue détaillée des modèles de viscosité turbulente les plus utilisés et les mieux connus. Ceci nous permet de comprendre le contexte et les considérations qui ont mené au développement de chaque modèle. Ce travail est significatif et nécessaire afin de comprendre comment est construit chaque modèle. On aura alors un portrait des avantages et des limitations de ces modèles, ce qui nous permettra de produire une liste de leurs propriétés.
2. La décomposition en valeurs singulières, ou SVD (« Singular Value Decomposition »), est la décomposition matricielle la mieux connue et la plus importante dans le contexte de l'analyse de grands ensembles de données. C'est donc cette décomposition matricielle qui retient notre attention. Le théorème d'Eckart-Young [1] est un résultat important qui nous assure que cette décomposition est optimale (au sens des moindres carrés) et il permet ainsi d'estimer avec confiance l'erreur qui sera commise par une approximation faite à l'aide de

cette décomposition. La SVD sera d'abord appliquée à une série d'exemples simples afin d'en dégager les propriétés qui seront utiles à la modélisation d'un écoulement turbulent. Parallèlement à l'étude de la SVD, on étudie une autre décomposition matricielle qui s'est aussi révélée toute aussi importante ces 20 dernières années. La factorisation matricielle non négative, ou NMF (« Nonnegative Matrix Factorization »), permet d'isoler les caractéristiques d'un ensemble de données de manière à leur attribuer une signification précise. Cette comparaison entre la SVD et la NMF permet de mieux cerner les propriétés qui sont propres à la SVD tout en proposant une alternative intéressante qui possède des propriétés complémentaires. Contrairement à la SVD, la NMF ne possède pas certaines propriétés clé, ce qui rend l'étude de ses propriétés plus difficile. On peut toutefois utiliser le théorème de Perron-Frobenius pour relier la NMF à la SVD dans la mesure du possible [1]. Des données expérimentales d'un jet turbulent confiné sont utilisées pour guider notre analyse. Une fois que les lignes directrices de la modélisation sont établies, on peut passer à l'analyse des propriétés qui s'appliquent à l'identification des fluctuations turbulentes d'un écoulement.

3. On génère d'abord des données numériques à l'aide de la simulation numérique d'un jet turbulent confiné, afin de guider notre démarche. On procède ensuite à l'élaboration de l'expression de la viscosité turbulente en s'inspirant des formes les plus connues [2]. On termine en élaborant un algorithme qui permet de mettre en œuvre le nouveau modèle de viscosité turbulente tout en détaillant la façon de choisir les valeurs initiales selon les diverses possibilités qui sont généralement disponibles dans le contexte de la simulation numérique d'un écoulement turbulent.

Première partie

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES ÉCOULEMENTS TURBULENTS

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

On passe en revue des développements faits dans l'étude de la modélisation numérique des écoulements turbulents. Cette revue sert à souligner les contributions marquantes qui permettent d'avoir un portrait de l'évolution et de l'état de l'art de quelques aspects précis de la modélisation numérique des écoulements turbulents. Les éléments soulignés serviront à guider notre travail. Cette revue ne prétend aucunement être exhaustive ni complète, mais prétend plutôt être nécessaire à la présentation plus détaillée des modèles, faite aux prochains chapitres.

2.1 Introduction à la modélisation numérique de la turbulence

La turbulence est un phénomène qui se produit lors de l'écoulement d'un fluide. Il s'agit donc d'un cas particulier du domaine plus large de la mécanique des fluides. Néanmoins, il est difficile d'observer un écoulement de fluide sans qu'un certain degré de turbulence soit présent. Puisqu'on s'intéresse au cas des écoulements incompressibles, newtoniens et isothermes, les équations de Navier-Stokes décrites au chapitre 3 seront suffisantes pour nos besoins.

Plusieurs approches ont été développées pour la simulation numérique des écoulements turbulents. On énumère les trois principales qui servent à donner une idée du spectre des méthodes disponibles : la méthode DNS (« Direct Numerical Simulation »), la méthode LES (« Large-Eddy Simulation ») et la méthode RANS (« Reynolds-Averaged Navier-Stokes »). Deux concepts importants peuvent être utilisés pour mettre en relation ces trois approches. Le premier concept est celui des *échelles résolues*. Il s'agit du niveau de détail avec lequel l'écoulement est décrit par la simulation numérique. Plus précisément, c'est l'ensemble des échelles qui définissent la taille des fluctuations du champ de vitesse qui sont rendues visibles par la simulation numérique. Le second concept est le *modèle des échelles non résolues*. La forme exacte de ce modèle peut varier, mais son rôle est toujours de reproduire l'effet des fluctuations du champ de vitesse qui se produisent à une échelle trop petite pour être reproduites par la simulation numérique. Ces deux concepts créent une dichotomie dans le traitement des fluctuations du champ de vitesse. Si une échelle n'est pas résolue par la simulation numérique, alors son effet doit être modélisé pour que la physique de la simulation soit valide. Avant d'étudier ce qui a été fait dans le cadre de l'approche LES, on décrit brièvement les approches DNS et RANS pour bien comprendre les avantages et inconvénients de cette approche.

La méthode DNS est la plus coûteuse en ressources de calcul, mais elle donne les résultats les plus détaillés. Toutes les échelles sont résolues et aucun modèle supplémentaire n'est nécessaire. Les équations de Navier-Stokes suffisent pour en décrire la dynamique, mais elles doivent être

discrétisées sur un maillage assez fin pour capturer toutes les fluctuations d'un champ de vitesse turbulent. Le nombre de degrés de libertés nécessaires pour y arriver est de l'ordre de $N = \mathcal{O}(\mathrm{Re}^{\frac{9}{4}})$ [2]. Cette approche nous oblige donc à nous restreindre à des écoulements ayant un nombre de Reynolds limité pour être en mesure de bien représenter la complexité du champ de vitesse qui s'y développe. En ce moment, on peut espérer simuler des écoulements turbulents pour $\mathrm{Re} \simeq 10^4$ [3]. Cette approche est donc hors de notre portée pour les problèmes qui nous intéressent, puisqu'en général on a $\mathrm{Re} \gg 10^5$ pour les écoulements de nature industrielle.

La méthode RANS est à l'opposé de la méthode DNS. On allège les calculs le plus possible en résolvant plutôt les équations qui décrivent l'écoulement moyen dans le temps. Cette approche, initialement proposée par Reynolds en 1895 [4], utilise une décomposition qui divise le champ de vitesse en une partie fixe dans le temps (écoulement moyen) et une partie fluctuante. Il n'y a que les valeurs moyennes temporelles du champ de vitesse qui sont représentées par cette approche. Toute la dynamique de la turbulence du champ de vitesse doit être incluse dans un modèle d'échelles non résolues qu'on doit ajouter aux équations moyennées de Reynolds. C'est Boussinesq qui avait développé, quelques années auparavant, le premier modèle de fermeture permettant ainsi de compléter la formulation de Reynolds et de prédire l'effet des échelles non résolues sur l'écoulement moyen [5, 6]. On obtient ainsi des résultats peu détaillés, mais qui ne nécessitent qu'un minimum de ressources de calcul. C'est la méthode la plus utilisée depuis les années 1960 [3]. Une limitation évidente de cette approche est qu'elle est conçue pour générer des valeurs moyennes dans le temps. Elle n'est donc pas adaptée aux écoulements transitoires. Il s'agit toutefois d'une approche très restrictive. On peut étendre l'approche RANS aux écoulements non stationnaires en utilisant plutôt une moyenne d'ensemble permettant ainsi de conserver la contribution des dérivées en temps. Cette seconde approche, qualifiée de URANS (« Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes »), est bien connue et est une technique centrale pour la simulation numérique d'écoulements turbulents [7, 8].

La méthode LES se situe entre les méthodes DNS et RANS. Elle est obtenue en appliquant un filtre aux équations de Navier-Stokes via un produit de convolution. La taille des échelles résolues est définie par la taille du filtre appliqué. On couple les échelles résolues à un modèle d'échelles non résolues afin de contrôler la taille des fluctuations du champ de vitesse de la simulation numérique. Le modèle des échelles non résolues est obtenu en ajoutant une viscosité artificielle au fluide pour imiter leurs effets sur les échelles résolues. On parle alors d'un *modèle de viscosité turbulente*. Le modèle de fermeture de Boussinesq pour les équations moyennées de Reynolds est un modèle de viscosité turbulente, mais il n'est pas très précis [5]. Il aura fallu attendre presqu'un siècle entre les premiers efforts de Boussinesq [6, 9] et les travaux de Smagorinsky [10] pour obtenir un premier modèle LES complet. Bien qu'elle soit utilisée depuis les années 1960 [10–12], cette approche est de plus en plus populaire depuis les 20 dernières années [2], car elle offre un bon compromis entre les ressources de calcul nécessaires et la précision des résultats obtenus. De plus, c'est une

méthode souple qui peut être adaptée à plusieurs contextes et qui a connu beaucoup d'améliorations au courant des dernières années [3, 13–17]. La flexibilité de cette approche en fait la méthode idéale à notre époque puisque les ressources de calcul sont de plus en plus accessibles. L'utilisation de techniques de parallélisation permet de réduire les temps de calcul en utilisant simultanément plusieurs processeurs. Par exemple, l'utilisation de 40 processeurs permet de réduire les temps de calcul par un facteur 30 [18]. On peut ainsi espérer obtenir des résultats s'approchant de ce qui peut être obtenu avec l'approche DNS. L'approche LES peut aussi être couplée à l'approche RANS pour obtenir des résultats précis tout en réduisant davantage les coûts de calcul [2, 7]. Une présentation des filtres les plus utilisés est faite au chapitre 3.

2.2 Validité et portée des modèles LES

Dans ce qui suit, on s'interroge sur la validité des modèles LES et sur leur portée en s'appuyant sur une étude qui s'est intéressée principalement au modèle de Smagorinsky et à ses variantes dynamiques [19]. Plusieurs points cruciaux sont à retenir de cette étude, même si elle a été faite il y a plus de vingt ans et qu'elle ne porte que sur certains modèles spécifiques. Les points importants à retenir sont :

1. La dissipation visqueuse peut être assez bien reproduite relativement aux erreurs de modélisation de la physique des petites échelles par une approche LES ;
2. Les modèles de viscosité turbulente sont robustes dans le sens où ils possèdent des mécanismes internes pour ajuster la dissipation visqueuse sans trop modifier le comportement des grandes échelles ;
3. L'imprévisibilité est une propriété intrinsèque de la physique des petites échelles. On ne peut donc pas prédire les contraintes à cette échelle. Les modèles développés montrent bien ce fait, car même en moyenne, ils reproduisent ces contraintes incorrectement. Ceci est confirmé par les simulations d'écoulements cisaillés pour lesquelles il est démontré que l'erreur sur l'écoulement moyen ne peut être réduite que si les contraintes aux petites échelles sont négligeables ;
4. Le comportement des modèles de viscosité turbulente s'améliore lorsque l'écoulement devient moins turbulent. Ceci se produit lors de la transition de l'écoulement vers l'état turbulent ou bien pour un écoulement près d'une paroi ;
5. Le bon comportement des modèles de viscosité turbulente n'est que peu relié à leur capacité à bien représenter la physique des petites échelles. En fait, il y a une limite importante pour bien décrire la physique des petite échelles, même pour un modèle LES « idéal ». Malgré cette limitation, un modèle qui reproduit ce qui est prévisible aux petites échelles (comme la dissipation visqueuse) peut donner des résultats où les statistiques aux grandes échelles sont fiables ;

6. L'élaboration de modèles de viscosité turbulente plus complexes, afin de mieux représenter la physique des écoulements turbulents aux petites échelles, ne semble pas promettre une diminution des coûts de calculs. L'utilisation de modèles simples pourrait être suffisante pour certains cas.

Les points 1 à 3 nous indiquent qu'il ne devrait pas être difficile de trouver un modèle qui reproduit bien la dissipation visqueuse, mais que le comportement exact des échelles non résolues ne sera probablement pas bien modélisé. Cette observation n'est pas trop dérangeante si on considère que la quantité d'intérêt est la dissipation visqueuse. Un modèle de viscosité turbulente est donc un outil spécialisé qui permet de reproduire la dissipation visqueuse des échelles non résolues.

Le point 4 est rassurant puisque les régions d'intérêt dans un écoulement sont souvent celles où il y a une transition entre le régime laminaire et le régime turbulent. Ces régions peuvent être situées dans l'écoulement libre ou près d'une paroi. Comme l'explique l'étude, les modèles dynamiques sont construits de manière à baser le calcul de la viscosité turbulente sur une mesure de l'énergie turbulente contenue dans les échelles non résolues. Ainsi, la viscosité turbulente s'annule lorsque l'écoulement devient laminaire. Ceci présente un avantage considérable pour les modèles dynamiques par rapport aux modèles plus simples. Des travaux montrent que le champ de vitesse de l'écoulement peut être utilisé afin d'obtenir un modèle qui reproduit le bon comportement près d'une paroi [20]. On peut construire une famille de modèles qui exhibent des caractéristiques particulières si un comportement plus spécifique est requis [17].

Enfin, le point 6 suggère qu'un modèle qui tente de décrire plus précisément la dynamique des échelles non résolues n'apportera pas de gain significatif à l'approche LES. On sera plutôt porté à chercher un modèle qui capture mieux la géométrie associée à un écoulement. Cette observation est importante si on considère le rôle du maillage dans l'approche LES. En pratique, c'est le maillage qui définit la taille du filtre LES de manière implicite. Si on souhaite développer un modèle de viscosité turbulente plus performant, on doit plutôt se concentrer sur l'arrimage entre le modèle de viscosité turbulente et la taille des éléments du maillage.

2.3 Filtres LES isotropes et anisotropes

La façon dont les échelles sont filtrées par une approche LES dépend de la façon dont le domaine est discrétisé. Une simulation numérique ne peut pas produire de détails plus fins que la taille des éléments du maillage utilisé. Idéalement on définit un filtre et ensuite on discrétise le domaine à l'aide d'un maillage qui est compatible avec ce filtre. En pratique, c'est plutôt l'inverse qui se produit puisque les ressources de calcul sont limitées et que la géométrie du problème est souvent trop complexe. Il est plus pratique de créer un maillage et de déduire les propriétés du filtre qui en

découle par la suite. Le résultat de cette démarche est un filtre dont les propriétés varient en fonction de l'endroit où on se trouve dans le domaine. De plus, la façon dont les propriétés du filtre varient peut différer en se déplaçant dans une direction dans l'espace. Par exemple, pour bien simuler la turbulence près d'une paroi, on peut utiliser un maillage dont la taille des éléments varie dans la direction normale à la paroi.

Il existe une propriété fondamentale qui permet de classifier les filtres LES : l'isotropie. Cette propriété découle de la nature des écoulements turbulents. Il est donc utile de classer les filtres en deux catégories : les *filtres isotropes* et les *filtres anisotropes*. Les filtres isotropes sont bien connus et ne nécessitent aucune attention particulière [2]. On retrouve une liste détaillée des principaux filtres isotropes au chapitre 3. On s'intéresse plus particulièrement aux filtres anisotropes à cause de l'irrégularité des maillages et de la présence d'une paroi dans la plupart des cas en pratique.

Parmi les filtres les plus utilisés on trouve le modèle de Smagorinsky dynamique [11, 21, 22]. Cette approche modifie le modèle de Smagorinsky classique et en améliore grandement la précision, comme dans le cas des écoulements turbulents stratifiés [15]. Malgré ces améliorations, le modèle de Smagorinsky dynamique conserve plusieurs lacunes du modèle original, comme une importante diffusion et l'utilisation de deux échelles de filtres distinctes. Des travaux [14] ont été faits pour proposer une approche qui n'utilise qu'une taille de filtre et qui n'introduit que très peu de diffusion, pour permettre l'étude de problèmes de décollement et de recollement de la couche limite à la paroi. Plusieurs modèles sont présentés au chapitre 3. On peut mentionner, parmi les modèles qui ne sont pas présentés, par exemple, les filtres différentiels [13, 16, 23, 24].

2.4 Modèles de viscosité turbulente

Une fois que les équations de Navier-Stokes sont filtrées, on doit modéliser l'effet des échelles non résolues en introduisant un modèle de viscosité turbulente. Les développements proposés [12, 25–27] montrent qu'il est possible d'utiliser un modèle de viscosité turbulente conjointement avec un ou des filtres appropriés pour représenter l'anisotropie d'un écoulement turbulent. On constate que plusieurs de ces modèles ont été proposés il y a plusieurs années, mais leur application est une pratique qui semble encore peu répandue et des efforts sont encore déployés afin de développer un modèle qui possède les bonnes propriétés.

Parmi les modèles de viscosité turbulente existants, les mieux connus sont :

- 1963 : Modèle de Smagorinsky (à l'origine de l'approche LES) [10, 11] ;
- 1991 : Modèle de Smagorinsky dynamique [21, 28] ;
- 1999 : Modèle WALE (« Wall Adapting Large Eddy ») [27] ;
- 2004 : Modèle de Vreman [29] ;

— 2010 : Modèle WALE dynamique avec SVS (« Shear and Vortex Sensor ») [30] ;
— 2011 : Modèle σ [20] ;
— 2011 : Modèles à dissipation minimale QR (2011) [31] et AMD (2015) [32] ;
— 2015 : Modèles S3PQR [17], où S, 3, P, Q et R désignent le tenseur de taux de déformation, ses invariants et le paramètre du modèle.

Une description plus détaillée de chacun de ces modèles est présentée au chapitre 3. Il convient de mentionner qu'il s'agit d'une sélection limitée de modèles qui sert à illustrer le cheminement fait au courant des cinquante premières années suivant l'introduction du modèle de Smagorinsky. La dernière famille de modèles de notre liste (S3PQR) est en quelque sorte le prototype ultime des modèles de viscosité turbulente bâtis à partir du tenseur gradient de vitesse et qui peut servir à créer plusieurs modèles ayant des propriétés bien définies. L'introduction des modèles S3PQR vient formaliser la liste des propriétés qui semblent essentielles, tout en généralisant la forme des modèles existants.

Finalement, même si on arrive à construire une famille de modèles qui possèdent un comportement adéquat et qui ne nécessitent pas trop de ressources de calcul, un désavantage majeur demeure : le succès de ces modèles repose sur l'identification de la bonne échelle de filtre imposée par le maillage [33]. La performance de ces méthodes est donc réduite lorsque le maillage devient irrégulier. Un effort supplémentaire doit alors être fait pour identifier la taille du filtre qui correspond le mieux à l'anisotropie du maillage utilisé.

2.5 Gestion de l'erreur pour l'approche LES

En plus de la complexité associée à l'approche LES, celle-ci souffre d'un autre problème qui rend son application plus difficile. Les sources d'erreurs sont variées et sont souvent difficiles à cerner puisqu'elles sont généralement différentes d'un type d'écoulement à l'autre, en plus de la sensibilité aux conditions limites et initiales, sans parler du choix des méthodes numériques utilisées pour approcher numériquement les solutions des équations des modèles utilisés. Les erreurs peuvent provenir des sources suivantes :

— Erreurs de modélisation :
  — Choix du filtre LES et du modèle de viscosité turbulente ;
  — Relation entre la taille du filtre LES et le maillage ;
  — Erreur de commutativité entre le filtre et la dérivée ;
— Erreurs numériques :
  — Dissipation due aux schémas numériques ;
  — Traitement des conditions limites.

Idéalement, on devrait être en mesure de s'assurer que l'erreur encourue par l'approche LES soit inférieure ou égale aux autres sources d'erreurs potentielles. Plusieurs études ont été menées pour tenter d'identifier et de quantifier ces sources d'erreurs [2, 34, 35], mais le problème demeure difficile à traiter, ce qui pourrait être un obstacle à l'utilisation de cette approche.

2.6 Méthodes d'apprentissage automatique appliquées à la modélisation de la turbulence

L'apprentissage automatique est une technique qui n'est pas nouvelle mais qui connaît de plus en plus de popularité grâce à l'augmentation rapide de la capacité de calcul des ordinateurs et de l'accessibilité à des quantités grandissantes de données. On distingue deux approches principales en ce qui concerne la modélisation de la turbulence.

La première approche, souvent qualifiée d'apprentissage profond, utilise une architecture de réseau de neurones artificiels (ANN, « Artificial Neural Networks ») pour optimiser un modèle capable de reproduire la physique des échelles non résolues [36–43]. Ce réseau de neurones artificiels doit être entraîné sur une quantité massive de données, mais requiert peu ou pas de connaissances a priori sur la physique du modèle. La phase d'entraînement du réseau de neurones peut être longue et coûteuse, mais une fois entraîné, le modèle prend peu de temps à être exécuté. On mentionne cette approche parce qu'elle prend de l'importance. Bien que les développements se sont multipliés, surtout dans la dernière décennie, des travaux précurseurs étaient déjà en cours au début des années 2000 [39].

La seconde approche, souvent jumelée à une approche par réduction de modèle (ROM, « Reduced-Order Model »), consiste à extraire les modes qui caractérisent un écoulement turbulent à partir d'un grand ensemble de réalisations du même écoulement [44–51]. Les données utilisées peuvent provenir de mesures ou elles peuvent être obtenues par simulations numériques, soit par DNS ou par LES avec une fine résolution. Pour extraire ces caractéristiques, les données de chaque réalisation de l'écoulement doivent être regroupées sous forme de matrices pour que celles-ci soient décomposées. Les décompositions matricielles peuvent varier selon la nature de l'approche, mais l'objectif de ces décompositions est souvent le même : décomposer l'écoulement en une combinaison linéaire de modes qui peuvent évoluer dans le temps et dans l'espace. Cette approche est de nature statistique et les modes sont souvent associés à des corrélations en espace et/ou en temps, selon le type de décomposition utilisée et selon la façon dont les données sont regroupées. Il faut donc pouvoir interpréter les éléments de ces décompositions si on souhaite pouvoir les utiliser pour construire un modèle. On note que l'approche ROM souffre du même problème que l'approche LES dans la mesure où il faut fournir un modèle d'échelles non résolues. Ainsi, l'approche d'apprentissage profond et l'approche ROM ne sont pas mutuellement exclusives puisqu'on peut utiliser la première approche pour obtenir un modèle de fermeture pour l'approche ROM [36, 39].

Il y a des limitations sévères à ces deux approches. D'une part, l'apprentissage profond à l'aide d'ANN est encore dans ses débuts et peut difficilement être utilisée pour des écoulements complexes, sans parler du coût et des ressources nécessaires pour entraîner le modèle. L'approche ROM quant à elle est excellente pour des écoulements périodiques, mais elle est très mal adaptée aux écoulements transitoires ou simplement non périodiques. Toutefois, certaines tentatives sont menées pour adapter l'approche ROM aux écoulements non périodiques [52].

2.7 Approches statistiques

Nos travaux s'inspirent des méthodes de décomposition matricielle utilisées par les approches de type ROM afin d'extraire les modes qui caractérisent l'écoulement pendant la simulation numérique. On présente donc les techniques de décompositions matricielles les plus utilisées afin de comprendre les avantages et inconvénients de la méthode retenue. Une grande partie de ces méthodes sont basées sur la décomposition en valeurs singulières (SVD) puisque celle-ci offre une décomposition unique et optimale au sens des moindres carrés pour obtenir une matrice de rang k comme une somme de k matrices de rang 1 (théorème d'Eckart-Young [1]).

La décomposition matricielle est une technique bien connue pour le traitement d'images [53–58]. La correspondance entre une image et une matrice est relativement directe, ce qui pourrait expliquer la réussite des multiples applications développées au cours des dernières décennies. Si l'image est composée de teintes de gris, on peut alors lui associer une matrice pour laquelle chaque coefficient correspond à la teinte de gris de chaque pixel.

Si on remplace les pixels par les données d'un système physique, des données expérimentales ou simulées, alors on peut appliquer ces techniques à n'importe quel phénomène quantifiable. En particulier, si ces données sont reliées au champ de vitesse d'un écoulement turbulent, on pourrait être tenté d'appliquer des concepts de traitement d'image pour localiser la turbulence dans un écoulement. Le premier soucis avec cette approche est qu'il faudrait alors savoir ce qu'on cherche. Comme il n'y a pas de définition générale de la turbulence qui est suffisamment descriptive pour mener une recherche par reconnaissance visuelle, alors il faut utiliser des concepts plus abstraits, invariablement liés aux statistiques de l'écoulement.

On peut retracer les sources de l'approche statistique à la turbulence aux travaux de Reynolds (1895), de Taylor (1935) et de Kolmogorov (1941) [4,59–63]. On perçoit alors la turbulence comme un phénomène aléatoire qu'il convient de traiter statistiquement comme du bruit. Un écoulement turbulent est alors vu comme une superposition d'un écoulement moyen laminaire et d'une série de fluctuations aléatoires. Ce qui se rapproche le plus du concept de reconnaissance faciale pour les écoulements turbulents est la notion de structure cohérente introduite dans les années 1950 par Liepmann et Townsend [58, 64]. Le concept de structure cohérente n'a été reconnu expérimentale-

ment que dans les années 1970. En particulier, Roshko [65] propose de décrire ces structures à l'aide de corrélations spatio-temporelles suite à une série d'observations faites sur la formation de grandes structures dans la couche de mélange d'un écoulement entre deux fluides cisaillés. On trouve une tentative de définition théorique, d'abord par Lumley en 1967 [66] et ensuite par Hussain et Sirovich dans les années 1980 pour n'en nommer que quelques-uns [67–71]. Ces définitions relient les structures cohérentes aux modes propres d'une forme de décomposition en valeurs singulières. Sirovich admet lui-même que la définition théorique pourrait ne pas correspondre aux observations expérimentales. Une définition générale est donc hors de portée vu l'étendue du concept.

L'approche qui est basée sur une décomposition matricielle, qui est la plus répendue et qui était déjà bien connue dans les années 1940 [64], est la décomposition en composantes principales (PCA, « Principal Component Analysis »). Cette dernière est aussi connue sous le nom de décomposition de Karhunen-Loève. On doit d'abord réunir les données sous forme de matrices, où chaque colonne contient les variables d'une réalisation à laquelle on a soustrait la valeur moyenne. Ensuite, on produit une SVD de la matrice obtenue. Les k premiers vecteurs singuliers fournissent alors la meilleure description de rang k de la variation des données. La principale limitation de cette approche est qu'elle demeure une linéarisation du phénomène étudié. La linéarité est toutefois aussi la force de cette approche puisqu'on a un outil robuste pour lequel un bagage de connaissances imposant existe. En d'autres termes, la SVD est un outil prometteur puisqu'on en connaît bien les forces et les limitations. La PCA est connue par la communauté qui étudie les écoulements turbulents sous le nom de « proper orthogonal decomposition » (POD) [64, 69–71] et est obtenue en regroupant les données du champ de vitesse. Cette approche est donc idéale pour les écoulements turbulents statistiquement stationnaires. Mais elle peut aussi s'appliquer à des écoulements transitoires si les colonnes de la matrice des données correspondent aux états successifs du même écoulement. On obtient alors une corrélation spatio-temporelle des fluctuations du champ de vitesse où chaque élément de rang 1 de la décomposition peut être associé à une énergie cinétique.

On termine en soulignant qu'il n'existe pas à notre connaissance de méthodes qui utilisent la POD spatio-temporelle pour construire un modèle de viscosité turbulente en temps réel pour l'approche LES. Ceci pourrait s'expliquer par la nature prédictive des modèles habituellement développés. En effet, l'objectif généralement visé est de prédire le comportement des échelles non résolues afin de produire une ROM. Il existe au moins une étude qui a pour objectif de modéliser le comportement des échelles non résolues en temps réel avec l'approche LES [72]. Les résultats sont obtenus pour un écoulement dans une conduite et pour un écoulement turbulent isotrope. L'approche développée modélise le tenseur des contraintes des échelles non résolues à l'aide des modes de la POD. Les résultats montrent que le modèle donne des résultats comparables aux modèles WALE et de Smagorinsky dynamique. L'auteur note que l'approche est 12% plus coûteuse en ressources de calcul que le modèle de Smagorinsky dynamique.

CHAPITRE 3 MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES ÉCOULEMENTS TURBULENTS

On s'intéresse à la modélisation numérique des écoulements turbulents à l'aide de l'approche LES. Une fois la formulation LES obtenue, on doit discrétiser le système d'EDP qui en découle à l'aide d'une méthode qui permet d'obtenir une approximation de la solution à ces équations. La méthode des éléments finis sera utilisée pour accomplir cette dernière tâche puisqu'elle permet un traitement robuste des conditions limites sur le domaine de simulation.

3.1 Modèle LES

Les équations de Navier-Stokes modélisent les écoulements turbulents à toutes les échelles, mais il faut trop de ressources de calcul pour toutes les inclure dans une simulation numérique. L'idée principale derrière l'approche LES est de retirer les fluctuations du champ de vitesse de l'écoulement qui se produisent à une échelle plus petite qu'une taille prescrite, ce qui permet de réduire la charge de calcul. Habituellement, on effectue cette opération en filtrant les équations à l'aide d'un produit de convolution,

$$\overline{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x},t) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^3} G(\boldsymbol{r},\theta)\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r},t-\theta)d\boldsymbol{r}\,d\theta, \tag{3.1}$$

où G est le *noyau de convolution*. On note aussi ce produit de manière plus compacte sous la forme

$$\overline{\boldsymbol{u}} = G \star \boldsymbol{u}.$$

Ce filtrage permet de ne considérer que les échelles spatiales et temporelles qui sont plus grandes que la largeur des filtres Δ (en espace) et Δ_t (en temps) imposés. Il en résulte une décomposition du champ de vitesse similaire à la décomposition de Reynolds,

$$\boldsymbol{u} = \overline{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{u}', \tag{3.2}$$

où $\overline{\boldsymbol{u}}$ est la partie *filtrée* du champ de vitesse et où $\boldsymbol{u}'$ est la partie *résiduelle* que l'on peut aussi écrire comme

$$\boldsymbol{u}' = \overline{\boldsymbol{u}} - \boldsymbol{u}. \tag{3.3}$$

Pour obtenir un système fermé, on doit modéliser la partie résiduelle du champ de vitesse, car l'application du filtre LES introduit un terme supplémentaire dans l'équation filtrée. Comme on le verra plus loin, ce terme supplémentaire est ce qui distingue le modèle LES de l'équation de Navier-Stokes classique.

Le premier aspect à considérer dans notre étude est l'homogénéité du modèle. Par exemple, la turbulence ne se développera pas de la même façon dans toutes les directions pour les écoulements près d'une paroi. Pour bien comprendre cet aspect, on doit rappeler le concept d'*écoulement turbulent statistiquement homogène* et celui d'*écoulement turbulent statistiquement isotrope* [2].

L'homogénéité statistique dans une direction donnée d'un écoulement est vérifiée lorsque toutes les propriétés statistiques restent inchangées par une translation dans cette direction. Un écoulement turbulent est dit *homogène* lorsqu'on observe l'homogénéité statistique dans toutes les directions. Ceci ne veut pas dire que toutes les directions d'un écoulement turbulent homogène exhibent le même comportement, mais plutôt que rien ne change statistiquement le long d'une direction donnée, et ce pour toutes les directions possibles. L'isotropie statistique sert à décrire un écoulement turbulent homogène pour lequel les propriétés statistiques sont invariantes d'une direction à l'autre via une rotation ou une réflexion.

On doit ensuite définir ce que signifie l'isotropie d'un filtre (ou d'un modèle du tenseur de Reynolds). On dit qu'un filtre est isotrope si ses propriétés sont indépendantes de la position ou de l'orientation du référentiel spatial où il est défini. Ceci sous-entend que le filtre est appliqué à un domaine non borné et que la largeur du filtre est la même dans toutes les directions. On doit considérer qu'en pratique c'est le maillage qui définit implicitement le filtre LES, que les maillages sont rarement uniformes et que les domaines sont souvent bornés par au moins une paroi. Du point de vue pratique, les filtres isotropes sont donc une idéalisation. Il s'agit toutefois du type de filtre habituellement utilisé avec l'approche LES. L'étude des filtres anisotropes (et non homogènes) est chose récente.

On présente d'abord les filtres isotropes classiques qui servent au développement de l'approche LES. On présente ensuite naïvement le cas des filtres anisotropes et non homogènes en modifiant un filtre isotrope classique.

3.1.1 Filtres isotropes

On énonce ici les propriétés d'un filtre LES et on énumère les trois filtres les plus couramment utilisés. Ces filtres ne sont habituellement définis qu'en espace [1], et ils possèdent une largeur constante et homogène dans toutes les directions. Nous nous en tiendrons donc à ces paramètres pour ce qui suit.

Le filtre doit avoir trois propriétés essentielles pour permettre son application aux équations de Navier-Stokes [2] :

1. On remarque qu'un filtre spatial induit naturellement un filtre temporel [2] puisque, de la nature des équations de Navier-Stokes, on peut associer une échelle temporelle à une échelle spatiale.

1. conservation des constantes :
$$\overline{c} = c, \forall c \in \mathbb{R};$$
2. linéarité :
$$\overline{u + v} = \overline{u} + \overline{v};$$
3. commutativité avec la dérivée [2] :
$$\overline{\left(\frac{\partial}{\partial s} u\right)} = \frac{\partial}{\partial s}\overline{u}, \quad \text{où} \quad s = x_1, x_2, x_3, t.$$

Les trois filtres classiques les plus couramment utilisés sont :

1. le filtre chapeau :
$$G(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{\Delta} & \text{si} \quad \|\boldsymbol{r}\|_2 \leq \dfrac{\Delta}{2}\,; \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{3.4}$$
Ce filtre définit $\overline{\boldsymbol{u}}$ comme la valeur moyenne de $\boldsymbol{u}$ dans une boule de rayon $\frac{\Delta}{2}$;
2. le filtre gaussien :
$$G(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{\beta}{\pi\Delta^2}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{-\beta\|\boldsymbol{r}\|_2^2}{\Delta^2}\right). \tag{3.5}$$
Ce filtre est définit à l'aide d'une distribution gaussienne de moyenne nulle et de variance $\frac{\Delta^2}{12}$, et où β est une constante habituellement choisie comme étant égale à 6. Cette variance a été choisie pour que les seconds moments des filtres chapeau et gaussien soient identiques [2] ;
3. le filtre spectral :
$$G(\boldsymbol{r}) = \prod_{i=1}^{3} \left(\frac{\sin\left(2\pi r_i/\Delta\right)}{\pi r_i}\right). \tag{3.6}$$
L'effet de ce filtre se comprend mieux dans l'espace des nombres d'onde. On se contentera ici de dire que le filtre spectral élimine les échelles d'énergie associées à un nombre d'onde plus grand que $\frac{\pi}{\Delta}$.

3.1.2 Filtres anisotropes et filtres non homogènes

On peut produire un filtre anisotrope en généralisant les modèles classiques présentés à la section 3.1.1. Pour y arriver, on définit une largeur de filtre différente pour chaque direction. Par exemple,

2. Si on utilise un noyau de convolution qui dépend aussi de la position $\boldsymbol{x}$ ($G = G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{x})$), la commutativité avec la dérivée n'est plus respectée (*cf.* section 3.1.3).

si on note Δ_1, Δ_2 et Δ_3 comme étant les trois largeurs de filtres dont au moins deux sont distinctes, alors on peut obtenir un filtre chapeau anisotrope et homogène (cf. équation (3.4)) :

$$G(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{\Delta_i} & \text{si} \quad |r_i| \leq \dfrac{\Delta_i}{2}, \quad i = 1, 2, 3\,; \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{3.7}$$

Cette approche s'applique aussi aux autre filtres (équations (3.5) et (3.6)). Elle est utile pour un écoulement turbulent qui exhibe clairement un comportement différent pour une direction fixe donnée. Il devient donc apparent que la situation est plus compliquée lorsque l'écoulement n'exhibe pas toujours clairement la direction selon laquelle il est anisotrope.

Pour étendre le filtre chapeau au cas non homogène, on peut définir une longueur de filtre $\Delta(\boldsymbol{x})$ en chaque point de l'espace. De plus, on peut décentrer le filtre de manière à ce que le point $\boldsymbol{x}$ ne soit pas au centre de la boîte de dimension $\Delta(\boldsymbol{x})$. Par exemple, en coordonnées cartésiennes, on pourrait définir $\Delta^+_{x_i}(\boldsymbol{x})$ et $\Delta^-_{x_i}(\boldsymbol{x})$ comme les demi largeurs de filtre respectivement à droite et à gauche du point $\boldsymbol{x}$. Ainsi, la largeur totale de filtre au point $\boldsymbol{x}$ serait $\Delta^+_{x_i}(\boldsymbol{x}) + \Delta^-_{x_i}(\boldsymbol{x})$. L'expression d'une fonction $f(x)$ filtrée serait alors (en 1D)

$$\overline{f}(x) = \frac{1}{\Delta^+(x) + \Delta^-(x)} \int_{x-\Delta^-(x)}^{x+\Delta^+(x)} f(r)\, dr. \tag{3.8}$$

L'utilisation de tels filtres demeure complexe et une étude approfondie doit être menée pour en comprendre les ramifications. On peut prendre en exemple le cas d'un écoulement près d'une paroi où on pourrait tirer avantage d'un filtre qui favorise un sens plus qu'un autre.

3.1.3 Commutativité du filtre LES et de la dérivée spatiale

On a énoncé plus tôt les trois propriétés essentielles qu'un filtre doit avoir pour qu'on puisse l'appliquer aux équations de Navier-Stokes. Une de ces propriétés est la commutativité du filtre avec la dérivée. Or, cette propriété ne tient plus lorsque :

— l'opération de filtrage n'est faite que sur une région bornée de $\mathbb{R}^3$;
— le noyau de convolution dépend d'une variable de l'espace.

Il s'agit de deux conditions qui sont souvent non respectées puisqu'en général, une simulation est portée sur une région bornée de l'espace et qu'une déformation du maillage dans une direction donnée entraîne des variations de la largeur de filtre dans cette direction [73]. Il est d'usage de négliger l'erreur encourue par la première transgression car elle est généralement négligeable [74].

Toutefois, la seconde transgression est plus préoccupante puisqu'on souhaite délibérément faire varier la largeur du filtre dans l'espace en utilisant un maillage non structuré, généralement plus raffiné près d'une paroi. Ainsi, même si l'erreur générée par une déformation du maillage était jugée négligeable, on se doit d'étudier cette erreur lorsqu'on prévoit introduire des variations plus importantes.

3.1.4 Équations de Navier-Stokes

On décrit maintenant les équations qui régissent la dynamique d'un fluide. Pour notre étude, on se restreint aux fluides newtoniens incompressibles en écoulement isotherme subsonique. Il s'agit d'un cadre de travail bien connu et donc aucune modification des équations habituelles n'est requise. Sous sa forme conservative, l'équation de conservation de la masse est donnée par

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{3.9}$$

où ρ est la masse volumique du fluide et $\boldsymbol{u}$ est son champ de vitesse. En présence d'un fluide incompressible, l'équation (3.9) devient

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0. \tag{3.10}$$

La conservation de la quantité de mouvement donne lieu aux équations de Navier-Stokes,

$$\rho \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{u} + (\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla)\, \boldsymbol{u} = \nabla \cdot \tau,$$

où

$$\tau = 2\mu \dot{\gamma}(\boldsymbol{u}) - \left(\tfrac{2\mu}{3} \nabla \cdot \boldsymbol{u} + p\right)\delta$$

est le tenseur des contraintes de Cauchy, μ est la viscosité dynamique, $\dot{\gamma}(\boldsymbol{u}) = \frac{\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T}{2}$ est le tenseur vitesse de déformation, p est la pression et δ est le tenseur de Kronecker (δ_{ij} vaut 1 si $i = j$ et 0 sinon). Pour un fluide incompressible, cette équation devient

$$\rho \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{u} + (\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla)\, \boldsymbol{u} = \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\boldsymbol{u})) - \nabla p. \tag{3.11}$$

3.1.5 Équations de Navier-Stokes filtrées

On applique maintenant un filtre LES au système d'EDP qui décrit l'écoulement du fluide. On doit traiter l'équation de conservation de la masse (3.10) et les équations de Navier-Stokes (3.11). En appliquant le filtre LES à l'équation (3.10), on obtient la relation $\overline{\nabla \cdot \boldsymbol{u}} = \overline{0}$. En utilisant les

propriétés essentielles d'un filtre LES, on trouve l'équation de continuité pour l'écoulement filtré,

$$\nabla \cdot \overline{\boldsymbol{u}} = 0. \tag{3.12}$$

En procédant de la même manière avec l'équation (3.11), on a

$$\begin{aligned} \overline{\rho \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{u} + (\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla)\,\boldsymbol{u}} &= \overline{\nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\boldsymbol{u})) - \nabla p} \\ &\Leftrightarrow \\ \rho \frac{\partial}{\partial t}\overline{\boldsymbol{u}} + \overline{(\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla)\,\boldsymbol{u}} &= \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})) - \nabla \overline{p}. \end{aligned}$$

Le terme $\overline{(\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla)\,\boldsymbol{u}}$ est quelque peu embêtant et on doit le modifier, car il ne peut être discrétisé sous cette forme. On cherche à exprimer les équations de Navier-Stokes filtrées en fonction de la vitesse filtrée $\overline{\boldsymbol{u}}$. On définit alors la relation

$$\overline{(\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla)\,\boldsymbol{u}} = (\rho \overline{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla)\,\overline{\boldsymbol{u}} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

où

$$\boldsymbol{\sigma} = \overline{\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \rho \overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}} \tag{3.13}$$

est le *tenseur de Reynolds*. Cette relation nous permet de traiter le terme de convection filtré à condition de donner une expression fermée au tenseur de Reynolds :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t}\overline{\boldsymbol{u}} + (\rho \overline{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla)\,\overline{\boldsymbol{u}} = \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \nabla \overline{p}. \tag{3.14}$$

C'est ainsi qu'on arrive à la deuxième partie de la modélisation des écoulements turbulents à l'aide de l'approche LES : la modélisation de la partie résiduelle du champ de vitesse, qui passe par la modélisation du tenseur de Reynolds.

3.1.6 Modélisation du tenseur de Reynolds

On complète le développement de l'expression du tenseur de Reynolds (3.13) en introduisant un *modèle de viscosité turbulente*. L'idée est de donner à $\boldsymbol{\sigma}$ une forme similaire à celle du tenseur vitesse de déformation pour un fluide Newtonien,

$$\boldsymbol{\sigma} - \frac{\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{3}\delta = -2\mu_t \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}), \tag{3.15}$$

où μ_t est la viscosité turbulente. Ceci permettra de rassembler les tenseurs vitesse de déformation et de Reynolds en une seule expression dans l'équation (3.14),

$$\nabla \cdot (2\mu\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \nabla \cdot (2\mu_e\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}))\,,$$

où $\mu_e = \mu + \mu_t$ est la *viscosité effective*. On a donc le système d'EDP :

$$\begin{cases} \rho\dfrac{\partial}{\partial t}\overline{\boldsymbol{u}} + (\rho\overline{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla)\,\overline{\boldsymbol{u}} = \nabla \cdot (2\mu_e\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})) - \nabla\overline{p}; \\ \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{u}} = 0, \end{cases} \tag{3.16}$$

à discrétiser, où on doit spécifier le modèle de fermeture μ_t. On présente les modèles les plus connus dans ce qui suit.

Modèle de Smagorinsky (1963)

Une première approche consiste à utiliser le modèle de Smagorinsky [2],

$$\mu_t = (C_s\Delta)^2\,\sqrt{2\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) : \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})},$$

où C_s est la *constante de Smagorinsky*. Malheureusement, ce modèle classique simple est trop dissipatif et n'a pas le bon comportement près d'une paroi [2]. Des modifications y ont étés apportées pour le rendre plus performant [15], mais il demeure tout de même problématique puisque la viscosité turbulente obtenue ne tend pas vers zéro lorsque l'écoulement devient laminaire. En particulier, la viscosité turbulente ne disparaît pas près d'une paroi.

Modèle de viscosité turbulente par décomposition (« splitting »)

Après quelques années d'expérimentation avec le modèle de Smagorinsky, des modèles qui tiennent compte de la non homogénéité de la turbulence près de la paroi ont été développés. Par exemple, les modèles basés sur une technique de décomposition (« splitting technique ») ont été introduits par Schumann [12]. Ces modèles viennent améliorer les modèles plus traditionnels en décomposant (« splitting ») en deux parties le tenseur des contraintes de Reynolds :

$$\boldsymbol{\sigma} - \frac{\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{3}\delta = -2\mu_t\,(\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) - \langle\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\rangle) - 2\mu_t^a\langle\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\rangle,$$

où $\langle\cdot\rangle$ représente une moyenne statistique qui correspond habituellement à la moyenne spatiale dans les directions d'homogénéité de l'écoulement. On a ainsi introduit deux viscosités turbulentes : une

qui représente la partie isotrope (μ_t) et l'autre qui représente la partie anisotrope (μ_t^a). Pour calculer ces coefficients, on utilise les définitions données par [25] :

$$\begin{aligned} \mu_t &= (C_1\Delta)^2 \sqrt{2\left(\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) - \langle\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\rangle\right)\left(\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) - \langle\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\rangle\right)}\,; \\ \mu_t^a &= (C_2\Delta_n)^2 \sqrt{2\langle\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\rangle\langle\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\rangle}, \end{aligned}$$

où C_1 et C_2 sont deux constantes et où Δ et Δ_n sont les largeurs de filtre qui tiennent compte de l'anisotropie du maillage et de la distance par rapport à la paroi. On retrouve plus de détails sur ce modèle dans [2], ainsi que des variantes proposées par [26], qui introduisent un facteur supplémentaire η dans le tenseur de Reynolds afin de mieux représenter l'anisotropie de l'écoulement,

$$\boldsymbol{\sigma} - \frac{\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{3}\delta = -2\mu_t\eta\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) - 2\mu_t^a\langle\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\rangle.$$

On obtient ainsi une approche plus flexible, mais on doit maintenant fournir deux modèles de viscosité turbulente.

Modèle de Smagorinsky dynamique (1991)

La première innovation majeure pour les modèles de viscosité turbulente sont arrivés lorsque la principale source d'erreur dans le modèle de Smagorinsky a bien été comprise. Le choix de la constante est le premier problème auquel on fait face lorsqu'on souhaite utiliser ce modèle. Différentes valeurs sont proposées selon la nature de l'écoulement (C_s entre 0,1 et 0,23 [21]) pour tenter d'améliorer la performance du modèle. Bien que le modèle de Smagorinsky a été important pour l'avancement de la modélisation numérique des écoulements turbulents, il est aussi un mauvais modèle à cause de ses limitations importantes. Le problème est qu'il n'y a pas de constante C_s qui soit universelle.

La solution proposée à ce problème est de modifier C_s pour qu'elle s'adapte localement à la nature de l'écoulement. On fait souvent référence à cette approche en la qualifiant d'identité de Germano, ou d'identité de Lilly-Germano, suite aux travaux de Germano et Lilly [21, 28] la même année. Plusieurs approches ont été développées [2] suite au premier modèle de ce type, mais on ne les présente pas ici. Il suffit de souligner que cette approche dynamique a inspiré de nombreuses autres approches similaires et qu'elle est encore largement utilisée. Les approches de ce type peuvent donner de bons résultats, mais elles peuvent aussi être instables numériquement [17].

Modèle WALE (1999)

Pour un traitement plus précis à la paroi, on préférera utiliser un modèle du type « Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity » (WALE) [27],

$$\mu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(\boldsymbol{T} : \boldsymbol{T})^{3/2}}{(\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) : \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}))^{5/2} + (\boldsymbol{T} : \boldsymbol{T})^{5/4}} , \tag{3.17}$$

où

$$\boldsymbol{T} = \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) - \frac{1}{3}\left(\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) : \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) - \dot{\omega}(\overline{\boldsymbol{u}}) : \dot{\omega}(\overline{\boldsymbol{u}})\right)$$

et où

$$\dot{\omega}(\overline{\boldsymbol{u}}) = \frac{1}{2}\left(\nabla\overline{\boldsymbol{u}} - \nabla\overline{\boldsymbol{u}}^T\right).$$

Les meilleurs résultats sont obtenus avec $C_w = 0{,}5$. Ce modèle est facile à implémenter et il est de faible coût. Il performe mieux que le modèle de Smaogorinsky, mais on trouve que $\mu_t \neq 0$ pour des écoulements bidimensionnels qui peuvent être décrits à l'aide de deux composantes de vitesse.

Modèle de Vreman (2004)

Ce modèle a été introduit pour améliorer la performance du modèle de Smagorinsky dynamique en évitant d'introduire des procédures explicites de filtrage et de « clipping ». Le modèle de Vreman [29] peut s'écrire sous la forme

$$\mu_t = c\sqrt{\frac{B_\beta}{\nabla\overline{\boldsymbol{u}} : \nabla\overline{\boldsymbol{u}}}} ,$$

où $B_\beta = \beta_{11}\beta_{22} - \beta_{12}^2 + \beta_{11}\beta_{33} - \beta_{13}^2 + \beta_{22}\beta_{33} - \beta_{23}^2$ et en prenant $\beta = (\nabla \boldsymbol{u} D)(\nabla \boldsymbol{u} D)^T$ avec $D_{ij} = \Delta_i \delta_{ij}$. La constante c peut être reliée à la constante de Smagorinsky par la relation $c = 2{,}5C_S^2$.

Le tenseur β prend la forme

$$\beta = \Delta^2 \nabla\overline{\boldsymbol{u}}\ \nabla\overline{\boldsymbol{u}}^T$$

dans le cas d'un filtre isotrope ($\Delta_i = \Delta$). Ce modèle performe mieux que le modèle de Smagorinsky, mais au lieu d'obtenir une viscosité turbulente qui exhibe un comportement en (y^{+^3}) près d'une paroi, on retrouve un comportement en y^+. De plus, comme pour le modèle WALE, on trouve $\mu_t \neq 0$ pour des écoulements bidimensionnels.

Modèle WALE dynamique avec SVS (2010)

L'idée à la base de la version dynamique du modèle WALE est la même que celle utilisée pour le modèle de Smagorinsky dynamique. Toutefois, la méthode WALE dynamique introduit aussi une dissipation trop grande près d'une paroi. De plus, une observation importante est faite à l'égard de l'utilisation de cette approche dynamique : elle n'est pas appropriée pour tous les modèles de viscosité turbulente puisqu'elle peut introduire des instabilités numériques près des parois et peut donner des valeurs aberrantes. Ainsi, un paramètre adimensionnel est introduit pour corriger ces problèmes [30]. Ce critère, baptisé « Shear and Vortex Sensor » (SVS), prend la forme d'un invariant similaire à celui qu'on retrouve dans l'équation (3.17),

$$\mathrm{SVS} = \frac{(\boldsymbol{T} : \boldsymbol{T})^{3/2}}{(\boldsymbol{T} : \boldsymbol{T})^{3/2} + (\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}) : \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}}))^3}. \tag{3.18}$$

Ce critère possède trois propriétés intéressantes :

— Il adopte le bon comportement à la paroi ($\mathcal{O}(y^{+^3})$) ;
— Il est nul pour les écoulements purement cisaillés ;
— Il est unitaire pour les écoulements purement rotationnels.

Les valeurs du critère SVS sont contenues entre 0 et 1, permettant ainsi de distinguer les endroits où l'écoulement est purement rotatif des endroits où il est purement cisaillé (près d'une paroi). Malgré cette avancée, on doit tout de même choisir des valeurs du critère qui permettent de délimiter ces deux types de régions, ce qui revient à déterminer quel est le bon mélange de cisaillement et de rotationnel qui crée de la turbulence. Les auteurs suggèrent d'utiliser l'identité de Germano pour évaluer C_w lorsque SVS $>$ 0,09 et de simplement poser $C_w = 0{,}5$ lorsque SVS $<$ 0,09. Enfin, même si ce modèle devrait posséder un bon comportement à la paroi en théorie, on trouve que ce n'est pas le cas en pratique [20].

Modèle sigma et propriétés recherchées d'une viscosité turbulente (2011)

Il a été reconnu que le modèle WALE et que le modèle de Vreman ne donnent pas une viscosité turbulente nulle dans le cas d'un écoulement purement rotationnel, alors que le modèle de Smagorinsky ne donne pas une viscosité turbulente nulle dans le cas d'un écoulement purement cisaillé [20]. Même si plusieurs procédures dynamiques existent pour tenter d'améliorer le comportement de ces modèles, il semble que des problèmes d'instabilités persistent et que les résultats ne sont pas toujours ceux attendus. Ainsi, suivant ces observations, des propriétés recherchées commencent à se dégager et une liste est faite afin d'essayer de cerner la bonne définition pour un modèle de viscosité turbulente :

— être défini localement par des gradients de vitesse et ne donner que des valeurs positives ;
— exhiber un comportement en $\mathcal{O}(y^{+^3})$ près d'une paroi ;
— être nul pour les écoulements purement cisaillés ;
— être nul pour les écoulements purement axisymétriques et en contraction ou en expansion isotrope.

Ainsi, pour satisfaire ces propriétés, des auteurs [20] proposent un modèle basé sur les valeurs singulières du tenseur $\nabla \boldsymbol{u}$,

$$\mu_t = (C_\sigma \Delta)^2 \frac{\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2},$$

où $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3$ sont les valeurs singulières de $\nabla \boldsymbol{u}$ et où on suggère de choisir $1{,}3 \leq C_\sigma \leq 1{,}5$. Ce modèle réussit très bien à reproduire les propriétés énoncées ci-dessus, son seul défaut est qu'il est plus coûteux en ressources de calcul puisqu'il faut résoudre une équation cubique. Puisque cette opération peut être délicate, ce modèle peut souffrir d'instabilités numériques [17].

Modèles à dissipation turbulente minimale QR (2011) et AMD (2015)

Le modèle QR s'obtient en calculant la viscosité turbulente minimale nécessaire pour dissiper toutes les fluctuations du champ de vitesse non résolu [31]. En d'autres termes, μ_t doit éliminer la dynamique de l'écoulement sous l'échelle Δ du filtre sans affecter le comportement de l'écoulement aux autres échelles. Encore une fois, on fait usage du gradient de vitesse

$$\mu_t = (\Delta/\pi)^2 \frac{|R|}{Q},$$

où $R = \mathrm{tr}(\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})^3)$ et $Q = \mathrm{tr}(\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})^2)$. L'avantage que l'on reconnaît immédiatement est que la constante du modèle est fixée $(1/\pi)$. Ceci découle directement de la procédure de minimisation faite pour tenter d'obtenir la dissipation correspondant à la taille du filtre utilisé (via l'inégalité de Poincaré). Ce modèle de viscosité turbulente possède les propriétés suivantes :

— $\mu_t = 0$ lorsque les fluctuations du champ de vitesse non résolu sont nulles ;
— $\mu_t = 0$ près d'une paroi ;
— $\mu_t = 0$ pour un écoulement bidimensionnel ;
— $\mu_t \to 0$ lorsque la viscosité du fluide permet de dissiper naturellement les fluctuations du champ de vitesse non résolu (lorsque $\Delta \to \mathrm{Re}^{-3/4}$).

Il a été reconnu que la dissipation fournie par ce modèle est insuffisante et qu'elle peut être corrigée en modifiant la constante du modèle [32]. Toutefois, le modèle n'est pas compatible avec des maillages non uniformes et les résultats ne sont pas satisfaisants même si la taille du filtre est

approximée. Le modèle AMD (« Anisotropic Minimal-Dissipation ») est proposé [32] pour généraliser le modèle QR et pour mieux traiter les cas avec un maillage anisotrope. On ne présente pas le modèle AMD en détail ici. Il suffit de dire qu'une inégalité de Poincaré modifiée a été utilisée pour accommoder un filtre anisotrope ($\Delta_1 \neq \Delta_2 \neq \Delta_3$) et que la viscosité turbulente obtenue est consistante avec l'anisotropie des échelles non résolues.

Modèle S3PQR : Généralisation des principaux modèles existants (2015)

Les modèles de viscosité turbulente décrits jusqu'ici (Smagorinsky, WALE, Vreman, sigma, QR) partagent tous la propriété d'être une fonction d'un ou de plusieurs invariants des tenseurs $\nabla\overline{\boldsymbol{u}}$, $\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})$ et $\dot{\omega}(\overline{\boldsymbol{u}})$. Cette approche est pratique puisqu'elle permet de définir localement une viscosité turbulente qui est indépendante du référentiel. Une généralisation de ces modèles a été mise au point en 2015 [17] de manière à ce qu'on puisse exprimer une famille de modèles ayant les propriétés des modèles existants sous une seule forme paramétrée. Le terme S3PQR fait référence au tenseur vitesse de déformation et à ses invariants. Cette forme est composée des cinq invariants, $Q_{\nabla\overline{\boldsymbol{u}}}$, $Q_{\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})}$, $R_{\nabla\overline{\boldsymbol{u}}}$, $R_{\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})}$ et V^2, où :

$$\begin{aligned} V^2 &= 4(P_{\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})^2\dot{\omega}(\overline{\boldsymbol{u}})^2} - 2Q_{\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})}Q_{\dot{\omega}(\overline{\boldsymbol{u}})}); \\ Q_A &= \frac{1}{2}(P_A^2 - P_{A^2}); \\ R_A &= \det(A) = \frac{1}{6}(P_A^3 - 3P_A P_{A^2} + 2P_{A^3}); \\ P_A &= \mathrm{tr}(A). \end{aligned}$$

Le modèle de viscosité turbulente obtenu est alors

$$\mu_t = (C_{\mathrm{s3pqr}}\Delta)^2 P_A^{\,p} Q_A^{-(p+1)} R_A^{\frac{1}{3}(p+\frac{5}{2})},$$

où $A = \dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})\dot{\gamma}(\overline{\boldsymbol{u}})^T$ et C_{s3pqr} peut être bornée par la constante du modèle de Vreman pour s'assurer que le nouveau modèle n'introduira pas trop de dissipation. La valeur exacte utilisée pour C_{s3pqr} dépend de la valeur de p choisie. Plusieurs modèles peuvent être obtenus à l'aide de cette formulation. Les auteurs en essaient trois qu'ils nomment S3PQ ($p = -\frac{5}{2}$), S3PR ($p = -1$) et S3QR ($p = 0$). Les résultats obtenus pour ces nouveaux modèles sont comparés aux résultats obtenus par les modèles de Smagorinsky et de Vreman, ainsi qu'à des données de DNS. La performance de ces nouveaux modèles est alors jugée comme étant supérieure ou égale aux modèles existants, en plus de posséder les propriétés désirables attendues. Comme pour les modèles présentés plus tôt, la performance des modèles S3PQR sera affectée par le choix de Δ, et une solution à ce problème doit être trouvée.

Modélisation de la taille de filtre Δ pour les maillages anisotropes

Tous les modèles de viscosité turbulente présentés dépendent explicitement de la taille Δ du filtre LES. La valeur de Δ doit donc être bien estimée pour obtenir la bonne valeur de μ_t. On commence par souligner qu'il y a autant de manières de définir Δ, que de manières de mesurer la taille d'un maillage. Puisque le filtre LES est appliqué implicitement par le maillage, une bonne définition de Δ passe par une bonne mesure de la taille du maillage. Plusieurs définitions existent pour lesquelles seule la taille locale du maillage est nécessaire. Par exemple, en coordonnées cartésiennes, on a [33] :

$$\begin{aligned}
\Delta_{\text{vol}} &= \sqrt{\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3}; \\
\Delta_{\max} &= \max(\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3); \\
\Delta_{L^2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\Delta_1^2 + \Delta_2^2 + \Delta_3^2\right)^{\frac{1}{2}}; \\
\Delta_{\text{Lapl}} &= \sqrt{3} \left(\frac{1}{\Delta_1^2} + \frac{1}{\Delta_2^2} + \frac{1}{\Delta_3^2} \right)^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

Ces modèles sont simples, mais peuvent avoir tendance à introduire trop de dissipation. Certains modèles tentent d'incorporer une mesure de la vorticité du champ de vitesse afin d'inclure la direction dans laquelle les tourbillons pourraient avoir tendance à s'étirer, mais ce type d'approche nécessite d'importantes corrections et peut devenir coûteuse en ressources de calcul. Il faut donc réunir en une seule mesure Δ les propriétés du maillage et celles de l'écoulement. Un modèle utilisant une mesure plus générale a été développé dans l'espoir d'introduire une approche qui donne de bons résultats pour les maillages anisotropes. L'idée derrière cette approche, développée en 2017, est de définir Δ implicitement en mesurant son effet sur le gradient du champ de vitesse filtré $\nabla \overline{u}$,

$$\Delta_{\text{lsq}} = \sqrt{\frac{(\nabla \overline{u} D (\nabla \overline{u} D)^T) : (\nabla \overline{u} \nabla \overline{u}^T)}{(\nabla \overline{u} \nabla \overline{u}^T) : (\nabla \overline{u} \nabla \overline{u}^T)}},$$

où on rappelle que $D_{ij} = \Delta_i \delta_{ij}$ où δ_{ij} est le delta de Kronecker. On obtient cette relation en effectuant le changement de variables $\xi_i = x_i / \Delta_i$ pour rendre le filtre LES isotrope et en estimant ensuite l'effet de cette transformation sur l'expression de $\boldsymbol{\sigma}(\overline{\boldsymbol{u}})$. On obtient une relation de la forme $\Delta^2 \nabla \overline{u} \nabla \overline{u}^T = \nabla \overline{u} D (\nabla \overline{u} D)^T$ en comparant la formulation du filtre isotrope à celle du filtre anisotrope. Il suffit enfin de faire une projection pour estimer Δ au sens des moindres carrés. Cette procédure peut être généralisée pour être appliquée aux maillages non structurés et en utilisant la matrice jacobienne qui lui est associée. Cette nouvelle approche est plus robuste que les approches existantes et n'est pas très coûteuse en ressources de calcul.

3.1.7 Hypothèse de la diffusion numérique ($\mu_t = 0$)

En pratique on voit des cas où on évite simplement d'utiliser un modèle de viscosité turbulente, en plus de laisser le maillage définir implicitement le filtre LES. C'est l'approche LES la moins coûteuse et la plus simple. Dans ce cas, même si $\mu_t = 0$, c'est la diffusion numérique qui joue le rôle de la viscosité turbulente. Il a été constaté que cette approche peut donner des résultats raisonnables pour certains types d'écoulements à condition que le nombre de Reynolds ne soit pas trop élevé. Lorsque l'écoulement devient trop turbulent, la diffusion numérique est insuffisante et les schémas numériques deviennent instables, ce qui cause la divergence de la simulation numérique [75].

Il faut mentionner que l'approche LES implicite est basée sur l'hypothèse que la diffusion numérique générée par les schémas numériques peut être utilisée pour remplacer un modèle de viscosité turbulente. En contrôlant la diffusion numérique à l'aide de schémas numériques, il est possible d'obtenir des résultats plus précis que ceux qu'on obtient à l'aide des modèles de Smagorinsky classique et dynamique [76–78].

On serait ainsi porté à croire que le rôle de μ_t se résume à générer de la diffusion de manière à dissiper les fluctuations du champ de vitesse en stabilisant du même coup la simulation numérique. Ce n'est pas clair toutefois si l'hypothèse numérique $\mu_t = 0$ mène systématiquement à une sous-estimation de la viscosité turbulente. Verstappen [31] a observé ce qui semble plutôt être le contraire, en comparant des données d'une simulation DNS aux données de deux simulations LES, une obtenue avec le modèle QR et l'autre avec l'hypothèse $\mu_t = 0$. Chacune des deux simulations LES ont été faites avec le même maillage. Il a pourtant été observé que la simulation avec l'hypothèse $\mu_t = 0$ produisait une vitesse moyenne globale plus faible que le modèle QR et que la DNS. La DNS affichait la vitesse moyenne la plus élevée, ce qui place la vitesse moyenne obtenue par le modèle QR entre les données de la DNS et celles de l'hypothèse $\mu_t = 0$.

3.1.8 En résumé

Depuis le développement du premier modèle de viscosité turbulente par Smagorinsky, c'est véritablement dans les années 1990 que l'approche exploitant le tenseur de gradient de vitesse a connu des avancées remarquables. Le début des années 2000 a été marqué par l'identification des propriétés recherchées d'un modèle de viscosité turbulente et plus d'une décennie plus tard, cette approche a été perfectionnée à l'aide d'un cadre théorique pour de ce type de formulation. Quelques remarques peuvent être faites au vu de ces développements :

— le seul modèle simple qui semble posséder toutes les propriétés désirables est le modèle sigma, mais c'est le plus coûteux de ceux qu'on a présentés et il peut présenter des instabilités numériques ;

— choisir un modèle basé sur les invariants du tenseur vitesse de déformation signifie de devoir faire un compromis sur au moins une des propriétés recherchées d'un modèle de viscosité turbulente ;
— plusieurs approches existent pour corriger un modèle simple qui n'exhibe pas les bonnes propriétés. Il faut toutefois parfois investir plus de ressources de calcul et gérer des instabilités numériques qui pourraient faire échouer l'application du modèle ;
— si les schémas numériques le permettent et si le nombre de Reynolds de l'écoulement n'est pas trop élevé, il est parfois plus simple de n'utiliser aucun modèle de viscosité turbulente et de laisser la diffusion numérique se charger de la dissipation des fluctuations du champ de vitesse ;
— le niveau des connaissances requises pour sélectionner le modèle de viscosité turbulente adéquat peut être un obstacle et souvent on préfère utiliser une variante du modèle de Smagorinsky.

3.2 Discrétisation des équations

On décrit maintenant la discrétisation des équations du système (3.16). On procède à une discrétisation en espace à l'aide de la méthode des éléments finis et à une discrétisation en temps à l'aide d'un schéma de différence arrière d'ordre 2. On présente d'abord les espaces fonctionnels nécessaires à la formulation variationnelle des équations. Ensuite, on présente la discrétisation des formes obtenues. Cette présentation se veut brève et sert à illustrer le formalisme de la méthodologie utilisée.

3.2.1 Espaces fonctionnels

On présente les espaces fonctionnels nécessaires à la discrétisation des équations (3.16). Prenons un domaine Ω de $\mathbb{R}^3$, $\partial\Omega$ est la frontière de Ω et $\Lambda \subseteq \partial\Omega$. L'espace des fonctions de carré intégrable est donné par

$$L^2(\Omega) = \left\{ u : \Omega \to \mathbb{R} \mid \int_\Omega u^2 \, d\Omega < \infty \right\}$$

et est muni du produit scalaire

$$(u\,,\, v)_{0,\Omega} = \int_\Omega u\, v \, d\Omega\,.$$

Pour les fonctions de $\Omega \to \mathbb{R}^n$ et de $\Omega \to \mathbb{R}^{n\times n}$, on a

$$L^2(\Omega)^n = \left\{ \boldsymbol{u} : \Omega \to \mathbb{R}^n \mid \int_\Omega \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} \, d\Omega < \infty \right\}$$

et

$$L^2(\Omega)^{n\times n} = \left\{\boldsymbol{\tau} : \Omega \to \mathbb{R}^{n\times n} \mid \int_\Omega \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau}\, d\Omega < \infty\right\},$$

respectivement avec les produits scalaires

$$(\boldsymbol{u}\,,\boldsymbol{v})_{0,\Omega} = \int_\Omega \boldsymbol{u}\cdot\ \boldsymbol{v}\, d\Omega$$

pour ce qui est de $L^2(\Omega)^n$ et

$$(\boldsymbol{\tau}\,,\boldsymbol{\gamma})_{0,\Omega} = \int_\Omega \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\gamma}\, d\Omega$$

dans $L^2(\Omega)^{n\times n}$. On doit aussi introduire les espaces de Sobolev qui imposent des restrictions sur les dérivées des fonctions. On a d'abord l'espace

$$H^1(\Omega) = \left\{u \in L^2(\Omega) \;\middle|\; \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2, 3, \ldots, n\right\},$$

pour lequel on a le produit scalaire

$$(u\,, v)_{1,\Omega} = (u\,, v)_{0,\Omega} + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}\,, \frac{\partial v}{\partial x_i}\right)_{0,\Omega}.$$

Afin d'imposer les conditions aux limites à la frontière du domaine, il est d'usage de définir les espaces de Sobolev où les fonctions sont nulles sur une partie de la frontière. Ainsi on définit

$$H^1_{Du}(\Omega) = \left\{u \in H^1(\Omega) \mid u(\boldsymbol{x}, t) = 0 \;\text{ sur }\; \partial\Omega_{Du}\right\}$$

et aussi

$$H^{1/2}_{Du}(\Omega) = \left\{u|_{\partial\Omega_{Du}} \mid u \in H^1(\Omega)\right\}.$$

On obtient ces espaces de Sobolev des fonctions de $\Omega \to \mathbb{R}^n$ et de $\Omega \to \mathbb{R}^{n\times n}$ de la même façon en utilisant les espaces $L^2(\Omega)^n$ et $L^2(\Omega)^{n\times n}$. On introduit aussi l'espace

$$L^2_u(\Lambda) = \left\{\phi : \Lambda \to \mathbb{R} \mid \int_\Lambda |\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n}_\Lambda|\, \phi^2\, d\Omega < \infty\right\}$$

pour lequel on a la relation de dualité

$$\langle\phi\,, \psi\rangle_{L^2_u(\Lambda)} = \int_\Lambda |\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n}_\Lambda|\, \phi\, \psi\, d\Omega.$$

Ces espaces sont suffisants pour la discrétisation des équations du système (3.16).

3.2.2 Formes faibles

On obtient la forme faible de chaque équation du système (3.16) en la multipliant par une fonction test choisie dans l'espace fonctionnel approprié et en l'intégrant sur le domaine. Cette opération permet de projeter l'action d'une équation différentielle sur l'ensemble des fonctions qui forment l'espace fonctionnel choisi.

On choisit les fonctions tests pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans l'espace $H^1_{Du}(\Omega)^3$. En multipliant et en intégrant, on obtient

$$\left(\rho\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{u}\,,\boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega}+\Big(\left(\rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{u}\,,\boldsymbol{v}\Big)_{0,\Omega}-\Big(\nabla\cdot(2\mu_e\dot{\gamma}(\boldsymbol{u}))\,,\boldsymbol{v}\Big)_{0,\Omega}+\Big(\nabla p\,,\boldsymbol{v}\Big)_{0,\Omega}=0,\ \forall\,\boldsymbol{v}\in H^1_{Du}(\Omega)^3.$$

En appliquant le théorème de la divergence, on obtient

$$\left(\rho\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{u}\,,\boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega}+\Big(\left(\rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{u}\,,\boldsymbol{v}\Big)_{0,\Omega}-\Big(\left(2\mu_e\dot{\gamma}(\boldsymbol{u})\right),\nabla\cdot\boldsymbol{v}\Big)_{0,\Omega}+\Big(p\,,\nabla\cdot\boldsymbol{v}\Big)_{0,\Omega}$$
$$=\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_{N\boldsymbol{u}}\,,\boldsymbol{v}\rangle_{H^{-1/2},H^{1/2}},\ \forall\,\boldsymbol{v}\in H^1_{Du}(\Omega)^3 \quad (3.19)$$

où $H^{-1/2}(\Omega)^3$ est le dual de $H^{1/2}(\Omega)^3$. Pour l'équation de conservation de la masse, on choisit les fonctions tests dans l'espace $L^2(\Omega)$. En multipliant et en intégrant, on obtient

$$(\nabla\cdot\boldsymbol{u}\,,\psi)_{0,\Omega}=0,\ \forall\,\psi\in L^2(\Omega). \quad (3.20)$$

Pour résoudre le problème constitué des équations (3.19) et (3.20), on doit trouver $(\boldsymbol{u},\,p)\in H^1(\Omega)^3\times L^2(\Omega)$.

3.2.3 Discrétisations

La discrétisation du problème s'effectue en trois étapes à l'aide de la *méthode de Galerkin*. Premièrement, on discrétise le domaine spatial tridimensionnel Ω en le partitionnant de tétraèdres et on note le domaine discret Ω_h où h représente la taille des tétraèdres du maillage ainsi créé. On définit h comme étant la longueur de la plus grande arête des tétraèdres du maillage. Les sommets de ces tétraèdres sont les nœuds géométriques du maillage. On appelle éléments finis ces tétraèdres à l'aide desquels on définit une approximation discrète des espaces fonctionnels nécessaires à la formulation du problème à l'aide de leurs nœuds de calcul (qui ne correspondent pas nécessairement aux nœuds géométriques).

Ceci nous mène à la deuxième étape, qui est la discrétisation des espaces fonctionnels associés aux formes faibles (3.19) et (3.20). On note $V_h\subset H^1(\Omega)^3$ et $Q_h\subset L^2(\Omega)$ les espaces fonctionnels

discrets qui servent à discrétiser la vitesse et la pression. Les formes discrètes de ces variables sur chaque tétraèdre du maillage sont données par :

$$\begin{cases} u_h(\boldsymbol{x},t) = \sum_{i=1}^{N_u} u_i(t)\phi_i^u(\boldsymbol{x}); \\ p_h(\boldsymbol{x},t) = \sum_{i=1}^{N_p} p_i(t)\phi_i^p(\boldsymbol{x}), \end{cases}$$

où $\boldsymbol{u}_h = (u_h, v_h, w_h)$ est l'approximation discrète de $\boldsymbol{u}$ et p_h est l'approximation discrète de p. Sur chaque tétraèdre du maillage, les fonctions $\phi_i^\chi(\boldsymbol{x})$ ont la propriété

$$\phi_i^\chi(\boldsymbol{x}_j) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad i = j; \\ 0 & \text{si} \quad i \neq j, \end{cases}$$

où $\chi \in \{u, v, w, p, \}$ et où les points $\boldsymbol{x}_j$ sont les nœuds de calcul du tétraèdre. Pour la pression, on utilise l'élément linéaire P1 dont les nœuds de calcul correspondent aux nœuds géométriques. Pour la vitesse, on utilise soit l'élément linéaire P1-bulle, où un nœud de calcul est ajouté au barycentre de l'élément P1, soit l'élément quadratique P2. Les deux paires d'éléments P1-bulle/P1 (MINI) et P2/P1 (Taylor-Hood) sont stables et permettent de satisfaire la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi [79] qui assure l'existence d'une solution discrète unique.

On complète la présentation de la méthode de Galerkin en choisissant les fonctions d'interpolation pour chaque variable dans les mêmes espaces discrets que les fonctions tests utilisées pour les formes faibles :

$$\begin{cases} \phi_i^u \in V_h, \quad \text{pour} \quad i = 1, 2, \ldots, N_u; \\ \phi_i^v \in V_h, \quad \text{pour} \quad i = 1, 2, \ldots, N_v; \\ \phi_i^w \in V_h, \quad \text{pour} \quad i = 1, 2, \ldots, N_w; \\ \phi_i^p \in Q_h, \quad \text{pour} \quad i = 1, 2, \ldots, N_p. \end{cases}$$

La troisième étape est la discrétisation en temps. On choisit une formule aux différences implicite,

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x},t_k)}{\partial t} = \frac{\alpha \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x},t_k) - (\alpha+\beta)\boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x},t_{k-1}) + \beta \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x},t_{k-2})}{\Delta t}, \tag{3.21}$$

où Δt est le pas de temps avec $t_k = t_0 + k\Delta t$ et $k \in \mathbb{N}$. En prenant $(\alpha, \beta) = (1, 0)$ et $(\alpha, \beta) = (\frac{3}{2}, \frac{1}{2})$, on retrouve respectivement le schéma d'Euler implicite et le schéma de Gear.

En appliquant ces discrétisations aux formes faibles (3.19) et (3.20), on obtient le système d'équa-

tions matricielles non linéaire

$$\begin{bmatrix} M_{\boldsymbol{u}} + C_{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{U}) + A_{\boldsymbol{u}} & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{U} \\ \boldsymbol{P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{G} \\ \boldsymbol{H} \end{bmatrix}, \tag{3.22}$$

où $M_{\boldsymbol{u}}$ est la matrice masse en vitesse. Cette matrice contient la discrétisation en temps et est définie à l'aide des équations (3.21). $C_{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{U})$ est la matrice de convection, $A_{\boldsymbol{u}}$ est la matrice de diffusion visqueuse et B est la matrice de divergence. Les degrés de liberté inconnus en vitesse et en pression sont contenus dans les vecteurs $\boldsymbol{U}$ et $\boldsymbol{P}$. Le vecteur $\boldsymbol{G}$ contient les valeurs connues données par le membre de droite des équations (3.19). Pour résoudre le système (3.22), on doit utiliser une méthode applicable aux équations algébriques non linéaires, comme une méthode de point fixe ou la méthode de Newton.

Deuxième partie

DÉCOMPOSITIONS MATRICIELLES APPLIQUÉES AUX ÉCOULEMENTS TURBULENTS

PARTIE II : DÉCOMPOSITIONS MATRICIELLES APPLIQUÉES AUX ÉCOULEMENTS TURBULENTS

La décomposition matricielle, formalisée par Householder [80] est une technique mathématique utilisée, par exemple, pour extraire les caractéristiques d'une image ou pour en réduire sa complexité. Il existe plusieurs décompositions possibles et parfois même plusieurs façons d'appliquer une même décomposition. Par exemple, la décomposition en valeurs singulières, ou SVD (« Singular Value Decomposition »), peut être utilisée pour compresser une image puisqu'elle permet une décomposition unique et optimale. À l'opposé, la factorisation matricielle non négative, ou NMF (« Nonnegative Matrix Factorisation »), peut être utilisée pour identifier les caractéristiques d'une image en leur attribuant une signification particulière. Toutefois, la NMF n'est pas unique et un effort supplémentaire doit être fait pour rendre le résultat optimal vis-à-vis d'un objectif spécifique. Il semble donc qu'on ait le choix entre une décomposition aux propriétés recherchées, mais qui ne fournit pas une interprétation claire (SVD) et une décomposition dont les éléments sont faciles à interpréter, mais qui n'est ni unique et ni optimale (NMF). On souhaite comprendre ce que ces deux méthodes ont à offrir pour extraire de l'information d'un écoulement turbulent. En particulier, on veut :

1. savoir si les approximations de faible rang obtenues par ces décompositions peuvent servir à représenter le champ de vitesse ou l'énergie d'un écoulement turbulent ;
2. définir le contexte où on peut utiliser ces décompositions ;
3. connaître la borne supérieure sur l'erreur de ces approximations lorsqu'elles sont possibles.

On débute cette partie avec la présentation de quelques exemples simples de l'application de la SVD et de la NMF afin de mettre en évidence les propriétés de chacune de ces décompositions. Les exemples traités varient d'une matrice de petite taille qui représente une image simple à un ensemble de données composées de quelques milliers de points de mesures d'un écoulement turbulent obtenus en laboratoire. Le traitement des données et les décompositions matricielles sont faites à l'aide du langage de programmation Julia (`https://julialang.org`) en utilisant le module « LinearAlgebra.jl » (`https://juliapackages.com/p/linearalgebra`) pour la SVD et le module « NMF.jl » (`https://juliapackages.com/p/nmf`) pour la NMF.

On termine cette partie avec une définition précise du contexte dans lequel on peut utiliser la SVD et la NMF. On présente également les bornes supérieures sur l'erreur des différentes approximations de faible rang qui sont possibles avec la SVD et la NMF.

CHAPITRE 4 DÉCOMPOSITIONS NAÏVES D'UNE MATRICE SIMPLE

On commence avec le cas simple d'une matrice A ayant 14 lignes et 9 colonnes. On choisit $a_{ij} = 0$ ou $a_{ij} = 1$ de manière à obtenir l'image d'une fleur, tel qu'illustré à la figure 4.1 :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4.1}$$

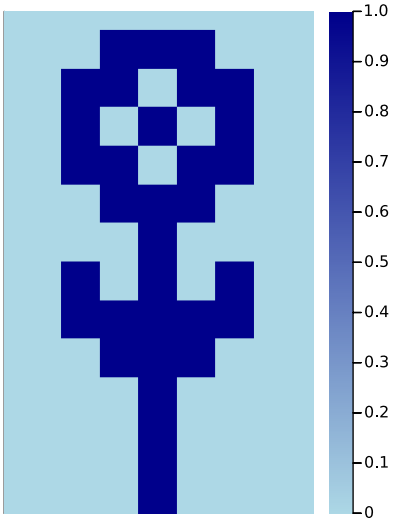


FIGURE 4.1 Illustration de la matrice A (cf. équation (4.1)) pour laquelle $a_{ij} = 0$ ou $a_{ij} = 1$.

4.1 Application de la SVD

La SVD réduite d'une matrice A permet d'exprimer celle-ci comme une somme de matrices de rang 1,

$$\begin{aligned} A &= U\Sigma V^{\mathrm{T}} \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \cdots & \boldsymbol{u}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \cdots & \boldsymbol{v}_r \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ &= \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_r \boldsymbol{u}_r \boldsymbol{v}_r^{\mathrm{T}}, \end{aligned} \tag{4.2}$$

où $\sigma_i \geq \sigma_{i+1}$ et où r est le rang de A. Dans le cas de la matrice de la page précédente, on a $r = 3$ puisque les colonnes 3, 4 et 5 sont suffisantes pour reconstruire A. Cette décomposition nous permet d'obtenir une approximation de rang k de la matrice A à l'aide de la troncature

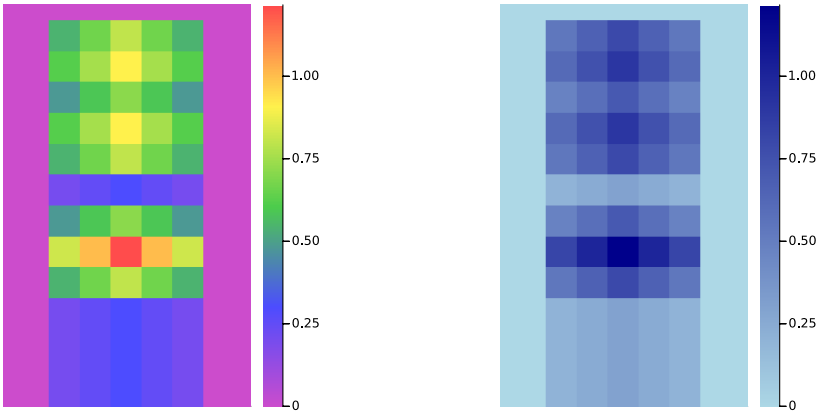
$$A_k = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^{\mathrm{T}}, \tag{4.3}$$

où $k < r$. L'erreur liée à cette approximation est présentée au chapitre 8.

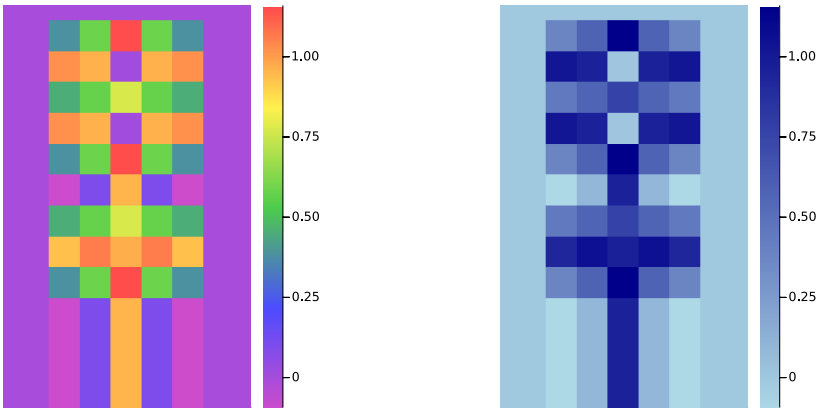
La première chose à faire est de visualiser les approximations de rang k de A, ainsi que les matrices de rang 1 produites par la SVD. Puisque la visualisation de A est plus aisée sous forme d'image que sous forme matricielle, on préfère étudier les images telles qu'illustrées aux figures 4.2 et 4.3. Il est aussi révélateur de faire varier l'échelle de couleurs afin de mettre en évidence l'intensité et la variation des valeurs des coefficients de A.

D'abord, ces images révèlent que la SVD produit des coefficients qui ne demeurent pas dans l'intervalle initial des valeurs des coefficients de A. Bien que les coefficients de A prennent seulement deux valeurs, 0 ou 1, les coefficients des matrices de rang 1 prennent des valeurs entre 0 et 1, ainsi que des valeurs qui sortent de l'intervalle $(0, 1)$. Ce fait est embêtant puisque si les coefficients de A représentent une quantité qui doit demeurer positive, comme l'énergie cinétique, alors les valeurs négatives n'ont aucun sens. De plus, si les coefficients de A représentent une quantité qui doit être conservée, comme l'énergie, alors des coefficients plus grands que ceux initialement présents dans A peuvent être problématiques.

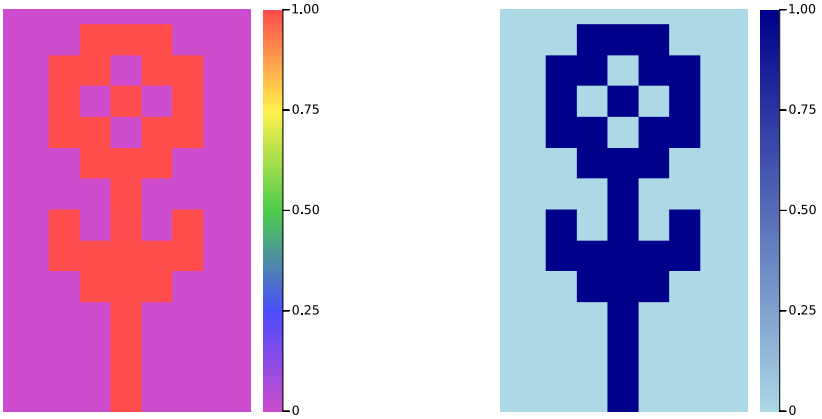
Un autre problème devient évident lorsqu'on remarque que les coefficients non nuls de A ne demeurent pas non nuls dans A_k. L'information initialement contenue dans les coefficients non nuls A se retrouvent donc à être étendue à travers les matrices de rang 1 de la SVD sans respecter la forme exacte contenue dans A. Les différentes matrices de rang 1 interagissent et se combinent



(a) Fleur de rang 1, échelles arc-en-ciel et monochrome.

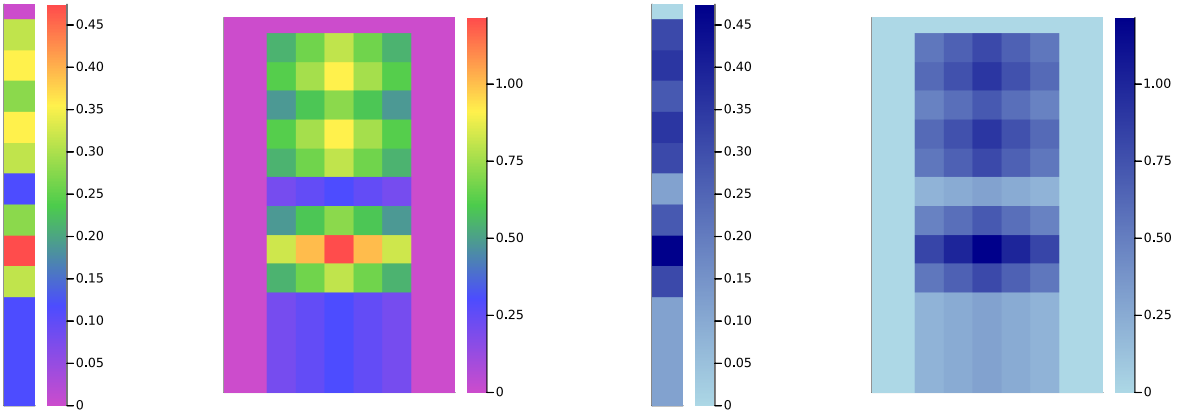


(b) Fleur de rang 2, échelles arc-en-ciel et monochrome.

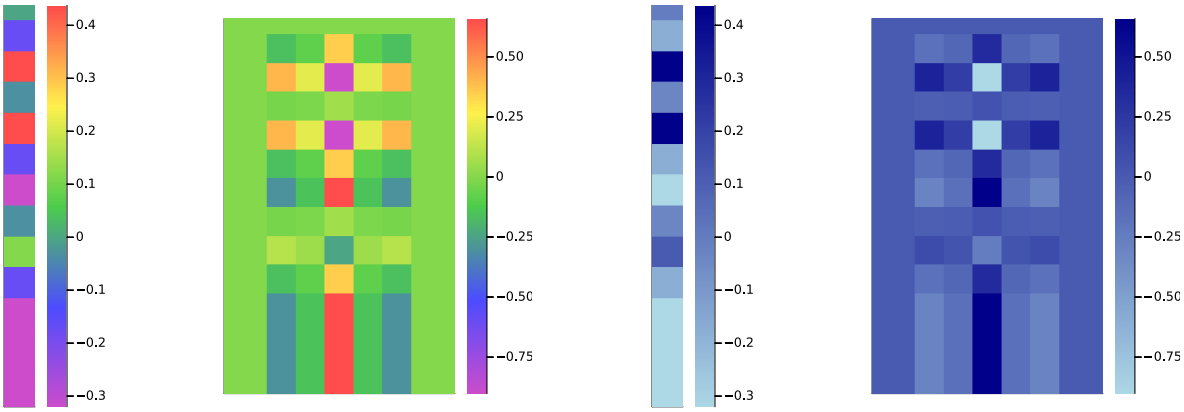


(c) Fleur de rang 3, échelles arc-en-ciel et monochrome.

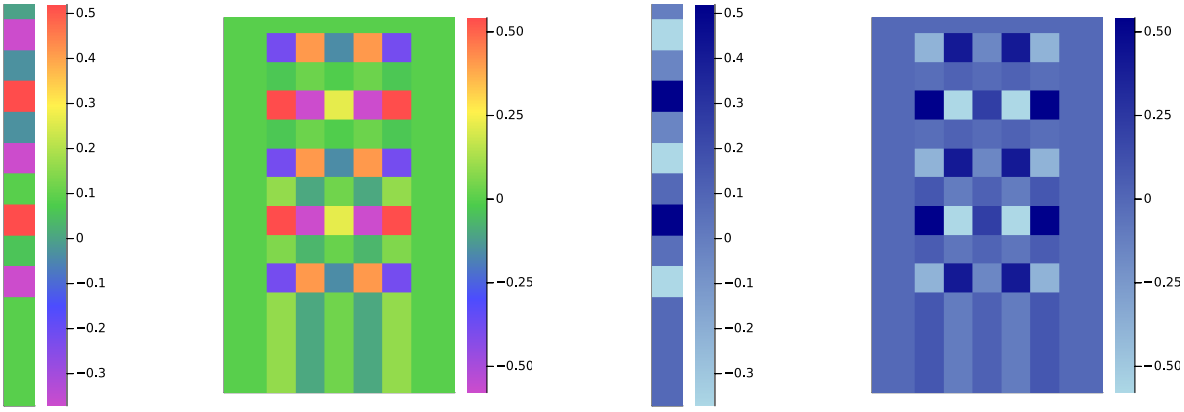
FIGURE 4.2 Approximations de rang k de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la SVD.



(a) Vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ et matrice de rang 1 $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$, échelles arc-en-ciel et monochrome.



(b) Vecteur singulier $\boldsymbol{u}_2$ et matrice de rang 1 $\sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}$, échelles arc-en-ciel et monochrome.



(c) Vecteur singulier $\boldsymbol{u}_3$ et matrice de rang 1 $\sigma_3 \boldsymbol{u}_3 \boldsymbol{v}_3^{\mathrm{T}}$, échelles arc-en-ciel et monochrome.

FIGURE 4.3 Matrices de rang 1 de la SVD de A (cf. équation (4.1)).

pour redonner à A sa forme précise. Mais on doit considérer avec attention la superposition de ces matrices de rang 1. Ainsi, il semble qu'on ne puisse pas attribuer de signification précise aux matrices de rang 1 individuelles, ni même aux matrices de rang k de manière générale.

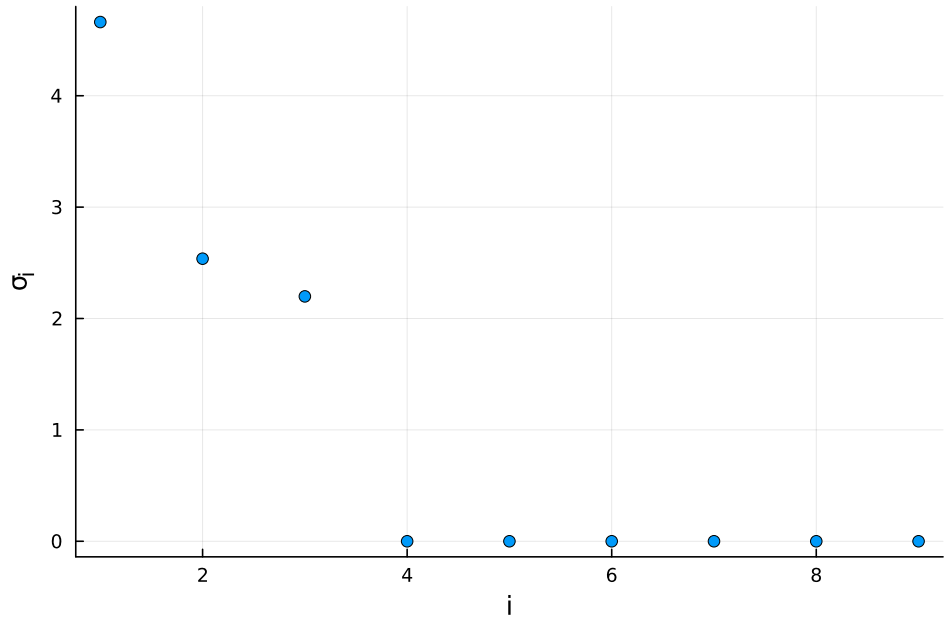
Cette application un peu naïve de la SVD ne sert qu'à illustrer son fonctionnement et nous aide à comprendre quelles questions on doit se poser. Puisque les matrices de la décomposition faite par la SVD (équation (4.2)) sont de rang 1, alors chacune de leurs colonnes est un multiple d'une seule colonne donnée par le vecteur singulier $\boldsymbol{u}_i$. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$ donnent les multiples de $\boldsymbol{u}_i$ qui composent chaque colonne de la matrice de rang 1 $\boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ et les valeurs singulières σ_i donnent le poids de chaque matrice de la combinaison linéaire (4.2). La distribution des valeurs singulières σ_i est illustrée à la figure 4.4. Pour un total de neuf valeurs singulières, seulement trois sont non nulles. Il n'est pas rare que certaines valeurs singulières soient petites en comparaison avec la première valeur singulière (elles sont toujours placées en ordre décroissant). Il est donc usuel d'utiliser une échelle logarithmique en ordonnée afin de bien montrer tous les ordres de grandeur des valeurs singulières. Il est plus pertinent ici d'utiliser une échelle linéaire en ordonnée puisque quatre des neuf valeurs singulières sont exactement nulles. On voit que deux autres valeurs singulières sont aussi nulles à la précision machine près. Ainsi, on a bien trois valeurs singulières non nulles. Il est pertinent de mentionner que la simplicité de notre exemple génère trois valeurs singulières qui sont toutes du même ordre de grandeur, ce qui ne se produit pas en général, comme on le verra plus tard.

4.2 Application de la NMF

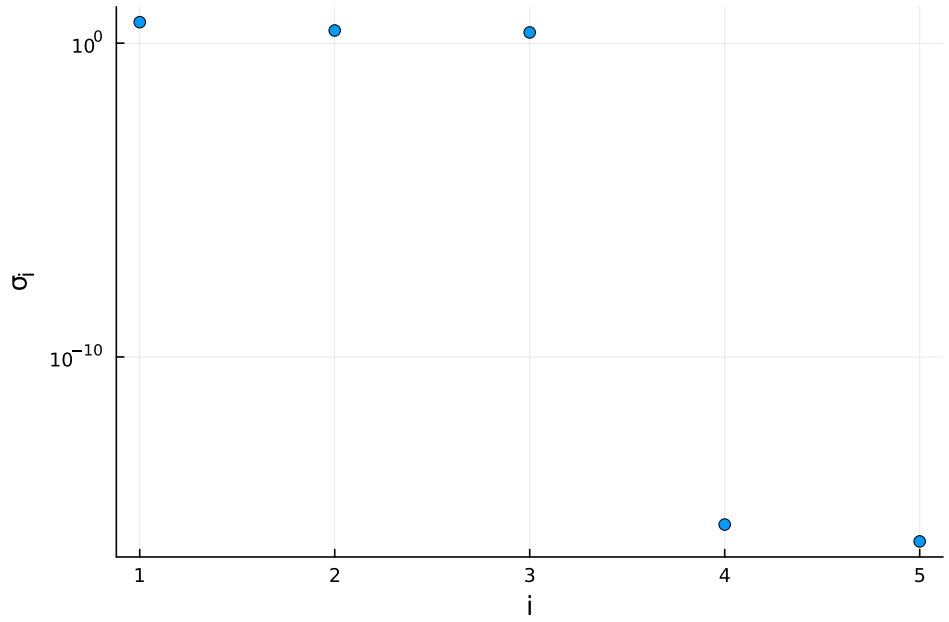
La NMF est une décomposition matricielle qui respecte la positivité des coefficients de A. Elle permet de décomposer la matrice A sous la forme

$$\begin{aligned} A &= WH + E_r \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}_1 \dots \boldsymbol{w}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{h}_r^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} + E_r \qquad (4.4) \\ &= \boldsymbol{w}_1 \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{w}_r \boldsymbol{h}_r^{\mathrm{T}} + E_r, \qquad (4.5) \end{aligned}$$

où E_r est l'erreur de représentation et où les coefficients des facteurs W et H sont positifs : $W_{ij} \geq 0$ et $H_{ij} \geq 0$. La SVD ne possède pas cette propriété et la conséquence est que les approximations de rank k peuvent prendre des valeurs négatives, ce qui est un problème si les coefficients de A représentent une quantité comme l'énergie. Contrairement à la SVD, dont l'existence et l'unicité sont toujours garanties, la NMF telle que décrite par l'équation (4.4) pourrait ne pas exister et elle n'est certainement pas unique. Il suffit de multiplier $\boldsymbol{w}_i$ par un nombre $\alpha > 0$, et diviser $\boldsymbol{h}_i$ par le même nombre α, pour s'en rendre compte.



(a) Échelle linéaire



(b) Échelle logarithmique

FIGURE 4.4 Distribution des valeurs singulières σ_i de la matrice A (cf. équation (4.1)).

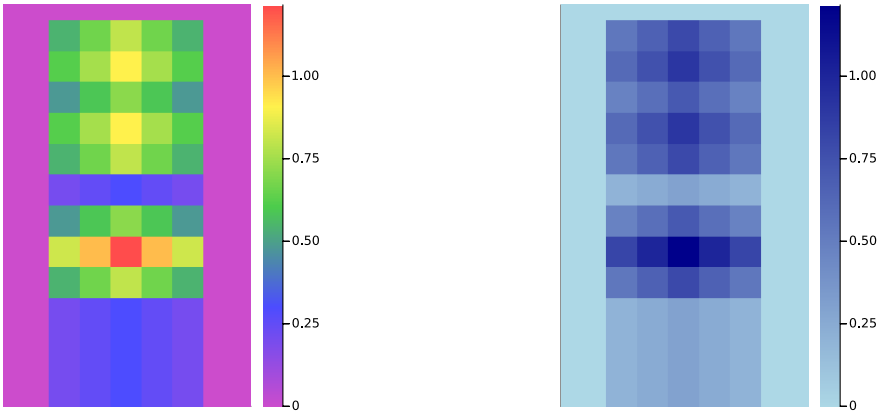
Lorsque $\|E_r\| = 0$, la NMF permet la décomposition $A = WH$ de même rang que la matrice A. On dit alors que la NMF est *exacte*. Lorsqu'une NMF exacte n'est pas possible, on peut chercher à minimiser l'erreur $\|E_r\| = \|A - WH\|$, comme le fait naturellement la SVD avec $\|A - U\Sigma V^{\mathrm{T}}\|$.

Ceci se produit par exemple lorsqu'on utilise une NMF de rang inférieur au rang de A. Ce problème d'optimisation pourrait ne pas être simple à résoudre et la qualité du résultat pourrait en souffrir. Il semble toutefois que ce risque soit justifié puisqu'on a pu voir que les matrices de rang 1 données par la SVD n'ont pas de signification physique claire, en partie à cause des valeurs négatives. Bien que la NMF ne possède pas les propriétés recherchées de la SVD, la contrainte de positivité est intéressante.

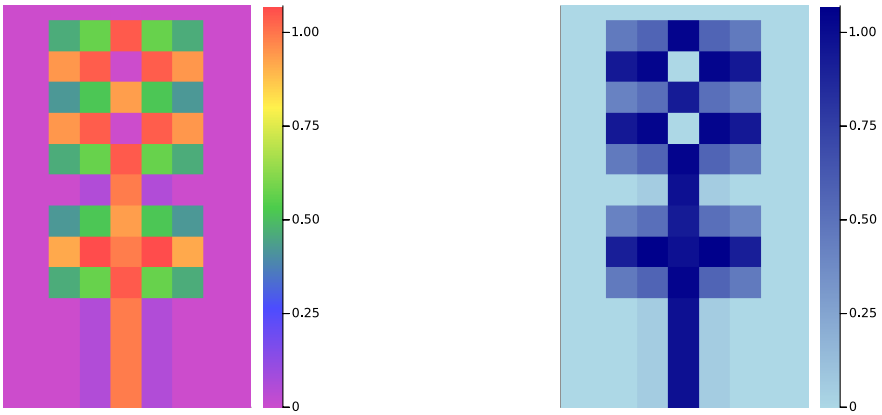
Les approximations de rang k de la matrice A obtenues par une NMF sont illustrées à la figure 4.5. On constate que les approximations de rang 1 et de rang 3 sont les mêmes que celles obtenues par la SVD. L'approximation de rang 2 obtenue par la NMF est près de la matrice A_2 obtenue par la SVD, mais elle en diffère quelque peu, comme on peut le voir à la figure 4.8. Cette différence est subtile mais importante puisqu'elle affecte l'interprétation des éléments de la décomposition. D'abord, on remarque que les résultats de la NMF demeurent à coefficients positifs, avec une valeur maximale de 1,07, alors que les valeurs des coefficients de la matrice de rang 2 obtenue par la SVD sont entre $-0{,}0923$ et 1,16.

Qualitativement, on voit que la partie centrale de la fleur est bien reconstruite par la NMF (tige et milieu de la tête), alors que la SVD introduit des fluctuations. Ceci s'explique par le fait que la SVD a comme seul « souci » la minimisation de $\|A - A_k\|$ (théorème d'Eckart-Young), alors que la NMF a comme objectif de maintenir la positivité des coefficients de W et de H. Cette différence d'objectif permet de donner une meilleure interprétation aux éléments de la décomposition de la NMF. Les différents éléments des NMF de rang 2 et 3 sont illustrées respectivement aux figures 4.6 et 4.7. On constate que la contrainte de positivité permet d'isoler des parties différentes de la matrice A dans chaque matrice de rang 1. Ceci veut aussi dire qu'on perd l'orthogonalité des vecteurs $\boldsymbol{w}_i$ et $\boldsymbol{h}_i$.

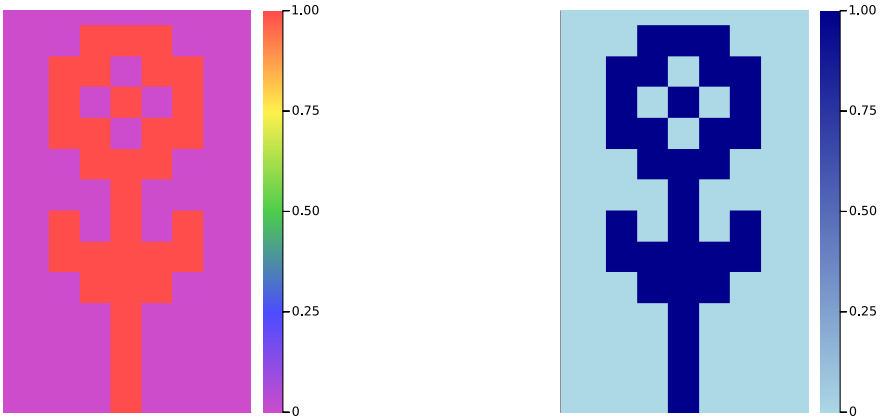
On peut expliquer pourquoi la NMF performe aussi bien pour notre exemple simple. D'abord, on constate que $\|A - A_2\| = 2{,}199$ dans le cas de la SVD alors que $\|A - WH\| = 2{,}213$ dans le cas de la NMF de rang 2. Les deux matrices de rang 2 donnent une erreur semblable tout en donnant l'avantage à la SVD, comme c'est prévu par la théorie (théorème d'Eckart-Young). Une explication pour ce résultat est donnée par le théorème de Perron-Frobenius qui nous assure que puisque A est une matrice positive, alors A_1 est positive avec des vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_1$ et $\boldsymbol{v}_1$ qui sont aussi positifs. On peut donc obtenir une NMF de rang 1 à l'aide de A_1. Le seul ennui est que $A - A_1$ n'est pas une matrice positive, pas plus que ne l'est $A - WH$. On ne peut donc pas compter sur A_1 telle que trouvée par la SVD pour une NMF de rang plus élevé que 1. C'est d'ailleurs ce qu'on constate en comparant A_1 aux matrices de rang 1 $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$ pour les NMF de rangs 2 et 3.



(a) Fleur de rang 1, échelles arc-en-ciel et monochrome.

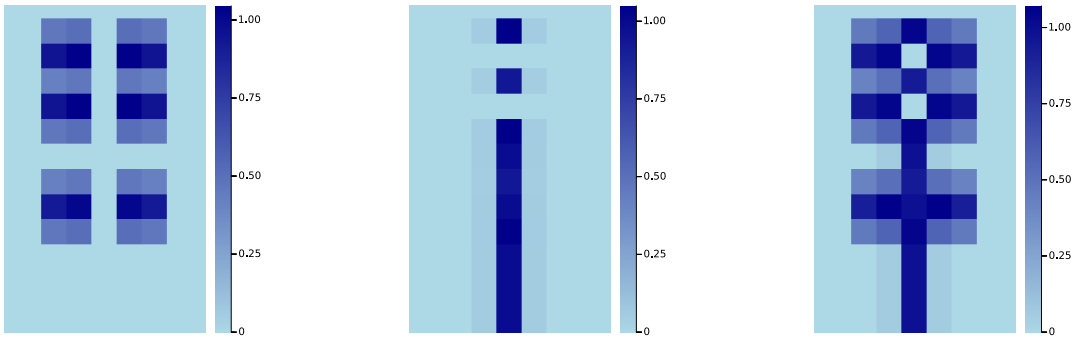


(b) Fleur de rang 2, échelles arc-en-ciel et monochrome.



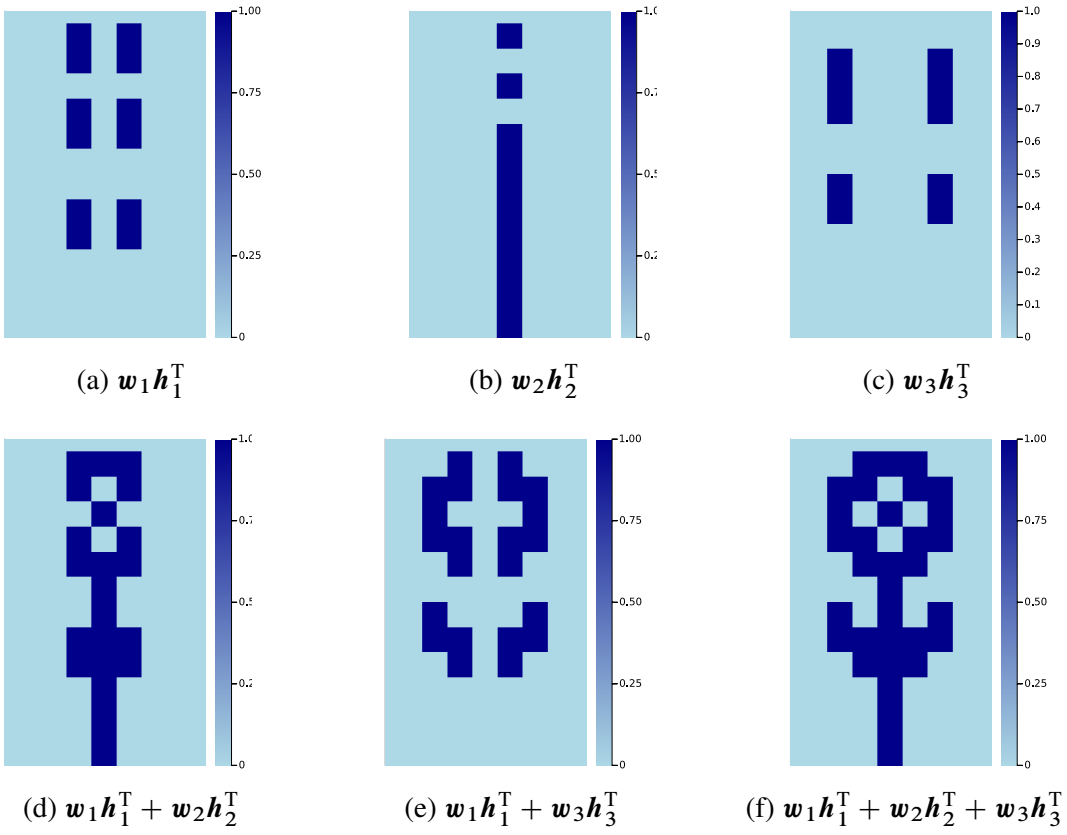
(c) Fleur de rang 3, échelles arc-en-ciel et monochrome.

FIGURE 4.5 Approximations de rang k de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la NMF.



(a) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$ (b) $\boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$ (c) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$

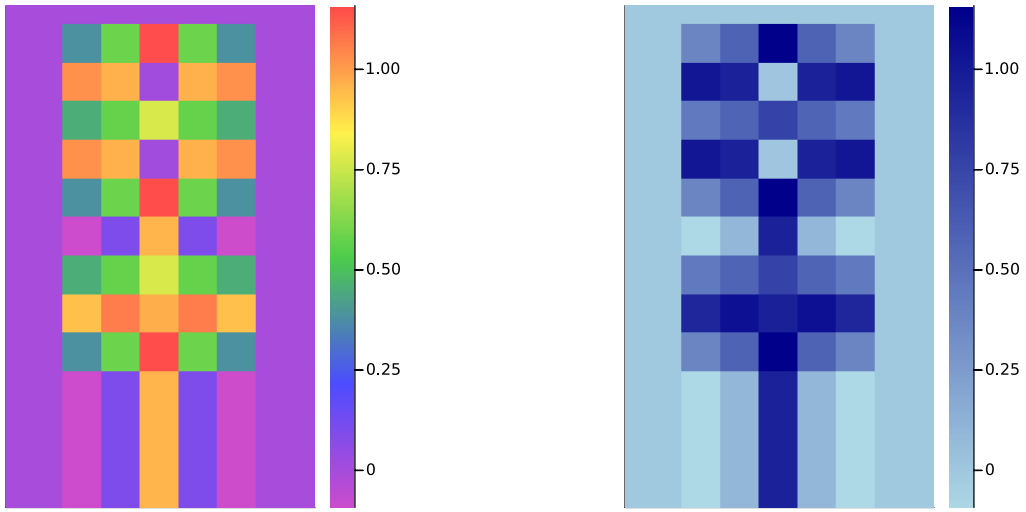
FIGURE 4.6 NMF de rang 2 de la matrice A (cf. équation (4.1)).



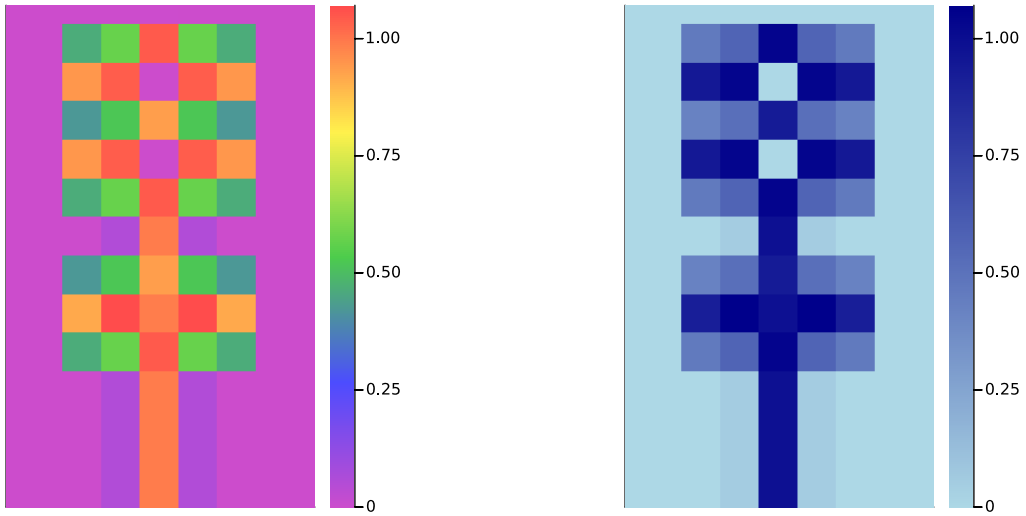
(a) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$ (b) $\boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$ (c) $\boldsymbol{w}_3\boldsymbol{h}_3^{\mathrm{T}}$

(d) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$ (e) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_3\boldsymbol{h}_3^{\mathrm{T}}$ (f) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_3\boldsymbol{h}_3^{\mathrm{T}}$

FIGURE 4.7 NMF de rang 3 de la matrice A (cf. équation (4.1)).



(a) SVD



(b) NMF

FIGURE 4.8 Comparaison de l'approximation de rang 2 de la matrice A obtenue par la SVD et la NMF de la matrice A (cf. équation (4.1)).

4.3 Application d'un filtre chapeau

Il peut être intéressant de comparer les matrices de rang k obtenues par la SVD et la NMF après l'application d'un filtre chapeau (cf. équations (3.4) et (3.7)). Dans le contexte de notre exemple simple, le filtre chapeau appliqué à A revient à remplacer chaque coefficient de A par la valeur moyenne des coefficients voisins. La largeur de filtre est alors donnée en nombre de coefficients le long d'une ligne (Δ_1) ou le long d'une colonne (Δ_2) de A. Le coefficient (i, j) de la matrice filtrée $\overline{A}$ s'écrit alors sous la forme

$$\overline{a}_{ij} = \frac{1}{\Delta_1}\sum_{k=0}^{2N_1}(a_{i-N_1+k,j} - a_{ij}) + \frac{1}{\Delta_2}\sum_{k=0}^{2N_2}(a_{i,j-N_2+k} - a_{ij}) + \frac{a_{ij}}{(\Delta_1 + \Delta_2 - 1)},$$

où $\Delta_1 = 2N_1 + 1$ et $\Delta_2 = 2N_2 + 1$ sont respectivement la largeur de filtre le long d'une ligne et le long d'une colonne de A. La figure 4.9 illustre la matrice filtrée $\overline{A}$ pour différentes largeurs de filtre. Aucun effort n'a été fait pour adapter le filtre chapeau aux premières et aux dernières lignes/colonnes de la matrice A. Ceci permet de mettre en évidence le problème de filtrage sur une région bornée. Ici, l'effet est d'autant plus prononcé que le filtre s'étend vers la frontière du domaine. On souligne toutefois que l'effet prend une importance exagérée à cause de la petite taille de la matrice A. Il faut aussi mentionner que le problème ne vient pas de la difficulté à trouver une solution à ce phénomène, mais plutôt du fait qu'un choix doit être fait, que la solution n'est probablement pas unique et que cette solution peut varier d'un problème à l'autre.

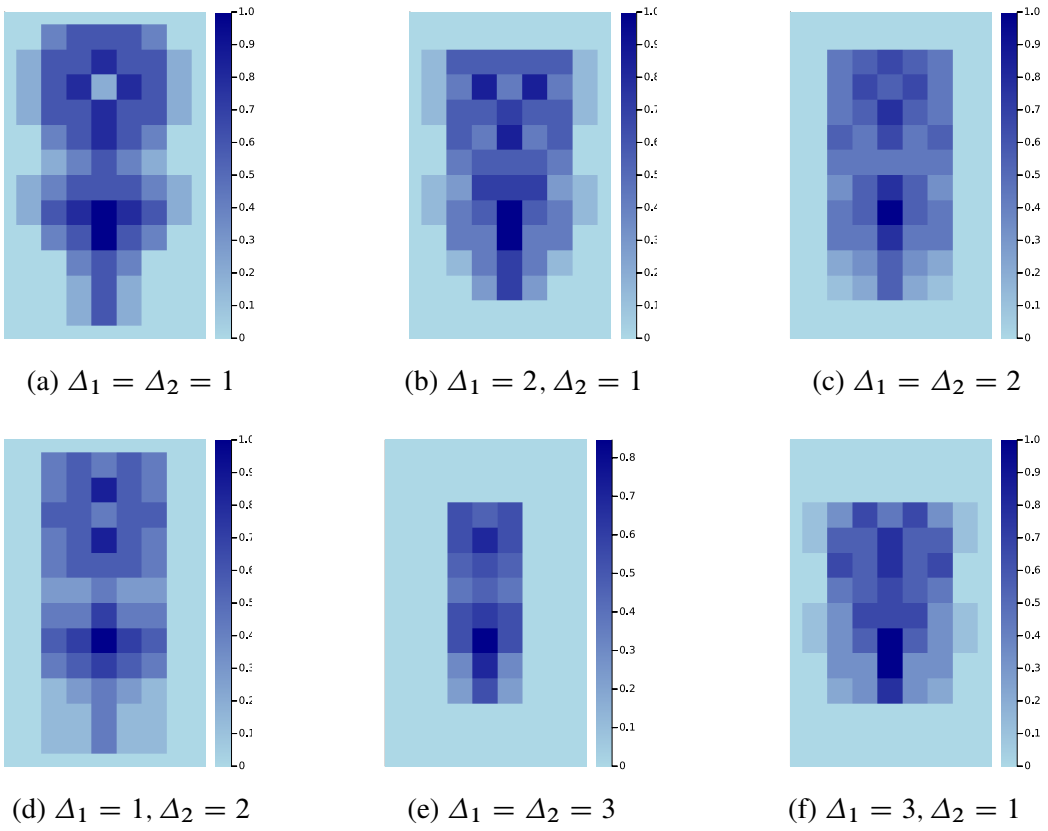
On constate aussi que la différence fondamentale entre un filtre et une décomposition matricielle est que le filtre modifie la nature de l'information contenue dans la matrice A. *En appliquant un filtre à une matrice, on peut en modifier le rang*. Pour s'en convaincre, il suffit d'appliquer le filtre chapeau à une matrice de rang 1,

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{pour obtenir} \quad \overline{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4.6}$$

L'opération de filtrage va « étendre » le coefficient non nul le long d'une seule ligne et d'une seule colonne créant ainsi une matrice de rang 2.

Cette différence est marquante puisque la SVD et la NMF ne possèdent pas cette propriété. Les décompositions matricielles permettent d'extraire de l'information d'une matrice A sous la forme d'approximations de rang inférieur ou égal au rang de A, mais elles ne permettent pas à elles seules

de modifier l'information contenue dans A. De plus, l'application répétée d'un filtre sur A peut continuer de modifier l'information qui y est contenue alors que la SVD de A_k produit les mêmes k vecteurs singuliers et les mêmes k valeurs singulières. La question est plus délicate pour la NMF, mais on comprend qu'avec la bonne formulation, la même conclusion qui s'applique à la SVD devrait aussi s'appliquer à la NMF.



(a) $\Delta_1 = \Delta_2 = 1$ (b) $\Delta_1 = 2, \Delta_2 = 1$ (c) $\Delta_1 = \Delta_2 = 2$

(d) $\Delta_1 = 1, \Delta_2 = 2$ (e) $\Delta_1 = \Delta_2 = 3$ (f) $\Delta_1 = 3, \Delta_2 = 1$

FIGURE 4.9 Application du filtre chapeau à la matrice A (cf. équation (4.1)), cas isotropes a), c), e) et anisotropes b), d), f).

4.4 Décompositions en blocs

On peut améliorer la décomposition matricielle de A en la subdivisant en blocs. Cette idée semble naturelle lorsqu'on remarque que la fleur dessinée par la matrice A contient deux sections de formes différentes. La moitié supérieure de la fleur est plutôt arrondie (la tête de la fleur) alors que la moitié inférieure est plutôt allongée (la tige de la fleur).

D'ailleurs, cette différence entre les deux parties de la matrice pourrait expliquer pourquoi les approximations de rang 1 et 2 de la SVD introduisent autant de coefficients non nuls dans la moitié

inférieure de A (près de la tige), comme on peut le voir à la figure 4.2. En utilisant une matrice de rang 1, la SVD doit trouver le compromis optimal afin de représenter toutes les caractéristiques de la fleur à l'aide des multiples d'une seule colonne de coefficients (voir la figure 4.3). Si on subdivise A en deux blocs, un bloc B_1 qui contient les 6 premières lignes et un autre bloc B_2 qui contient les 8 dernières lignes, alors on peut s'attendre à une meilleure décomposition puisqu'on peut maintenant utiliser des paires de sous-matrices de rang 1 pour décrire A :

$$A = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1 \Sigma_1 V_1^{\mathrm{T}} \\ U_2 \Sigma_2 V_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1^1 \boldsymbol{u}_1^1 (\boldsymbol{v}_1^1)^{\mathrm{T}} \\ \sigma_2^1 \boldsymbol{u}_2^1 (\boldsymbol{v}_2^1)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma_1^2 \boldsymbol{u}_1^2 (\boldsymbol{v}_1^2)^{\mathrm{T}} \\ \sigma_2^2 \boldsymbol{u}_2^2 (\boldsymbol{v}_2^2)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} + \cdots + \begin{bmatrix} \sigma_1^r \boldsymbol{u}_1^r (\boldsymbol{v}_1^r)^{\mathrm{T}} \\ \sigma_2^r \boldsymbol{u}_2^r (\boldsymbol{v}_2^r)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}, \tag{4.7}$$

où on a supposé que $\mathrm{rang}(B_i) = r$. Puisque $\mathrm{rang}(B_i) \leq r$, alors on peut simplement poser $\sigma_{i,j} = 0$ aux endroits appropriés dans l'équation (4.7). Les vecteurs singuliers peuvent donc être différents pour chaque sous-matrice de rang 1 de manière à mieux représenter la matrice A. On note que la décomposition (4.7) n'est pas équivalente à la décomposition (4.2). Les valeurs singulières sont illustrées à la figure 4.10. La figure 4.11 illustre les matrices de rang 1, de rang 2 et de rang 3 par blocs obtenues par la SVD faites avec la subdivision décrite ci-haut. On constate que les matrices de rang 1 et de rang 2 par blocs,

$$\begin{bmatrix} \sigma_1^1 \boldsymbol{u}_1^1 (\boldsymbol{v}_1^1)^{\mathrm{T}} \\ \sigma_2^1 \boldsymbol{u}_2^1 (\boldsymbol{v}_2^1)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{bmatrix} \sigma_1^1 \boldsymbol{u}_1^1 (\boldsymbol{v}_1^1)^{\mathrm{T}} + \sigma_1^2 \boldsymbol{u}_1^2 (\boldsymbol{v}_1^2)^{\mathrm{T}} \\ \sigma_2^1 \boldsymbol{u}_2^1 (\boldsymbol{v}_2^1)^{\mathrm{T}} + \sigma_2^2 \boldsymbol{u}_2^2 (\boldsymbol{v}_2^2)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix},$$

sont respectivement de rang 2 et de rang 3 et bénéficient ainsi d'une augmentation du rang lorsque la SVD est faite par blocs. De plus, pour notre exemple, on a bien que $\mathrm{rang}(B_i) = \mathrm{rang}(A) = 3$. Ce qui est amusant avec cet exemple, c'est qu'on a trouvé comment utiliser la SVD pour générer une matrice de rang 3 qui n'arrive pas à reproduire exactement une matrice de rang 3. Il y a donc deux positions qu'on puisse prendre.

On procède de la même manière pour faire une NMF par blocs :

$$A = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_1 H_1 \\ W_2 H_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}_1^1 (\boldsymbol{h}_1^1)^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{w}_2^1 (\boldsymbol{h}_2^1)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}_1^2 (\boldsymbol{h}_1^2)^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{w}_2^2 (\boldsymbol{h}_2^2)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} + \cdots + \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}_1^r (\boldsymbol{h}_1^r)^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{w}_2^r (\boldsymbol{h}_2^r)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}. \tag{4.8}$$

Les matrices de rang k par blocs sont illustrées à la figure 4.12. Les éléments de la NMF de rang 2 par blocs sont affichés à la figure 4.13. Les éléments de la NMF de rang 3 par blocs sont affichés à la figure 4.14. La comparaison entre les approximations de rang 2 par blocs obtenues par la SVD et la NMF est illustrée à la figure 4.15. On constate que cette fois ci, la SVD et la NMF par blocs donnent des résultats très similaires. Les approximations de rang 1 et de rang 3 par blocs sont identiques et les approximations de rang 2 par blocs affichent une différence relative de $0{,}73 \times 10^{-2}$ en norme de Frobenius.

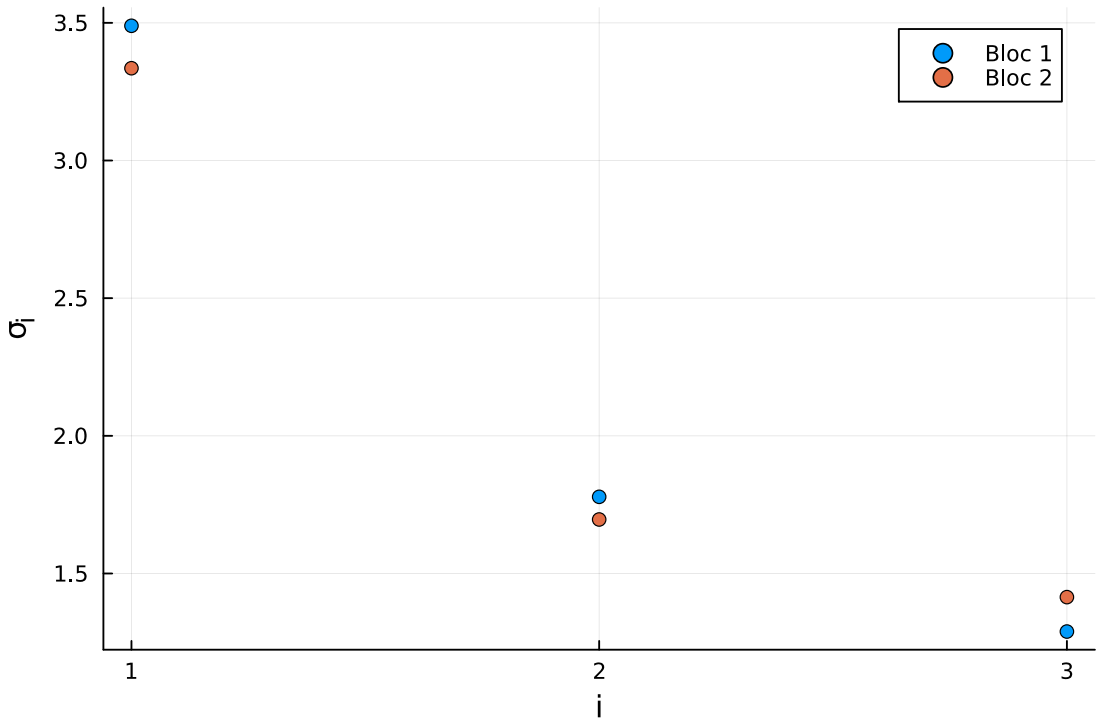
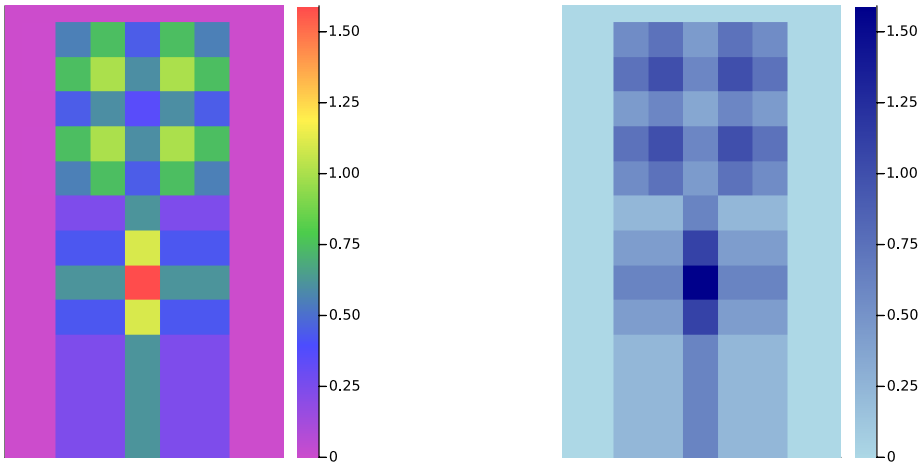
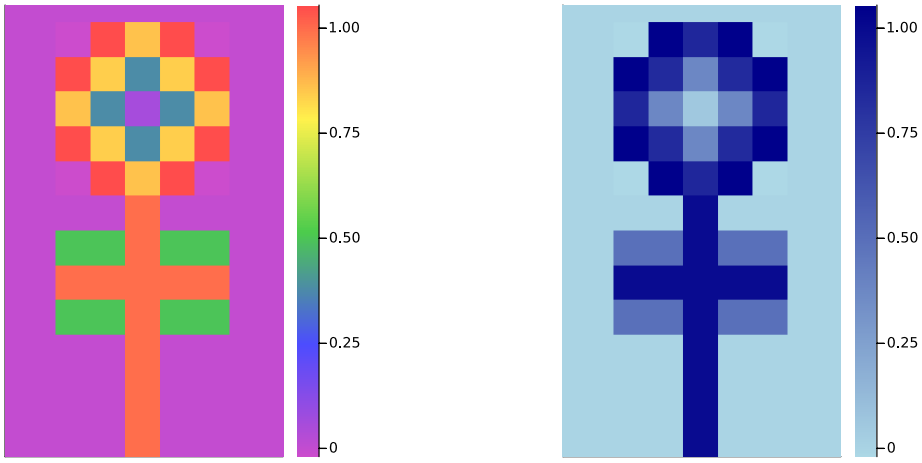


FIGURE 4.10 Distribution des valeurs singulères σ_i de la SVD par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)).

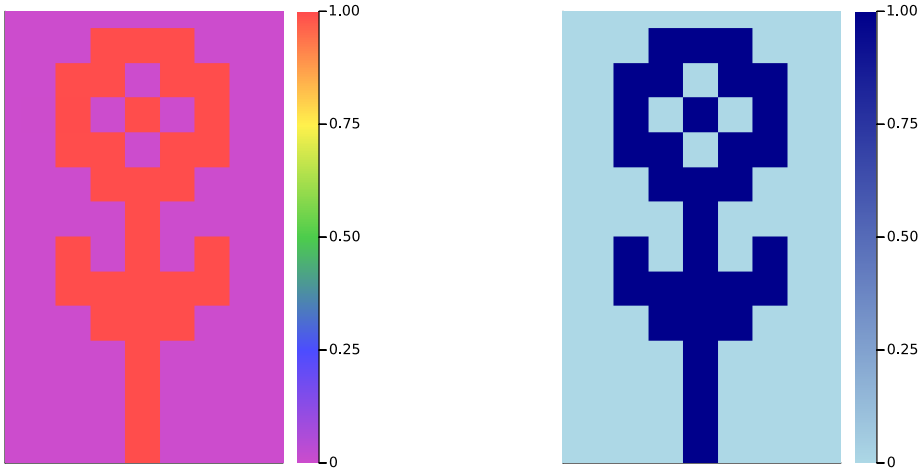
Cette approche par blocs permet de découpler la décomposition des sous-matrices tout en travaillant avec des matrices de plus petite taille que la matrice de départ. Rien ne nous empêche de subdiviser A davantage. Dans le contexte du dessin d'une fleur simple, cette subdivision est apparue naturellement comme une astuce qui améliore le résultat de la décomposition en se basant sur une visualisation des coefficients de A. Ce type d'approche est irréaliste pour des matrices de très grande taille, surtout si les données sont complexes et qu'on ne sait pas quelles sont les caractéristiques à mettre en évidence par une subdivision. Néanmoins, cette question de subdivision devient tout de même incontournable lorsqu'on manipule un ensemble de données de plusieurs variables puisqu'on a tendance à naturellement organiser les données en sous-matrices, comme on le verra à la section 5.



(a) Fleur de rang 1 par blocs, échelles arc-en-ciel et monochrome

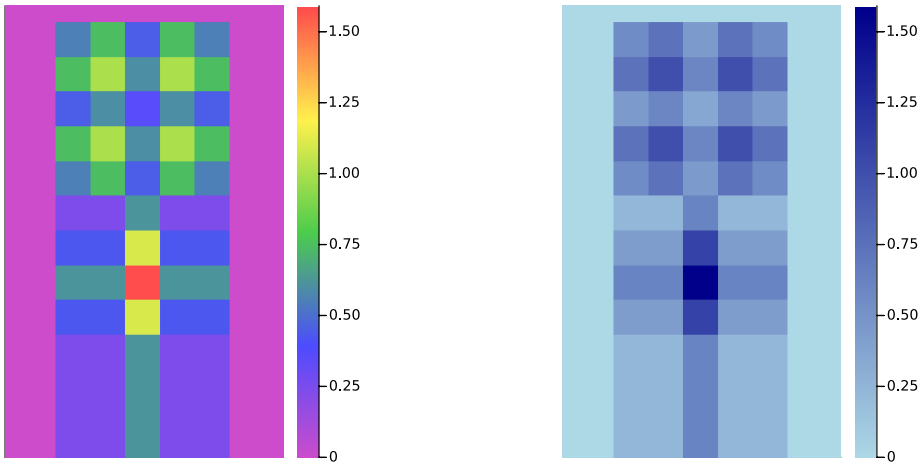


(b) Fleur de rang 2 par blocs, échelles arc-en-ciel et monochrome

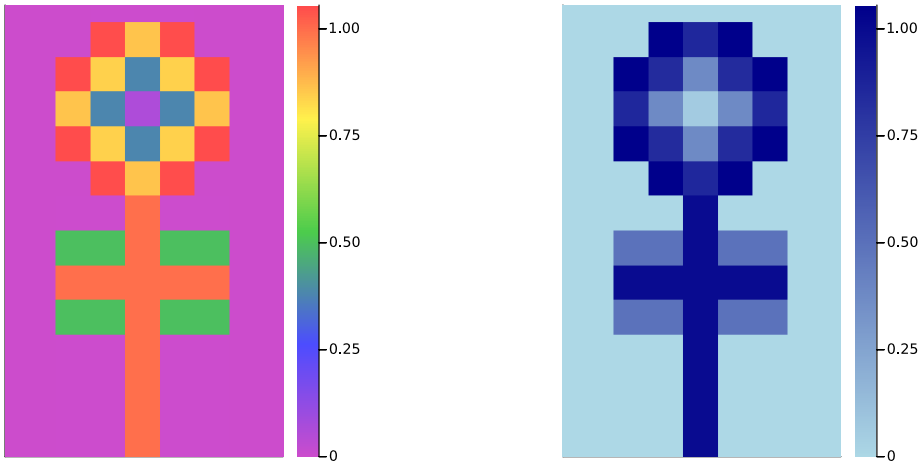


(c) Fleur de rang 3 par blocs, échelles arc-en-ciel et monochrome

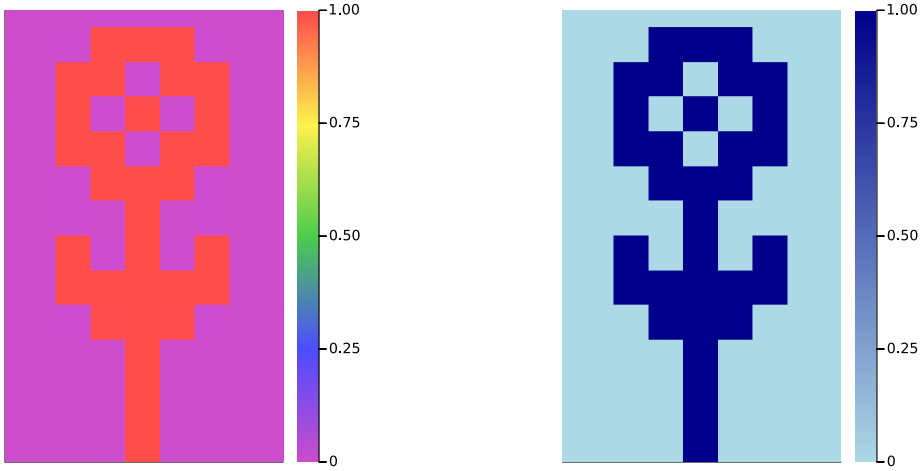
FIGURE 4.11 Approximations de rang k par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la SVD.



(a) Fleur de rang 1 par blocs, échelles arc-en-ciel et monochrome

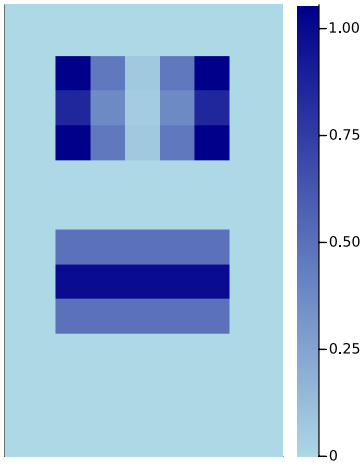


(b) Fleur de rang 2 par blocs, échelles arc-en-ciel et monochrome

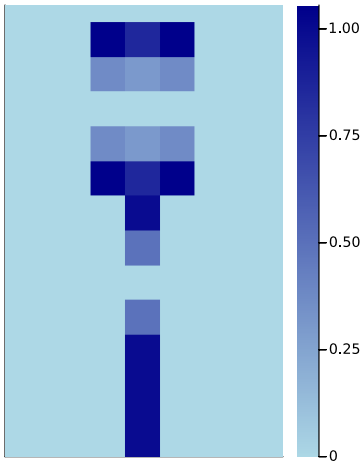


(c) Fleur de rang 3 par blocs, échelles arc-en-ciel et monochrome

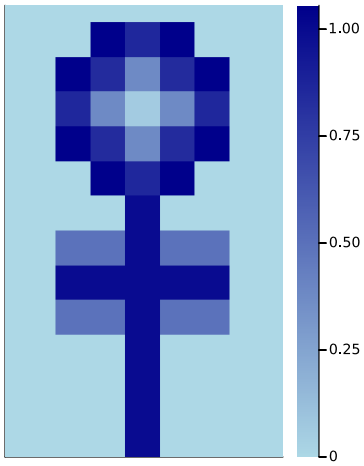
FIGURE 4.12 Approximations de rang k par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)) données par la NMF.



(a) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$

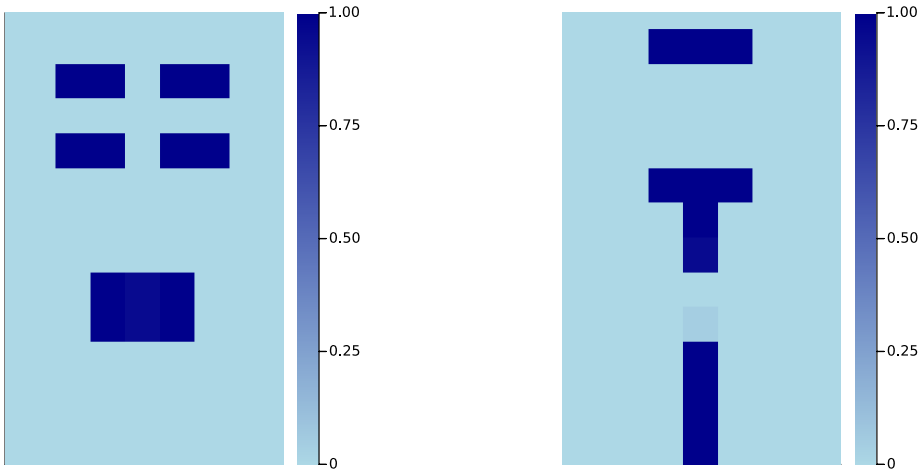


(b) $\boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$

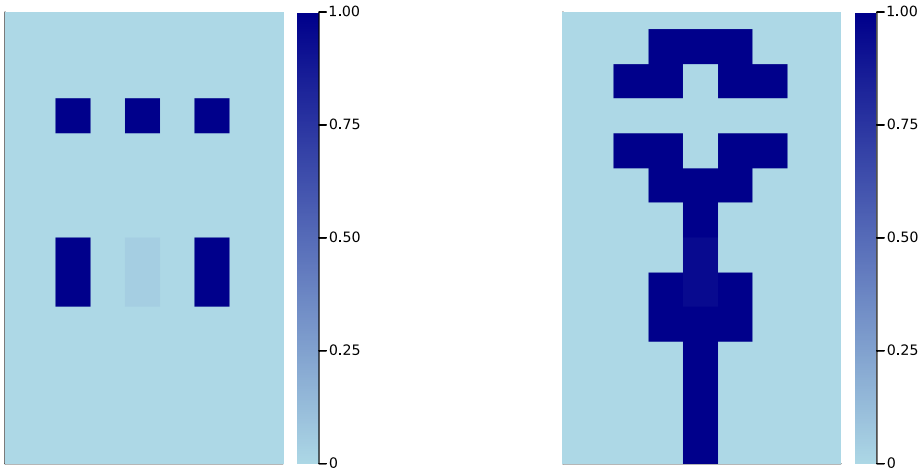


(c) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$

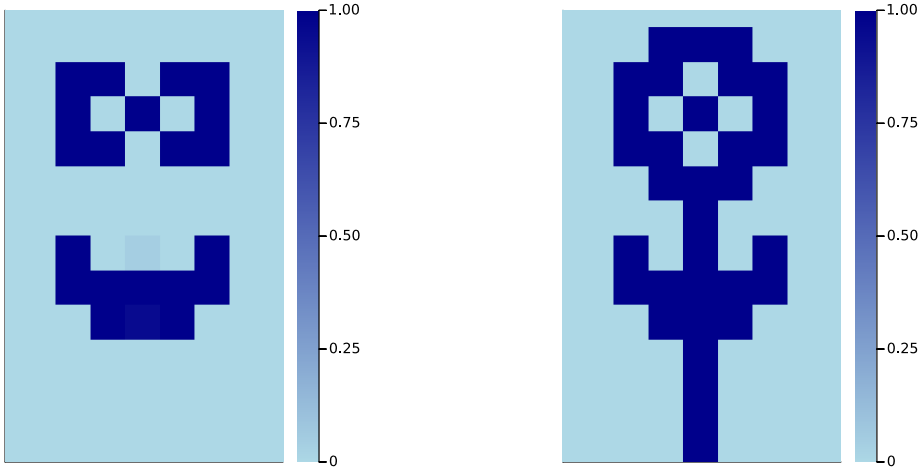
FIGURE 4.13 NMF de rang 2 par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)).



(a) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$ (b) $\boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$

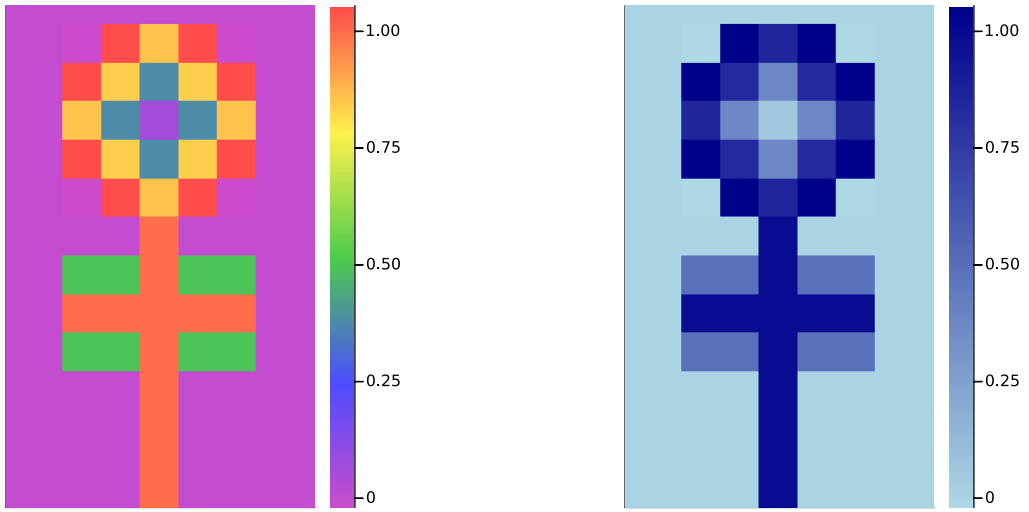


(c) $\boldsymbol{w}_3\boldsymbol{h}_3^{\mathrm{T}}$ (d) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}}$

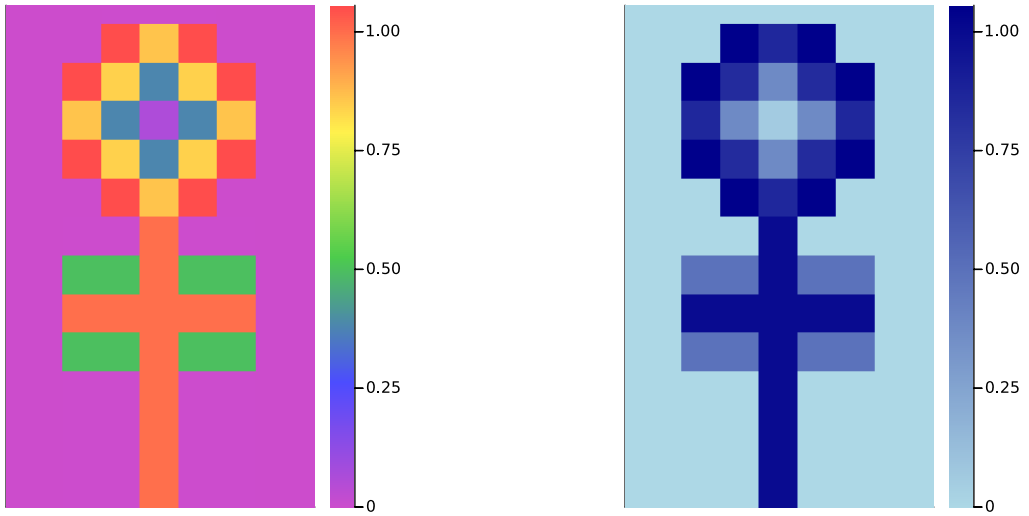


(e) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_3\boldsymbol{h}_3^{\mathrm{T}}$ (f) $\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_2\boldsymbol{h}_2^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{w}_3\boldsymbol{h}_3^{\mathrm{T}}$

FIGURE 4.14 NMF de rang 3 par blocs de la matrice A (cf. équation (4.1)).



(a) SVD



(b) NMF

FIGURE 4.15 Comparaison des approximations de rang 2 de la matrice A (cf. équation (4.1)) par blocs obtenue par la SVD et la NMF.

4.5 En résumé

L'exercice auquel on vient de se livrer nous a permis de comparer naïvement la SVD et la NMF. On a pu voir également que leur effet diffère de l'application d'un filtre classique comme le filtre chapeau et on comprend que la SVD et la NMF ne sont pas a priori des filtres au sens classique. On a vu que bien que la SVD possède un ensemble de propriétés recherchées, elle ne peut pas donner une décomposition avec un sens physique précis. À l'inverse, bien que la NMF ne possède pas les propriétés de la SVD, elle permet d'obtenir une décomposition ayant une interprétation physique plus claire en conservant la positivité des coefficients de la matrice A.

CHAPITRE 5 APPLICATION DE LA SVD ET DE LA NMF AUX DONNÉES EXPÉRIMENTALES D'UN JET

Afin d'obtenir un portrait plus réaliste de l'application de la SVD et de la NMF à un écoulement turbulent, on propose d'utiliser les données expérimentales d'un jet confiné. Ce type d'écoulement est suffisamment complexe pour faire ressortir des éléments pertinents à notre étude, mais suffisamment simple pour être accessible. C'est d'ailleurs un problème bien connu qui est souvent utilisé comme problème type pour présenter les écoulements turbulents.

Les données ont été obtenues à l'aide d'un système de vélocimétrie par image de particules au Laboratoire de Dynamique des Fluides (LADYF) de Polytechnique Montréal par Jérôme Vétel [80]. Les points de mesure sont espacés uniformément dans un plan parallèle à l'axe du jet, tel qu'illustré à la figure 5.1, ce qui permet de traiter les données sous forme matricielle sans en déformer la géométrie. La grille de données compte 39 points de mesure dans l'axe perpendiculaire au jet et 71 points de mesure le long de l'axe du jet, pour un total de 2769 points de mesure. La variable mesurée est donc la vitesse avec deux composantes, une composante perpendiculaire au jet (axe vertical) et l'autre composante parallèle au jet (axe horizontal). La figure 5.2 illustre ces deux composantes ainsi que leur résultante dans le plan de mesure. Le jet s'écoule de la gauche vers la droite et on constate que la majorité de l'énergie du jet se situe dans la composante horizontale. Bien que ce portrait bidimensionnel du jet soit incomplet, car l'écoulement du jet est tridimensionnel, il suffira pour l'instant aux besoins de notre étude et il nous évitera même de devoir gérer certains problèmes techniques associés à la décomposition d'un ensemble de mesures tridimensionnelles.

Pour être en mesure d'appliquer une décomposition matricielle, on doit déterminer la matrice A qui sera décomposée. On rappelle qu'il y a une restriction pour une NMF : les coefficients de A doivent être non négatifs. Les données sont naturellement subdivisées en deux matrices de 39 lignes et de 71 colonnes. Chaque sous-matrice correspond à une des deux composantes du champ de vitesse. Notons B_1 la matrice qui contient les mesures de la composante parallèle à l'axe du jet et B_2 la matrice qui contient les mesures de la composante perpendiculaire à l'axe du jet. Les

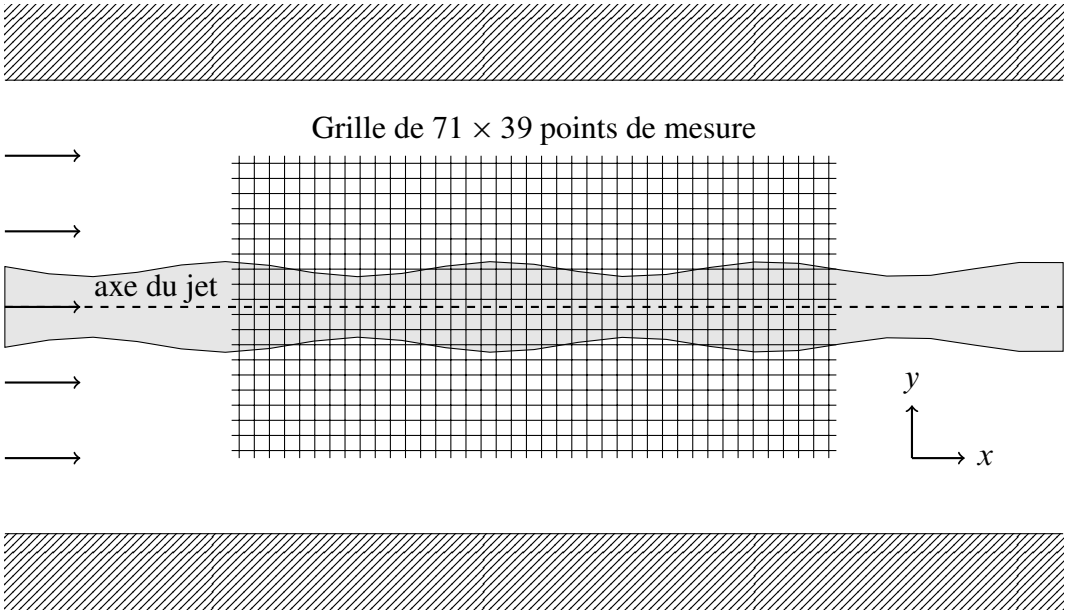


FIGURE 5.1 Schéma de la répartition des points de mesure du jet turbulent confiné.

décompositions qui nous intéressent sont :

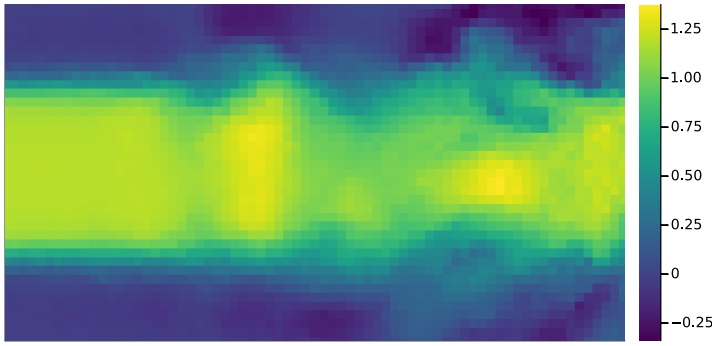
$$\text{la SVD par blocs :} \qquad B_\ell = \sum_{i=1}^{r_l} \sigma_i^\ell \boldsymbol{u}_i^\ell (\boldsymbol{v}_i^\ell)^{\mathrm{T}} \quad \text{pour} \quad \ell = 1, 2\,; \tag{5.1}$$

$$\text{la SVD monolithique :} \qquad A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \quad \text{avec} \quad A = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix}; \tag{5.2}$$

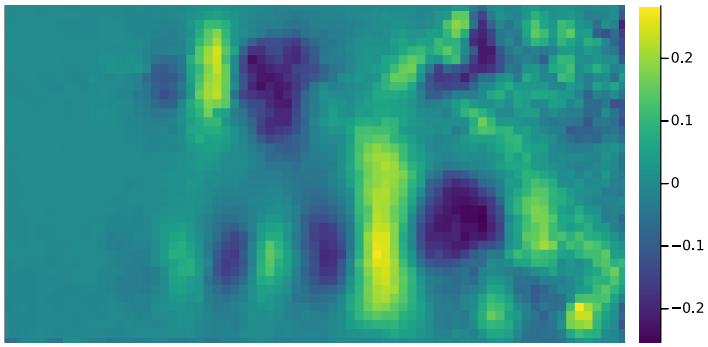
$$\text{la SVD de l'énergie :} \qquad A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \quad \text{avec} \quad a_{ij} = (b_{ij}^1)^2 + (b_{ij}^2)^2 \geq 0; \tag{5.3}$$

$$\text{la NMF de l'énergie :} \qquad A = \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}} \quad \text{avec} \quad a_{ij} = (b_{ij}^1)^2 + (b_{ij}^2)^2 \geq 0, \tag{5.4}$$

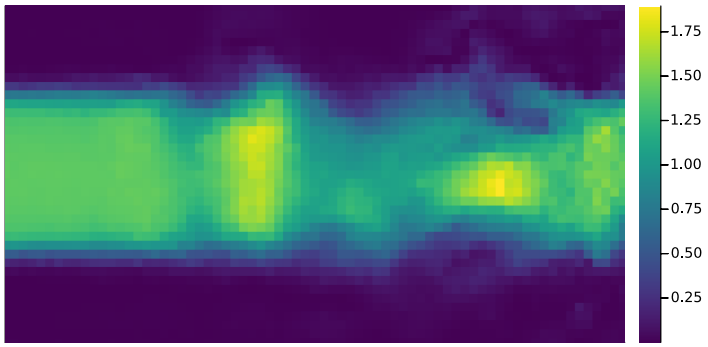
où a_{ij}, b_{ij}^1 et b_{ij}^2 sont respectivement les coefficients d'indices (i, j) de A, B_1 et B_2. Contrairement à l'exemple de la section 4.4, la question n'est pas de savoir comment subdiviser A pour améliorer sa décomposition, mais plutôt comment combiner B_1 et B_2 pour obtenir la meilleure matrice A à décomposer. Dans ce qui suit, on applique les décompositions décrites par les équations (5.1), (5.2), (5.3) et (5.4).



(a) B_1 : composante parallèle à l'axe du jet



(b) B_2 : composante perpendiculaire à l'axe du jet



(c) Résultante des deux composantes

FIGURE 5.2 Mesures du champ de vitesse du jet confiné.

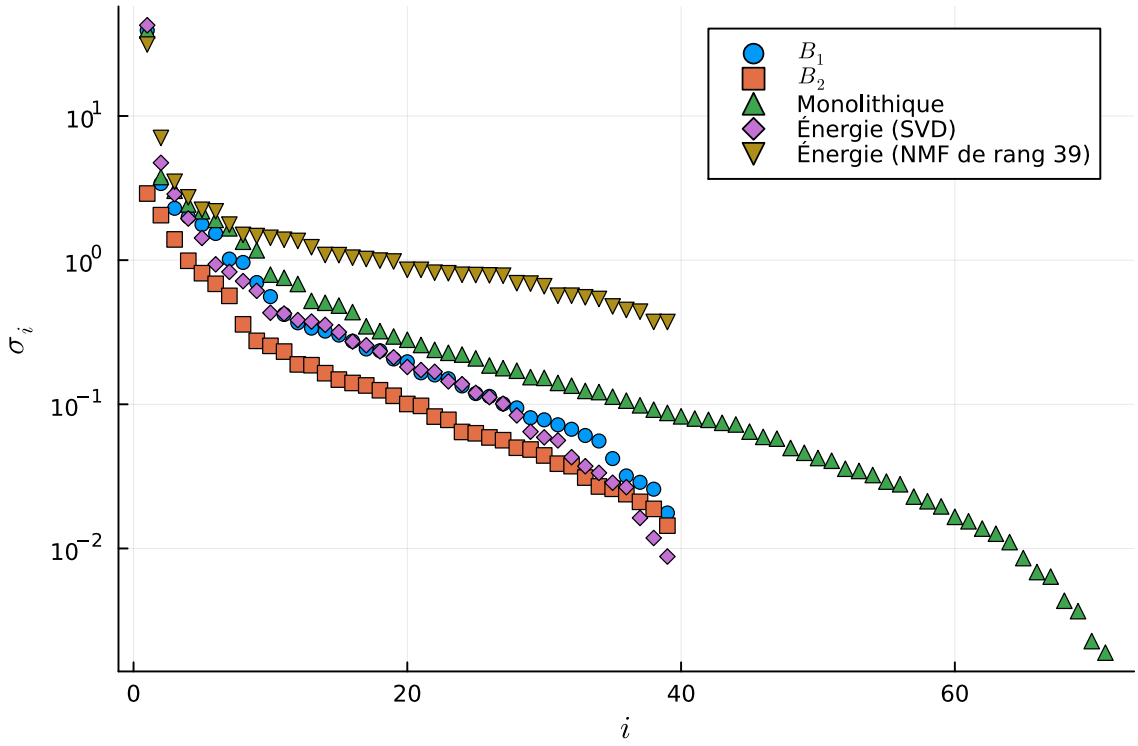


FIGURE 5.3 Valeurs singulières des différentes SVD (cf. équations (5.1) à (5.3)) et coefficients α_i de la NMF de rang 39 (cf. équation (5.4)).

5.1 SVD des blocs B_1 et B_2

L'équation (5.1) propose d'appliquer la SVD sur les blocs B_1 et B_2 individuellement. Le souci avec cette stratégie est qu'on ne fait alors que déplacer le problème qui revient alors à savoir comment combiner les matrices de rang 1 obtenues des SVD individuelles de B_1 et de B_2. Les blocs B_1 et B_2 sont illustrés aux figures 5.2a et 5.2b. Les valeurs singulières sont illustrées à la figure 5.3 et les matrices $\sigma_i^\ell \boldsymbol{u}_i^\ell (\boldsymbol{v}_i^\ell)^{\mathrm{T}}$ de rang 1 sont illustrées aux figures 5.4 et 5.5. Les matrices de rang k obtenues avec la SVD des blocs B_1 et B_2 sont illustrées aux figures 5.6 et 5.7.

On constate que $\sigma_1^1 \boldsymbol{u}_1^1 (\boldsymbol{v}_1^1)^{\mathrm{T}}$ est la seule matrice de rang 1 qui prend une forme similaire au jet. Les matrices $\sigma_1^2 \boldsymbol{u}_1^2 (\boldsymbol{v}_1^2)^{\mathrm{T}}$ et $\sigma_2^2 \boldsymbol{u}_2^2 (\boldsymbol{v}_2^2)^{\mathrm{T}}$ semblent bien capturer les caractéristiques de la matrice B_2. Chacune des autres matrices de rang 1 ne semblent pas offrir de caractéristiques claires qu'on pourrait attribuer au jet ou aux matrices B_1 et B_2. En combinant les matrices de rang 1, on obtient les approximations de rang k illustrées aux figures 5.6 et 5.7 qui représentent les composantes du jet avec plus de détail lorsque k devient plus élevé.

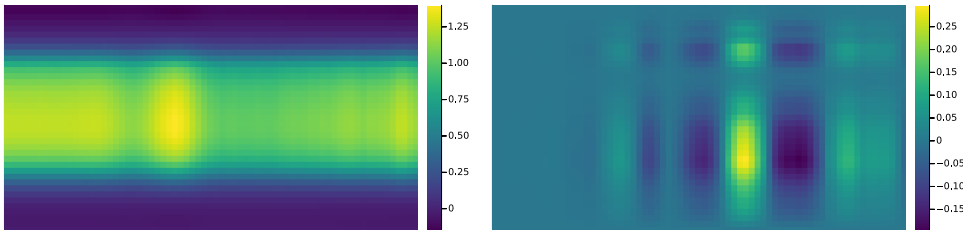
La première matrice $\sigma_1^1 \boldsymbol{u}_1^1 (\boldsymbol{v}_1^1)^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de B_1 se distingue des autres parce qu'on peut représenter une partie importante du jet à l'aide d'un seul vecteur $\boldsymbol{u}_1^1$, comme le témoigne l'ordre de grandeur

de la première valeur singulière σ_1^1 de B_1. Ceci est possible parce que les mesures sont prises dans un plan de l'axe du jet et que les données contenues dans les colonnes de B_1 sont alignées avec l'axe perpendiculaire au jet. Ainsi, la matrice B_2 ne possède pas de première valeur singulière qui soit un ordre de grandeur au-dessus des ses autres valeurs singulières, ce qui semble confirmer que les données contenues dans B_2 n'ont pas de caractéristiques dominantes comme c'est le cas pour les données de B_1.

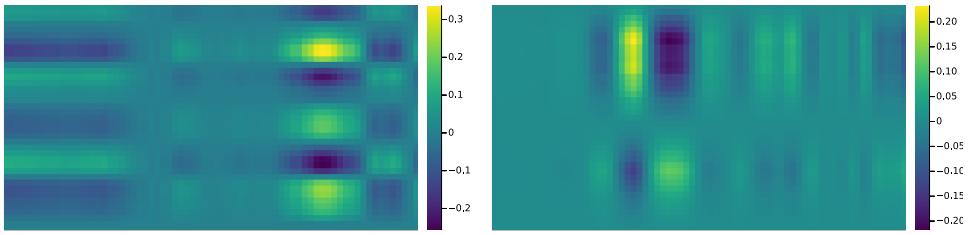
5.2 SVD monolithique

L'équation (5.2) propose de relier la SVD de B_1 à celle de B_2 en créant une seule matrice de dimension $m = 78$ lignes par $n = 71$ colonnes. Cette configuration n'est pas la seule possible. On peut aussi prendre $A = [B_1 \ B_2]$ afin d'obtenir une matrice de dimension $m = 39$ lignes par $n = 142$ colonnes. On réalise toutefois que le rang de A est limité par sa taille. Plus précisément, on a que $r \leq \min(m, n)$. On a donc le choix entre une matrice pour laquelle $r \leq 71$ ou une autre pour laquelle $r \leq 39$. Puisque la configuration décrite à l'équation (5.2) est celle qui limite le moins le rang de A, c'est celle qu'on retient. Ceci permet d'obtenir une SVD plus riche. En empilant les deux blocs verticalement, la SVD de A force une SVD simultanée des deux blocs. Bien que les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ possèdent deux fois plus de composantes que les vecteurs singuliers de la SVD des blocs individuels, ceci donne assez de liberté pour représenter simultanément $\boldsymbol{u}_i^1$ et $\boldsymbol{u}_i^2$. Toutefois, ce sont les vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$ qui limitent cette SVD monolithique puisqu'ils ont autant de composantes que $\boldsymbol{v}_i^1$ ou $\boldsymbol{v}_i^2$ et ils ne peuvent donc pas les représenter simultanément. Cette limitation veut dire qu'on doit s'attendre à ce que la SVD monolithique diffère de la SVD des blocs individuels B_1 et B_2. On aura donc un seul ensemble de 71 valeurs singulières puisque le nombre de colonnes est plus limitant que le nombre de lignes, 78 dans ce cas. Les valeurs singulières sont illustrées à la figure 5.3 et les matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 sont illustrées à la figure 5.8. Les matrices de rang k obtenues par la SVD de A sont illustrées à la figure 5.9.

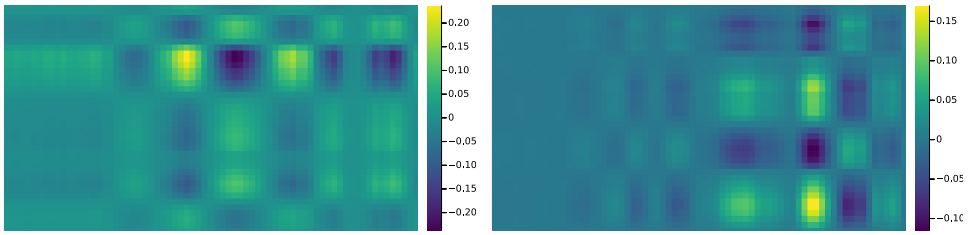
On constate des résultats similaires à la SVD des blocs individuels B_1 et B_2, mais les caractéristiques de B_2 sont moins bien représentées. Il semble donc que la stratégie monolithique ne présente pas d'avantages significatifs par rapport à la SVD des blocs individuels B_1 et B_2.



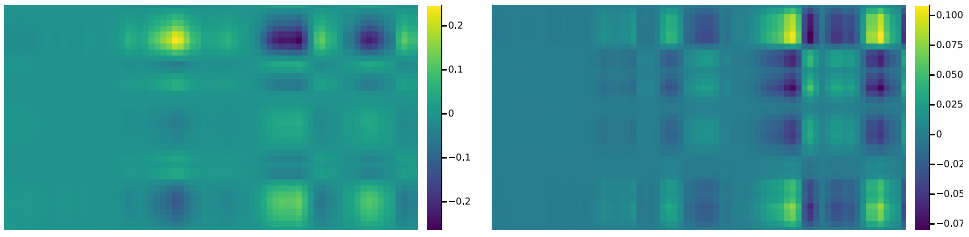
(a) $B_1 : i = 1$ (b) $B_2 : i = 1$



(c) $B_1 : i = 2$ (d) $B_2 : i = 2$

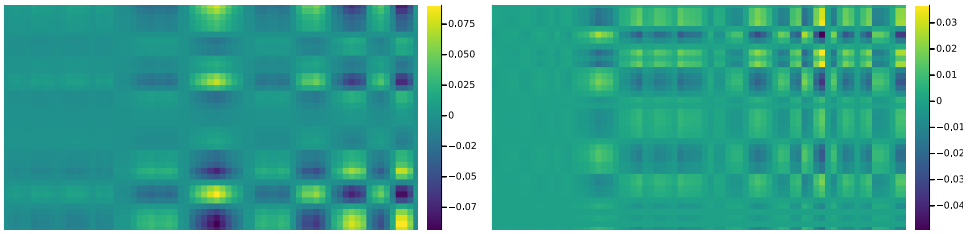


(e) $B_1 : i = 3$ (f) $B_2 : i = 3$

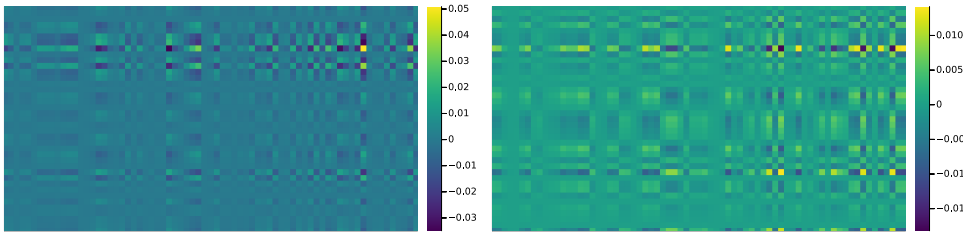


(g) $B_1 : i = 4$ (h) $B_2 : i = 4$

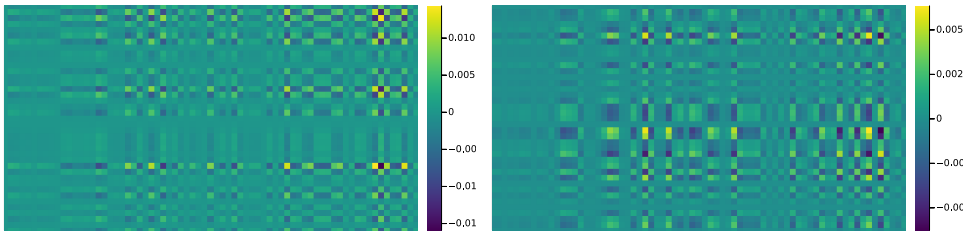
FIGURE 5.4 Matrices $\sigma_i^\ell \boldsymbol{u}_i^\ell (\boldsymbol{v}_i^\ell)^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($i = 1, 2, 3, 4$).



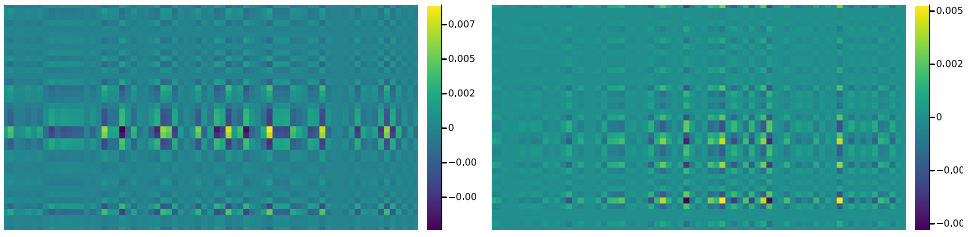
(a) $B_1 : i = 8$ (b) $B_2 : i = 8$



(c) $B_1 : i = 16$ (d) $B_2 : i = 16$

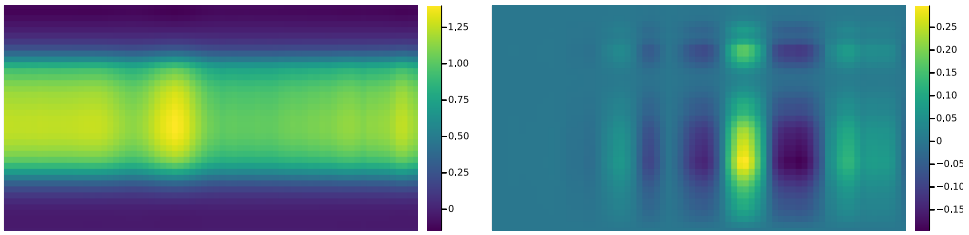


(e) $B_1 : i = 24$ (f) $B_2 : i = 24$

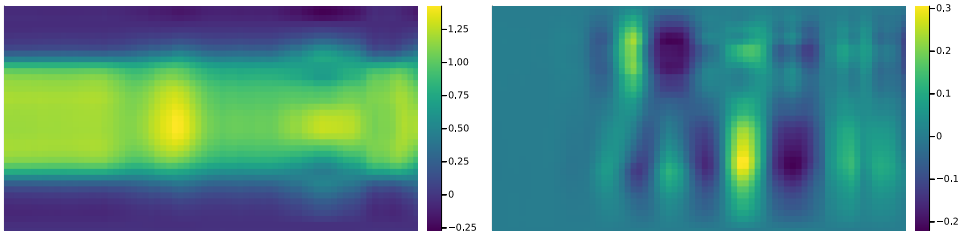


(g) $B_1 : i = 32$ (h) $B_2 : i = 32$

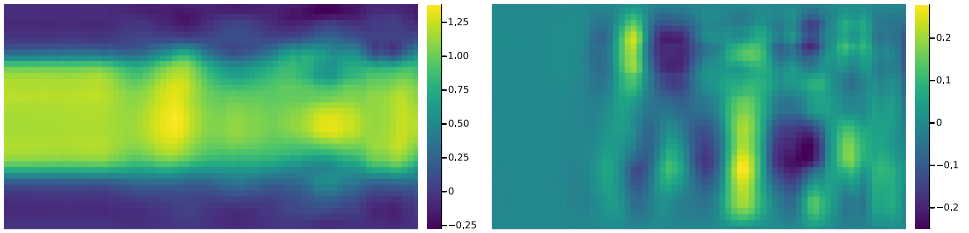
FIGURE 5.5 Matrices $\sigma_i^\ell \boldsymbol{u}_i^\ell (\boldsymbol{v}_i^\ell)^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($i = 8, 16, 24, 32$).



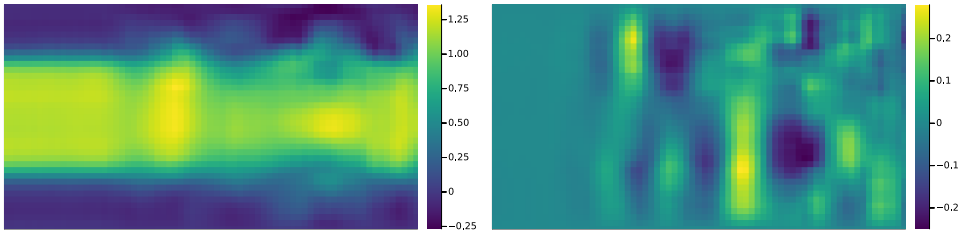
(a) $B_1 : k = 1$ (b) $B_2 : k = 1$



(c) $B_1 : k = 2$ (d) $B_2 : k = 2$

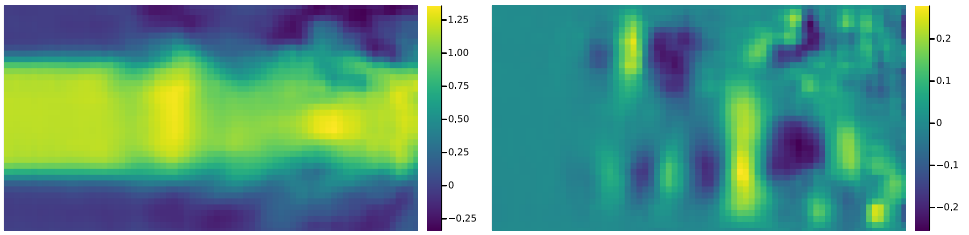


(e) $B_1 : k = 3$ (f) $B_2 : k = 3$

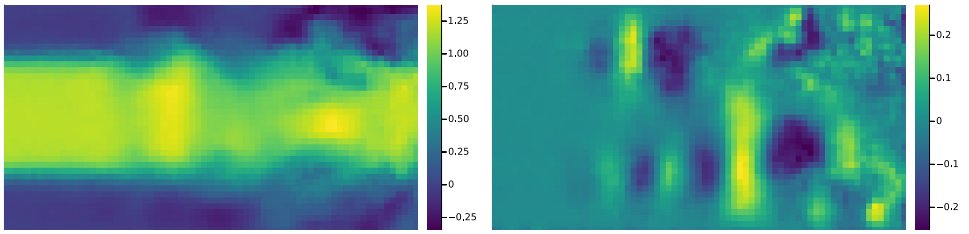


(g) $B_1 : k = 4$ (h) $B_2 : k = 4$

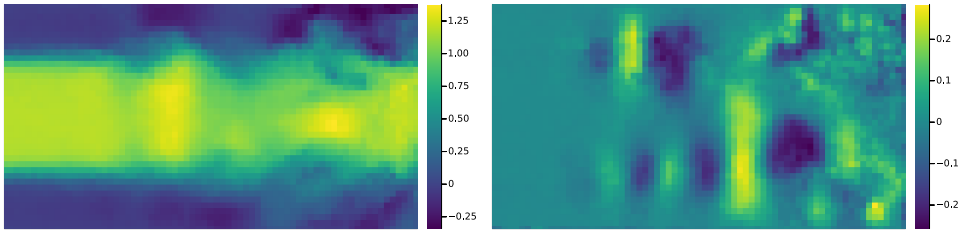
FIGURE 5.6 Approximations de rang k obtenues par la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($k = 1, 2, 3, 4$).



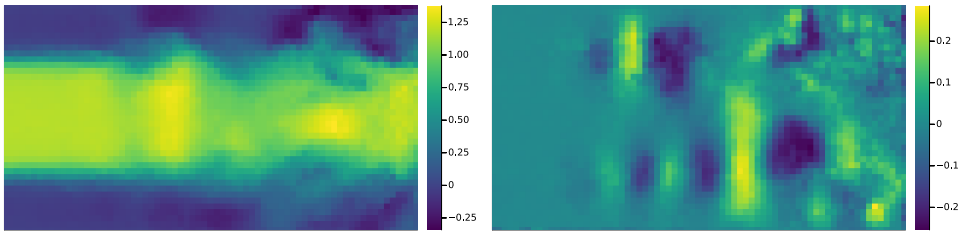
(a) $B_1 : k = 8$ (b) $B_2 : k = 8$



(c) $B_1 : k = 16$ (d) $B_2 : k = 16$

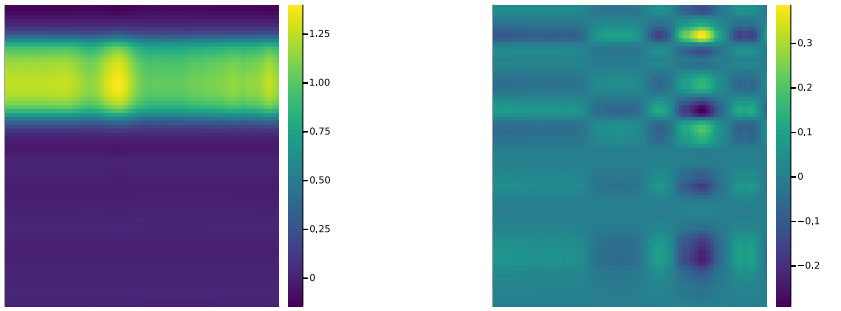


(e) $B_1 : k = 24$ (f) $B_2 : k = 24$



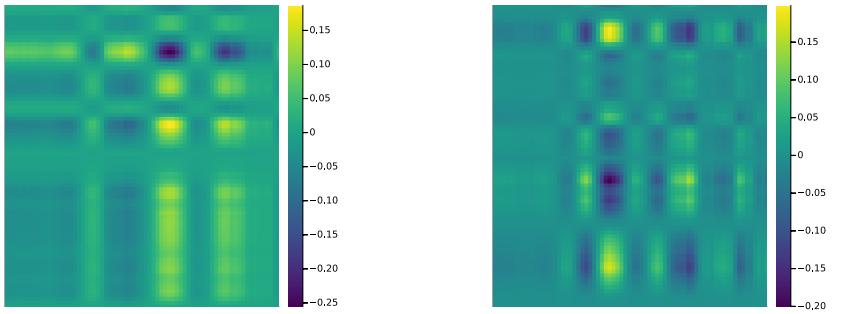
(g) $B_1 : k = 32$ (h) $B_2 : k = 32$

FIGURE 5.7 Approximations de rang k obtenues par la SVD par blocs (cf. équation (5.1)) des blocs B_1 et B_2 ($k = 8, 16, 24, 32$).



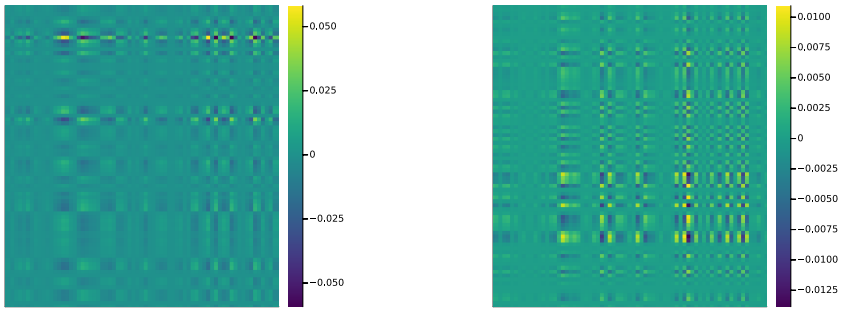
(a) $i = 1$

(b) $i = 2$



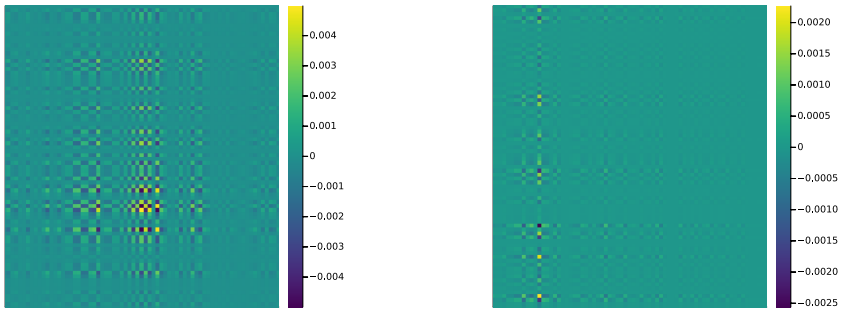
(c) $i = 3$

(d) $i = 4$



(e) $i = 16$

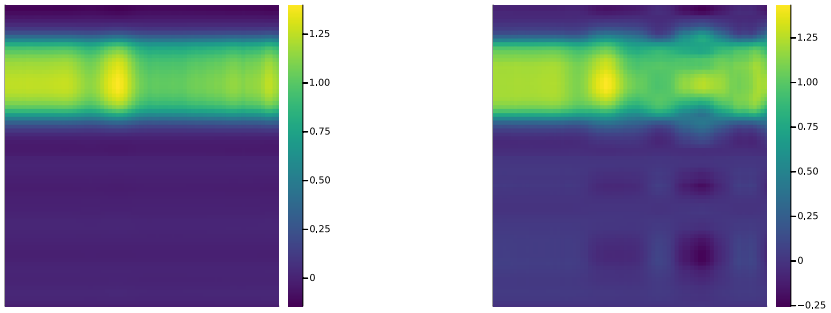
(f) $i = 32$



(g) $i = 48$

(h) $i = 64$

FIGURE 5.8 Matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD monolithique (cf. équation (5.2)) de $A = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix}$.



(a) $k = 1$ (b) $k = 2$

(c) $k = 3$ (d) $k = 4$

(e) $k = 16$ (f) $k = 32$

(g) $k = 48$ (h) $k = 64$

FIGURE 5.9 Approximations de rang k obtenues par la SVD monolithique (cf. équation (5.2)) de $A = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix}$.

5.3 SVD et NMF de l'énergie

Les équations (5.3) et (5.4) suggèrent de combiner B_1 et B_2 d'une manière plus complexe et plus significative en reconstruisant l'énergie contenue par les deux composantes du champ de vitesse. C'est la première construction qui permet d'appliquer une NMF puisque les coefficients de A deviennent alors tous positifs. C'est toutefois la construction qui donne le plus petit rang ($r \leq 39$).

Les valeurs singulières de la SVD sont illustrées à la figure 5.3 et les matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 sont illustrées à la figure 5.10. Les matrices de rang k obtenues par la SVD de A sont illustrées à la figure 5.11. On constate que les résultats sont similaires à ceux de la SVD de la matrice B_1. La première matrice $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ de rang 1 possède des coefficients positifs qui semblent bien capturer les caractéristiques du jet. Les autres matrices de rang 1 n'ont toutefois pas de sens physique puisque les coefficients sont autant négatifs que positifs. La représentation des données sous la forme d'une seule matrice de l'énergie du jet permet de donner une signification physique intéressante aux approximations de rang k, mais les valeurs négatives données par la SVD limite leur applicabilité. On introduit la NMF en espérant remédier à ce problème.

Pour bien analyser les résultats des NMF, on doit modifier la décomposition donnée par l'équation (5.4). Contrairement à la SVD, qui fournit une décomposition unique, chaque NMF de rank k vient avec un ensemble différent de matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1. On aurait donc au total $k!$ matrices de rang 1 si on souhaitait étudier les morceaux des NMF de rang k et moins. Puisque la matrice de l'énergie est potentiellement de rang 39, on doit trouver une façon de mesurer la contribution de chaque matrice de rang 1 sans avoir à les visualiser individuellement. La SVD donne des valeurs singulières qui permettent d'accomplir cette tâche, mais la NMF n'est pas formulée de cette façon. On peut toutefois créer une forme équivalente pour la NMF qui reproduit le rôle que jouent les valeurs singulières dans la SVD. L'objectif n'est pas de formuler la NMF comme une SVD, mais seulement de permettre de mesurer la contribution des matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la NMF de rang r,

$$WH = \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{r} \|\boldsymbol{w}_i\| \|\boldsymbol{h}_i\| \frac{\boldsymbol{w}_i}{\|\boldsymbol{w}_i\|} \frac{\boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}}{\|\boldsymbol{h}_i\|} = \sum_{i=1}^{r} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}, \tag{5.5}$$

où $\alpha_i = \|\boldsymbol{w}_{p_i}\| \|\boldsymbol{h}_{p_i}\|$, $\boldsymbol{w}_{p_i} = \|\boldsymbol{w}_{p_i}\| \hat{\boldsymbol{w}}_i$ et $\boldsymbol{h}_{p_i} = \|\boldsymbol{h}_{p_i}\| \hat{\boldsymbol{h}}_i$. On note qu'on a réordonné les termes dans le dernier terme de l'égalité (5.5) de manière à ce que $\alpha_i \geq \alpha_{i+1}$. Tout comme les valeurs singulières de la SVD qui sont placées en ordre décroissant, on peut réordonner les éléments de la NMF de manière à ce que les coefficients α_i soient placés en ordre décroissant. Les coefficients α_i sont illustrés à la figure 5.3, les approximations de rang k sont illustrées à la figure 5.12 et les matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 des NMF de rang 8 et 39 sont respectivement illustrées aux figures 5.13 et 5.14.

On constate que les premiers coefficients α_i de la NMF sont comparables aux valeurs singulières de la SVD, mais ils deviennent rapidement plus grands. Deux explications peuvent être données pour expliquer cet écart. D'abord, on a $\alpha_1 = 30{,}71 < \sigma_1 = 42{,}62$, ce qui veut dire que $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ permet de représenter une plus grande portion de l'énergie que $\boldsymbol{w}_1 \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$, ce qui laisse moins d'énergie à être représentée pour les matrices de rang 1 suivantes pour la SVD. Ensuite, la NMF de rang 39 n'est pas exacte et l'écart entre WH et A ne peut donc pas être nul. Les vecteurs $\boldsymbol{w}_i$ et $\boldsymbol{h}_i$ n'ont pas la propriété d'orthogonalité des vecteurs $\boldsymbol{u}_i$ et $\boldsymbol{v}_i$, ce qui veut dire qu'il y a une certaine forme de répétition de l'information entre les matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$.

Les matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la NMF offrent un résultat intéressant. Elles semblent dégager des régions du jet où l'énergie est concentrée avec plus d'intensité et plus de précision que la SVD. De plus, les coefficients des matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ sont positifs. En comparant les NMF de rang 8 et de rang 39, on constate que plus le rang est élevé, plus on arrive à isoler avec précision les endroits où l'énergie se trouve dans le jet.

5.4 Choix de la meilleure stratégie et problèmes à venir

En somme, il semble que la décomposition de la matrice d'énergie est une bonne approche puisqu'elle permet d'identifier les régions du jet où l'énergie est concentrée en utilisant la SVD ou une NMF. La NMF semble permettre de mieux isoler les régions où l'énergie se concentre, en plus d'offrir des matrices de rang 1 à coefficients positifs. La SVD ne permet pas d'utiliser les matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 individuellement parce que les coefficients ne sont pas tous positifs, à l'exception de la première matrice $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ qui permet d'isoler une plus grande portion de l'énergie du jet, lorsque comparé à $\boldsymbol{w}_1 \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$.

La décomposition individuelle des matrices B_1 et B_2 s'est également révélée être une approche intéressante, même si on est limité à une SVD à cause des valeurs négatives des coefficients de ces matrices. On ne peut pas se servir des matrices $\sigma_i^{\ell} \boldsymbol{u}_i^{\ell} (\boldsymbol{v}_i^{\ell})^{\mathrm{T}}$ de rang 1 individuelles, sauf peut-être pour $i = 1$, puisque les coefficients n'ont pas d'interprétation claire. Ces matrices de rang 1 doivent être combinées entre elles et interagir pour offrir les approximations de rang k de B_1 et B_2. En particulier, on ne peut pas étudier l'énergie des matrices de rang 1 pour isoler les endroits où l'énergie se concentre dans l'écoulement comme le permet une NMF de la matrice énergie. On peut reconstruire l'énergie associée aux approximations de rang k, mais pas à partir des matrices de rang 1 de la SVD, puisque l'opération de mise au carré des coefficients de chacune des matrices $\sigma_i^{\ell} \boldsymbol{u}_i^{\ell} (\boldsymbol{v}_i^{\ell})^{\mathrm{T}}$ les empêche d'interagir entre elles pour reconstruire les caractéristiques du champ de vitesse.

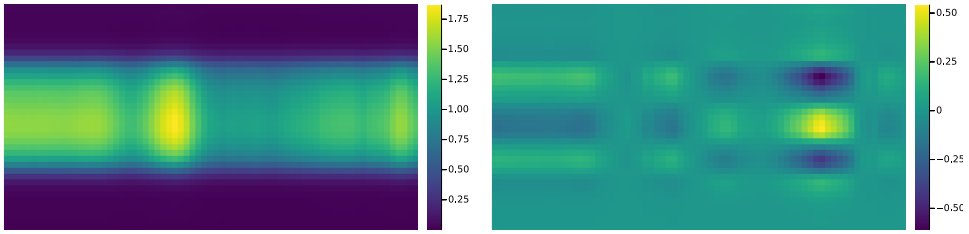
Deux problèmes majeurs doivent être soulignés, peu importe la stratégie de décomposition qui a été

utilisée jusqu'à maintenant. Le premier problème est que pour avoir une représentation réaliste d'un écoulement turbulent, on devrait avoir des mesures pour les trois dimensions de l'espace. La SVD devient plus complexe pour les tenseurs d'ordre 3. En particulier on perd l'unicité de la décomposition. Même si des solutions existent pour contourner cette difficulté, on arrive à notre deuxième problème qui est l'orientation des données dans les matrices à décomposer. Dans l'exemple du jet, les données sont parfaitement alignées avec les lignes et les colonnes des matrices, ce qui permet des décomposition efficaces. On peut rendre les décompositions moins efficaces en effectuant une rotation des données dans le plan de mesure. Le problème est donc que les décompositions faites jusqu'à maintenant sont sensibles aux changements de référentiel. Pour s'en convaincre, il suffit de comparer les deux matrices

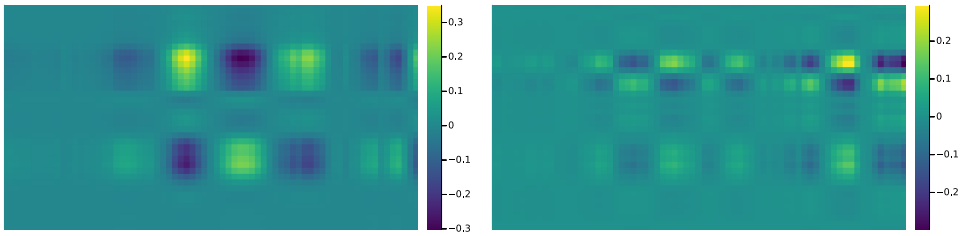
$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{5.6}$$

L'information dans les deux matrices est la même, mais avec une rotation du plan de mesure avant de regrouper les données sous forme matricielle. La rotation imaginée ici est une simplification du processus de mesure et on suppose que les données nécessaires pour y arriver sont disponibles. La SVD de A est très simple puisque cette matrice est de rang 1. D'ailleurs, ceci veut dire que la première matrice de rang 1 provenant de la SVD réussira à capturer toute l'information. La matrice I est moins simple puisqu'elle est de plein rang. Dans ce cas précis, toutes les valeurs singulières sont égales à 1 et la première matrice de rang 1 ne se distingue pas des autres. Il suffit donc d'une simple rotation pour que la première matrice de rang 1 perde son importance et pour qu'une décomposition de rang 1 doive être remplacée par une décomposition de rang 5.

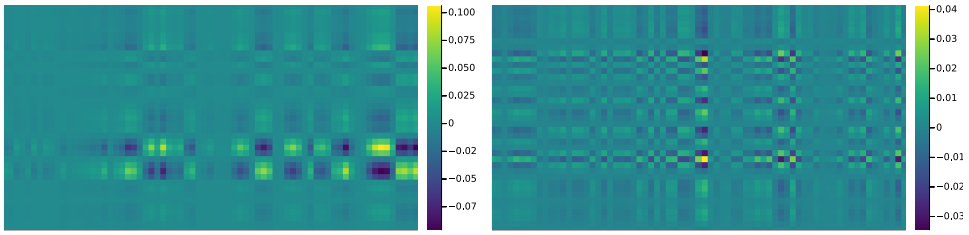
La solution à cette difficulté peut prendre différentes formes. On choisit de prendre la position qui statue que les données sont insuffisantes. On ne peut pas espérer obtenir une décomposition significative d'un objet aussi complexe qu'un jet turbulent à l'aide d'un seul jeu de données. Il faudrait plusieurs ensembles de données du jet confiné à partir desquels on pourrait espérer construire une matrice à décomposer qui soit robuste face aux changements de référentiels et qui permette d'incorporer des données de dimension plus élevée. Cette approche est bien connue pour l'application de la décomposition orthogonale aux valeurs propres, ou POD (« Proper Orthogonal Decomposition »), en mécanique des fluides ou pour l'application de l'analyse en composantes principales, ou PCA (« Principal Component analysis »), de manière plus générale en statistique. On explore ce type d'approche au prochain chapitre.



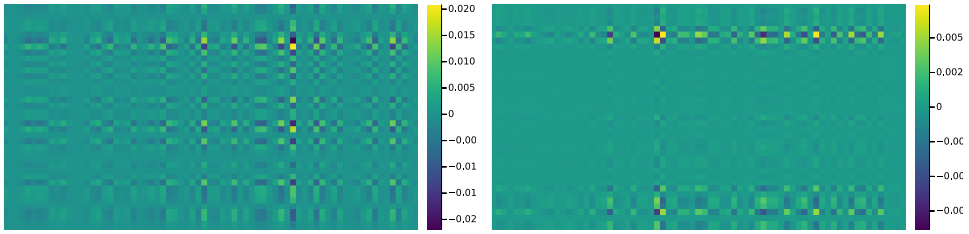
(a) $i = 1$ (b) $i = 2$



(c) $i = 3$ (d) $i = 4$

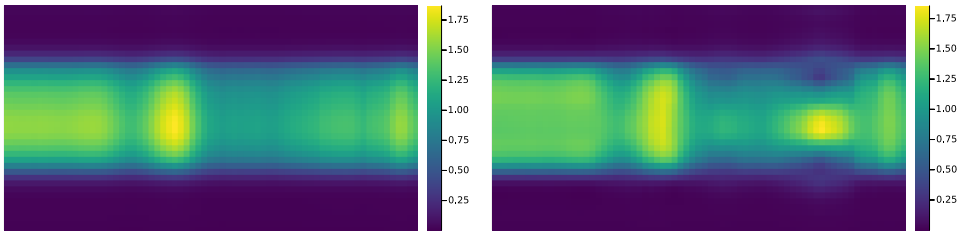


(e) $i = 8$ (f) $i = 16$

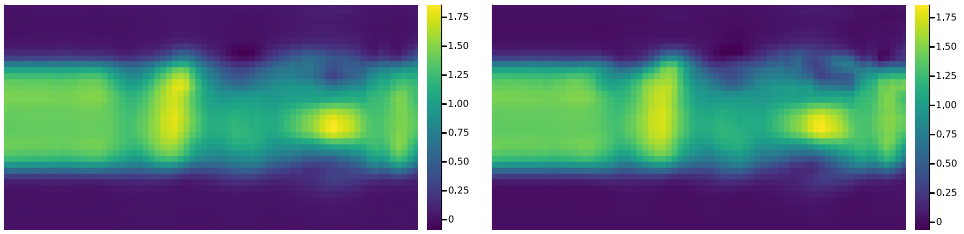


(g) $i = 24$ (h) $i = 32$

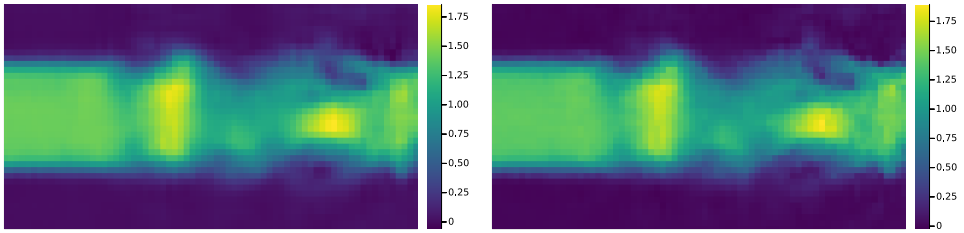
FIGURE 5.10 Matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.3)).



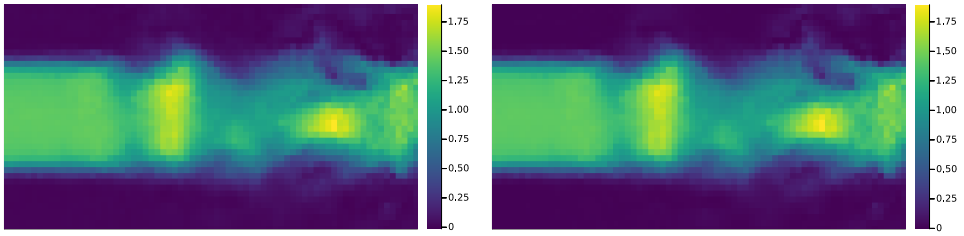
(a) $k = 1$ (b) $k = 2$



(c) $k = 3$ (d) $k = 4$

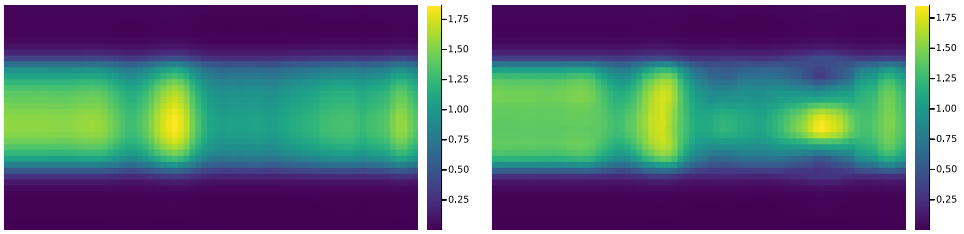


(e) $k = 8$ (f) $k = 16$

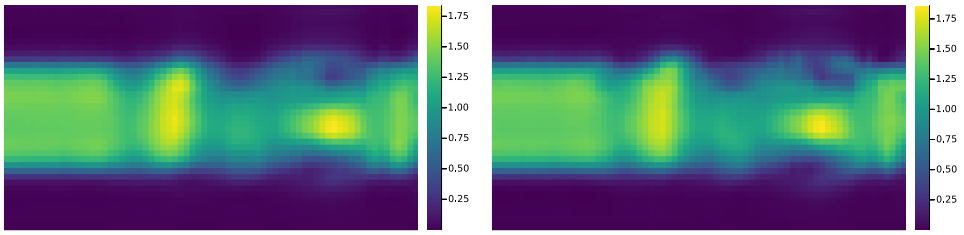


(g) $k = 24$ (h) $k = 32$

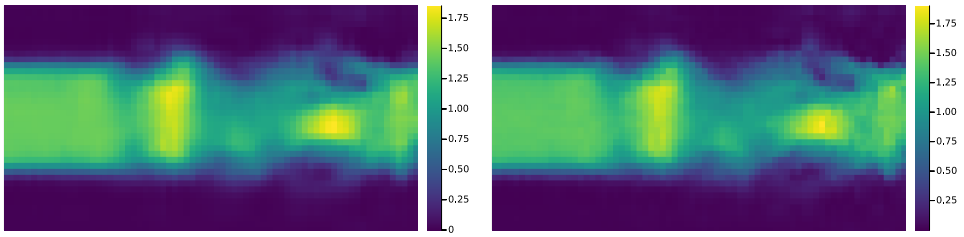
FIGURE 5.11 Approximations de rang k obtenues par la SVD de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.3)).



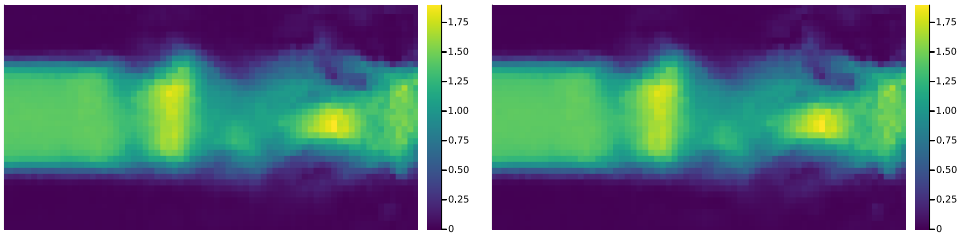
(a) $k = 1$ (b) $k = 2$



(c) $k = 3$ (d) $k = 4$

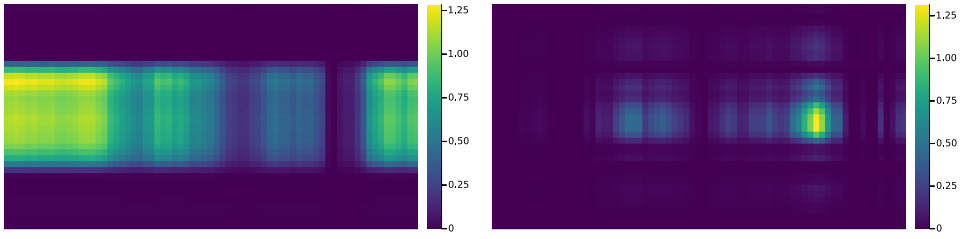


(e) $k = 8$ (f) $k = 16$

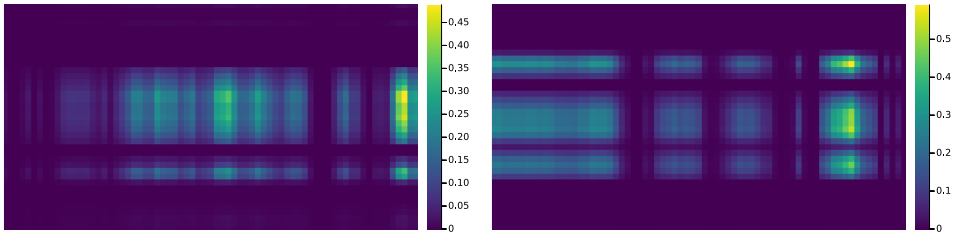


(g) $k = 24$ (h) $k = 32$

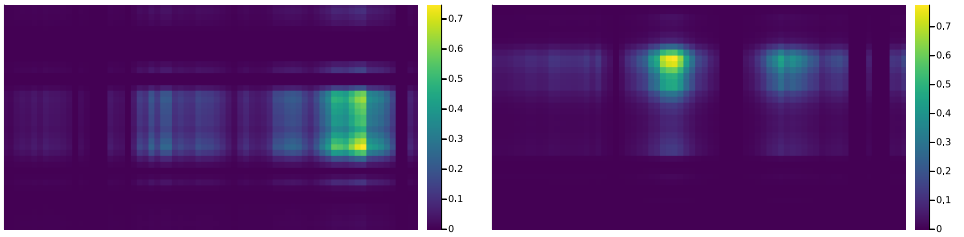
FIGURE 5.12 Approximations de rang k obtenue par une NMF de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.4)).



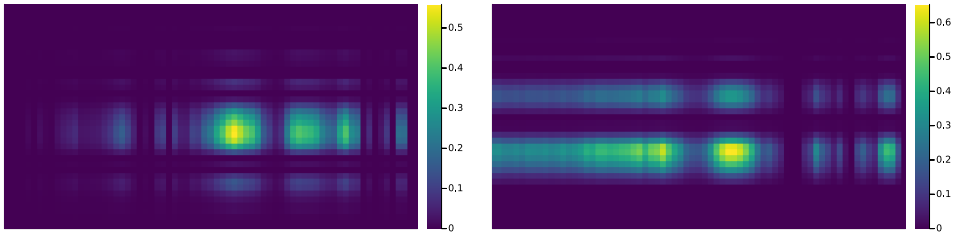
(a) $i = 1$ (b) $i = 2$



(c) $i = 3$ (d) $i = 4$

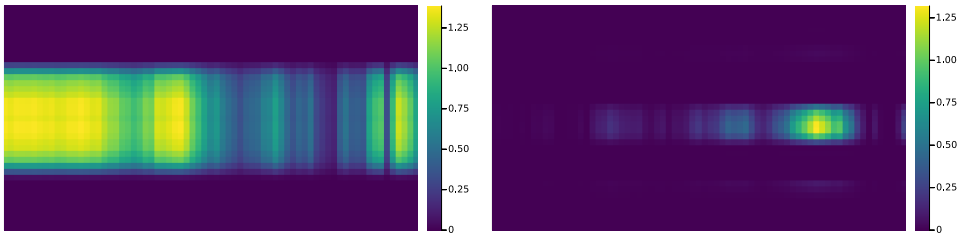


(e) $i = 5$ (f) $i = 6$

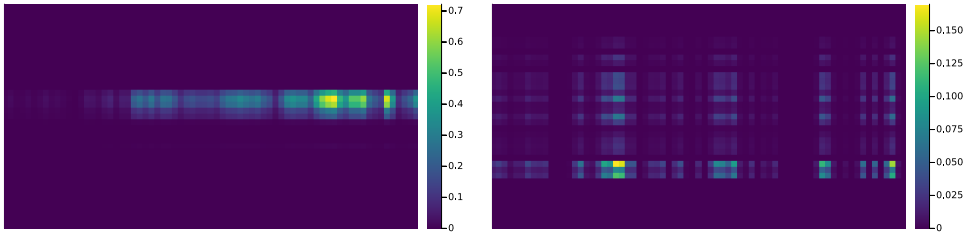


(g) $i = 7$ (h) $i = 8$

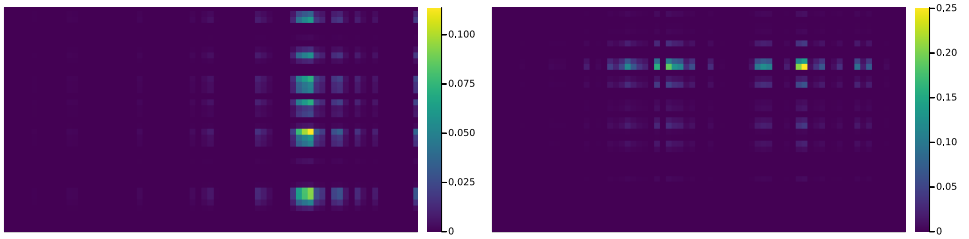
FIGURE 5.13 Matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 d'une NMF de rang 8 de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.4)).



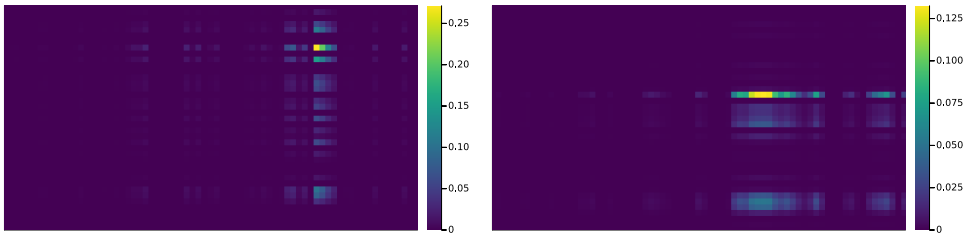
(a) $i = 1$ (b) $i = 2$



(c) $i = 3$ (d) $i = 4$



(e) $i = 8$ (f) $i = 16$

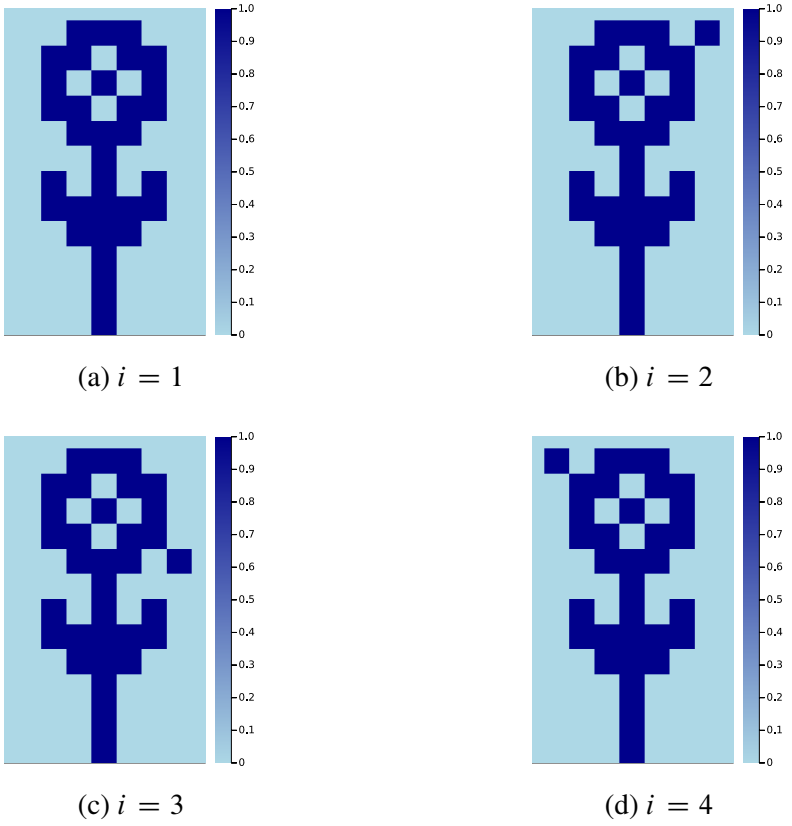


(g) $i = 24$ (h) $i = 32$

FIGURE 5.14 Matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 d'une NMF de rang 39 de la matrice de l'énergie (cf. équation (5.4)).

CHAPITRE 6 DÉCOMPOSITION D'UNE COLLECTION DE DONNÉES SIMPLE

On veut étudier la décomposition d'une matrice pour laquelle chaque colonne correspond à un ensemble de données représentant un même concept abstrait. Cet ensemble de données prendra la forme d'une collection de vecteurs de taille identique $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_N\} \subset \mathbb{R}^m$ où N correspond au nombre d'ensembles de données et m correspond au nombre de points de mesures de chaque ensemble de données. En guise d'exemple, on reprend le cas de la fleur simple (cf. équation (4.1)), mais cette fois ci, on utilise plusieurs matrices pour la représentation de celle-ci. Chacune de ces matrices contient une perturbation, où un coefficient nul prend la valeur 1, qui rend le dessin de la fleur suffisamment différent pour être unique sans toutefois rendre la fleur méconnaissable. Cette perturbation se produira sur un seul coefficient différent pour chaque matrice qui représente la fleur. Les matrices ainsi obtenues sont illustrées à la figure 6.1. On peut imaginer que ces perturbations représentent une abeille qui vole autour de la fleur et que l'ensemble des matrices représentent la trajectoire de celle-ci à différent moments autour de la fleur.



(a) $i = 1$ (b) $i = 2$

(c) $i = 3$ (d) $i = 4$

FIGURE 6.1 Ensembles de données $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^{126}$ ($N = 4$) de la fleur avec perturbations.

On doit faire le lien entre les vecteurs $\boldsymbol{a}_i$ de la collection des ensembles de données et les matrices qui servent à dessiner les perturbations de la fleur. Ces deux objets contiennent exactement la même information, seul leur format diffère. D'une part on tient à écrire les ensembles de données sous la forme de vecteurs $\boldsymbol{a}_i$ parce qu'ils peuvent servir à construire la matrice $A = [\boldsymbol{a}_1\ \boldsymbol{a}_2\ \cdots\ \boldsymbol{a}_N]$ sur laquelle on peut appliquer les décompositions habituelles. La seule restriction est que $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^m,\ \forall i \in \{1, \ldots, N\}$. D'autre part, on tient à organiser les données qui décrivent les variations de la fleur sous forme de matrices afin de faciliter leur visualisation. Pour obtenir les vecteurs $\boldsymbol{a}_i$ à partir de ces matrices, il suffit de réorganiser les coefficients en une seule colonne $\boldsymbol{a}_i$. Le détail de cette réorganisation n'est pas important, mais celle-ci doit être identique pour chaque ensemble de données.

La matrice $A = [\boldsymbol{a}_1\ \boldsymbol{a}_2\ \ \boldsymbol{a}_3\ \ \boldsymbol{a}_4]$ est illustrée à la figure 6.2. Cette visualisation des données ne semble pas intuitive à première vue, mais elle permet de comprendre ce qu'une décomposition arrivera à accomplir. On sait que les trois points foncés sur la figure correspondent aux perturbations puisqu'ils ne se répètent pas dans les autres colonnes. Les coefficients qui correspondent à la fleur sont présents dans tous les ensembles de données et occupent chacun une ligne précise de A. On remarque ainsi que la fleur peut être représentée par une matrice de rang 1 lorsque les données sont écrites sous la forme de A. Cette approche est donc non seulement excellente pour éviter le problème de décomposition d'un tenseur d'ordre 3, mais elle permet également de représenter une structure complexe à l'aide d'une matrice de rang 1.

Le rang de la matrice A est limité par le nombre de colonnes (4) puisqu'il est de loin plus petit que le nombre de lignes (126). Les matrices ainsi construites auront donc comme propriété d'être grandes et minces. Ici on trouve donc que A est de rang 4. Dans ce qui suit, on procède à la SVD et à une NMF de rang 4 de A. La visualisation des matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 obtenues par la SVD est complexe pour cette nouvelle matrice A puisque la décomposition est faite pour une collection d'ensembles de données $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_N\}$. On doit comprendre comment extraire l'information de $A = U\Sigma V$ en terme de matrices de taille 14×9 afin de retrouver une visualisation similaire à celle qui est illustrée à la figure 6.1. On s'intéresse davantage à la visualisation des éléments représentatifs des ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$ et on s'intéresse moins aux approximations de rang k de A.

En inversant la procédure de réorganisation des données sous forme de colonnes, on peut réorganiser les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ en format matriciel. Les vecteurs singuliers sont de rang 1 par nature, mais lorsqu'ils sont réorganisés, ils peuvent prendre la forme de matrices de rang supérieur à 1. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ représentent l'ensemble des coefficients que la SVD propose d'utiliser pour représenter chaque ensemble de données $\boldsymbol{a}_i$. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$ indiquent quelle proportion des coefficients $\boldsymbol{u}_i$ doivent être utilisés pour chaque ensemble de données $\boldsymbol{a}_i$. Les valeurs singulières

σ_i servent à mettre à l'échelle la contribution de chaque matrice $\boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 pour reconstruire tous les ensembles de données de la collection représentée par A. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ sont ce que nous voulons visualiser sous forme matricielle. Il en va de même pour les vecteurs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ obtenus par une NMF. Cette interprétation des vecteurs $\boldsymbol{u}_i$ et $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ a une conséquence intéressante : l'ordre dans lequel les ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$ sont placés pour construire A n'a pas d'importance, seule la façon systématique d'ordonner les coefficients dans chaque $\boldsymbol{a}_i$ est importante. Ceci est important parce qu'un des problèmes soulevés à la section 5.4 était la sensibilité d'une décomposition au changement de référentiel des données. Or, notre interprétation des vecteurs $\boldsymbol{u}_i$ et $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ est invariante face aux permutations des lignes et/ou des colonnes de A.

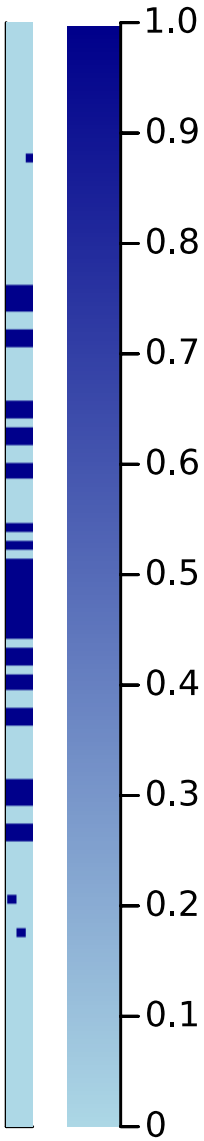


FIGURE 6.2 Matrice $A = [\boldsymbol{a}_1\ \boldsymbol{a}_2\ \boldsymbol{a}_3\ \boldsymbol{a}_4]$ de l'exemple de la fleur avec perturbations.

6.1 Application des décompositions matricielles

6.1.1 SVD

Les valeurs singulières de la SVD sont illustrées à la figure 6.3. On constate que la première valeur singulière est d'un ordre de grandeur au-dessus des autres valeurs. Ceci se produit parce que la SVD arrive à distinguer une composante $\boldsymbol{u}_1$ commune à tous les ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ sont affichés à la figure 6.4. On constate que les autres vecteurs singuliers ($i > 1$) n'offrent pas d'interprétation claire des perturbations sur chaque ensemble de données. Les trois points foncés se retrouvent à être fragmentés sur les quatre vecteurs singuliers et les valeurs négatives nous indiquent que les vecteurs singuliers doivent être combinés afin de faire ressortir les variations observées à la figure 6.1. La SVD permet donc d'isoler la structure de fleur à partir de la collection des ensembles de données, mais elle ne permet pas d'isoler l'abeille dans son parcours autour de la fleur (à moins qu'on ait affaire à une abeille quantique qui existe dans une superposition d'états autour de la fleur).

6.1.2 NMF

Les coefficients α_i d'une NMF de rang 4 sont illustrés à la figure 6.3. On constate que le premier coefficient est d'un ordre de grandeur plus grand lorsque comparé aux autres valeurs. Comme pour la SVD, ceci se produit parce que la NMF arrive à distinguer une composante $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ commune à tous les ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$. Les vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ sont illustrés à la figure 6.4. On constate que les autres vecteurs positifs arrivent à capturer parfaitement les trois points foncés qui se trouvent à la figure 6.1. La NMF a réussi à suivre l'abeille dans son parcours autour de la fleur.

6.2 Choix de la meilleure stratégie et propriété d'additivité

La SVD réussit à distinguer la structure de la fleur qui demeure constante à travers les ensembles de données, mais elle ne permet pas de capturer les variations individuelles pour chaque ensemble de données. Le premier vecteur singulier porte également une trace des variations présentes dans les ensembles de données. De plus, les coefficients positifs et négatifs présents dans les vecteurs singuliers nous empêchent de leur attribuer une interprétation claire. La NMF semble donc être la stratégie optimale lorsque l'objectif est d'isoler diverses composantes d'un ensemble de données.

Cet exemple est très simple et il nous permet d'éviter une difficulté évidente : qu'arrive-t-il si des données interagissent entre les ensembles de données ? Dans le langage de notre exemple simple, la question devient : comment performent les décompositions si l'abeille se trouve à passer devant la fleur dans un des ensembles de données ? Les variations sur chaque ensemble de données $\boldsymbol{a}_i$ n'ont

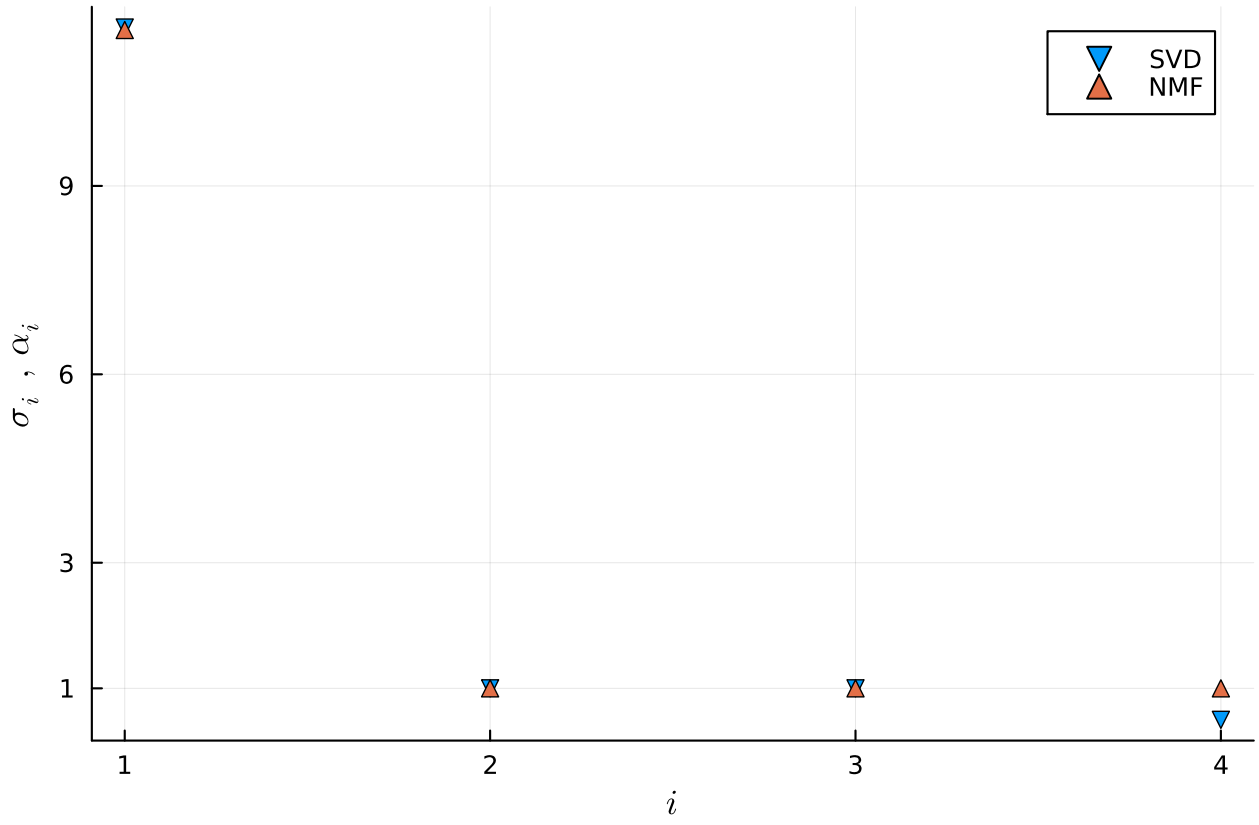
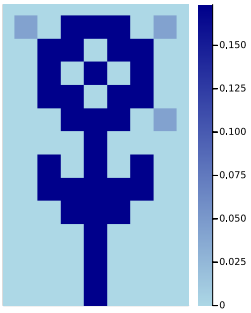


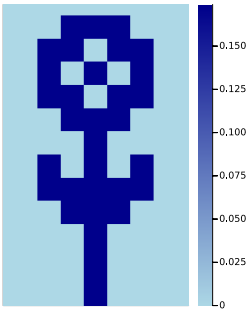
FIGURE 6.3 Valeurs singulières de la SVD et coefficients α_i de la NMF de rang 39 de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2).

pas seulement été choisies pour éviter de rendre la fleur méconnaissable, mais elles ont été choisies de manière à éviter que l'abeille touche la fleur. Il s'agit d'un problème intéressant et important puisqu'on imagine bien que les différentes caractéristiques du champ de vitesse d'un écoulement de fluide interagiront ensemble.

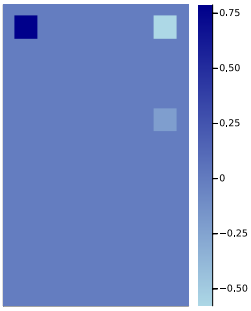
Pour répondre à cette interrogation, on peut modifier un des ensembles de données $\boldsymbol{a_i}$ de la collection. La modification peut être faite pour un seul coefficient qui décrit la fleur. On peut imaginer que ce coefficient modifié décrit l'abeille qui se pose sur la fleur. Le souci est de savoir quelle valeur numérique on doit attribuer à cette modification. On ne peut pas représenter tous les coefficients (fleur et abeille) avec la valeur numérique 1 puisque l'abeille devient alors imperceptible une fois qu'elle se trouve devant la fleur. Si on utilise une propriété d'additivité, c'est à dire si on additionne simplement le coefficient qui représente l'abeille au coefficient qui représente la fleur, alors on aura la même fleur, mais avec un coefficient qui vaut $1 + 1 = 2$ là où l'abeille se pose et tous les autres coefficients resteront à la valeur 1. On imagine bien que la NMF peut traiter l'additivité sans problème et c'est ce qu'on constate en étudiant les résultats illustrés à la figure 6.5. En



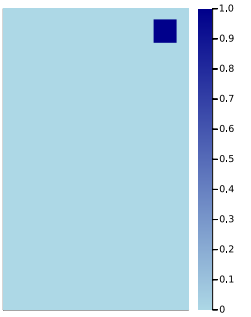
(a) SVD : $i = 1$



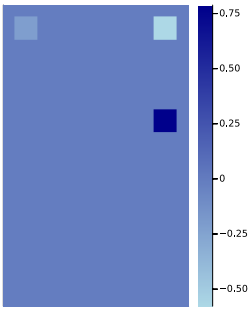
(b) NMF : $i = 1$



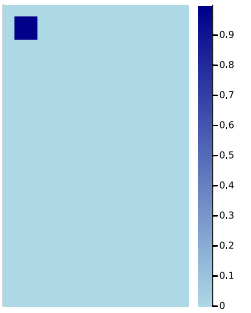
(c) SVD : $i = 2$



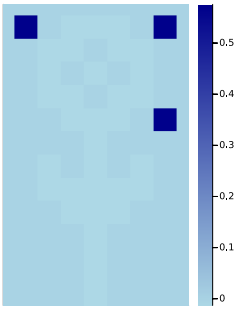
(d) NMF : $i = 2$



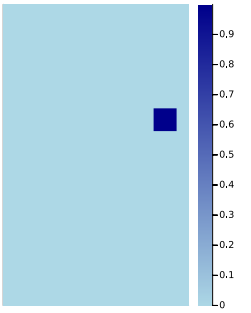
(e) SVD : $i = 3$



(f) NMF : $i = 3$



(g) SVD : $i = 4$



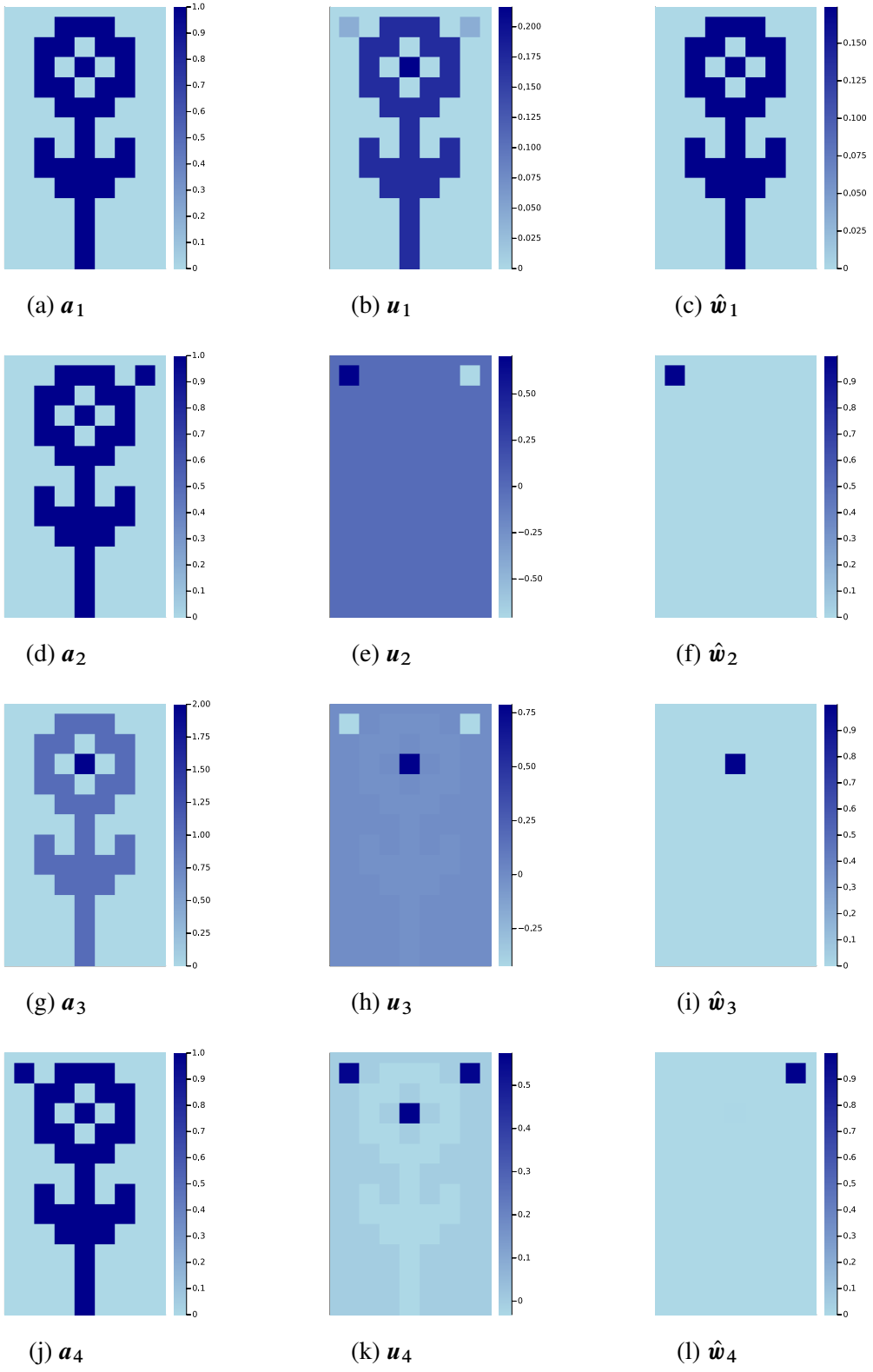
(h) NMF : $i = 4$

FIGURE 6.4 Vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ de la SVD et vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ d'une NMF de rang 4 de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2).

réalité, la propriété d'additivité n'est pas toujours respectée et elle n'est pas toujours désirable. Par exemple, l'apparence d'une abeille qui passe devant une fleur n'est pas affectée par la fleur qui se trouve derrière. Il faut donc choisir des coefficients différents pour représenter la fleur et l'abeille. On choisit donc la valeur 1 pour la fleur et la valeur 0,75 pour l'abeille, tel qu'illustré à la figure 6.6. On constate que sans la propriété d'additivité, la NMF intègre l'abeille à la fleur, ce qui crée un vecteur positif $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ qui représente la fleur lorsque l'abeille y est posée ($\boldsymbol{a}_3$). La NMF réussit à isoler l'abeille lorsqu'elle se pose sur la fleur ($\hat{\boldsymbol{w}}_4$), mais l'interprétation de $\hat{\boldsymbol{w}}_3$ devient moins claire à cause de l'interaction entre l'abeille et la fleur. Il faut donc prendre soin de bien interpréter les résultats d'une NMF lorsque l'additivité n'est pas une propriété des données étudiées. De plus, on constate que les NMF de rang 4 présentées ne sont pas exactes.

6.3 En résumé

Ces observations nous indiquent que les vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ d'une NMF peuvent servir à extraire des caractéristiques à partir d'une collection d'ensembles de données. La SVD ne performe pas aussi bien, surtout lorsqu'on s'intéresse aux vecteurs singuliers individuels $\boldsymbol{u}_i$ pour $i \geq 2$. Il faut toutefois prendre garde lorsque les caractéristiques d'intérêt ne respectent pas la propriété d'additivité. Dans ce cas, les vecteurs positifs d'une NMF deviennent moins faciles à interpréter à cause de l'interaction entre les caractéristiques des données. De plus, on pourrait avoir du mal à reproduire une interprétation des vecteurs positifs sur deux NMF de rang identique, pour une même collection de données.



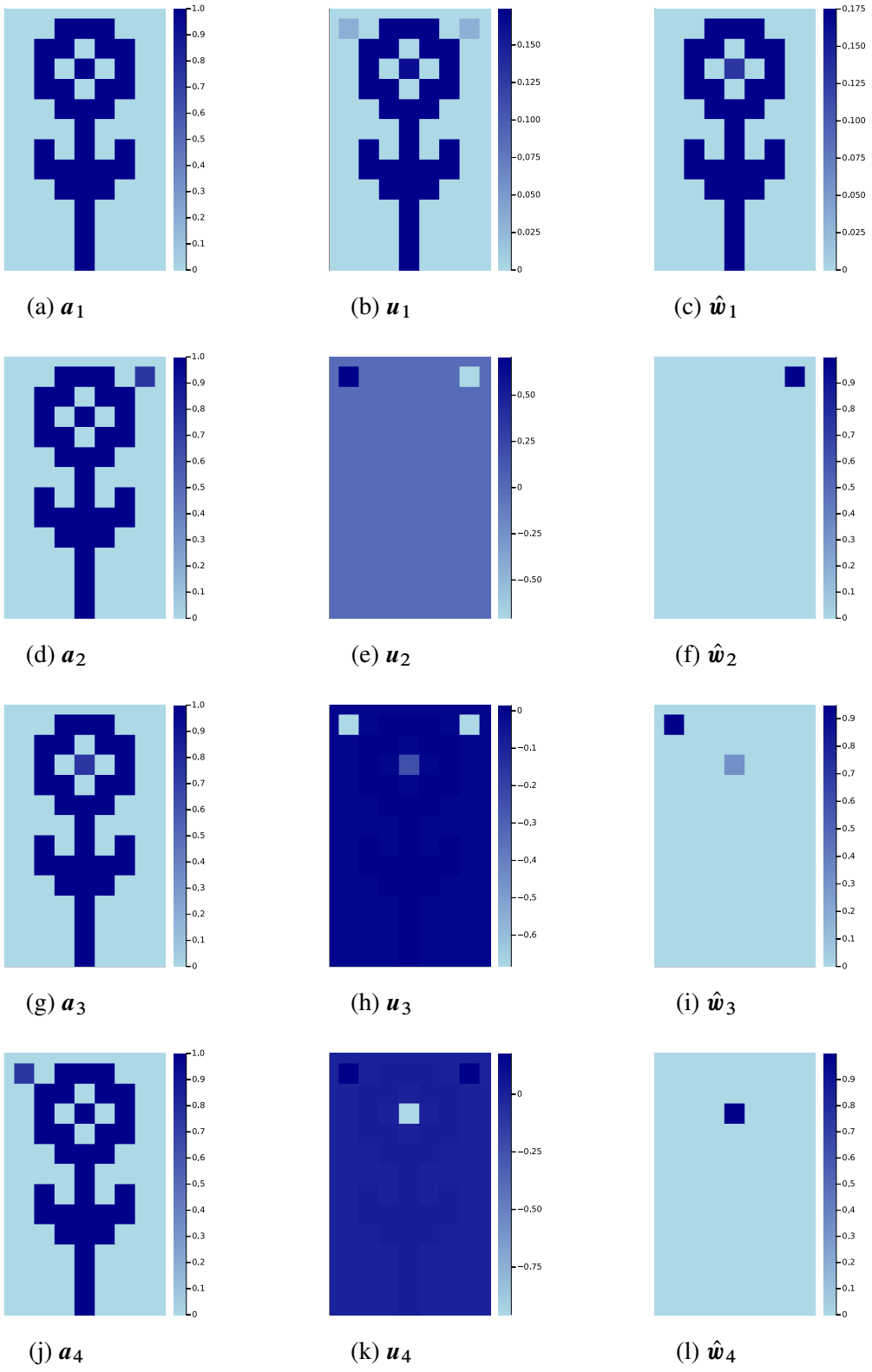
(a) $\boldsymbol{a}_1$ (b) $\boldsymbol{u}_1$ (c) $\hat{\boldsymbol{w}}_1$

(d) $\boldsymbol{a}_2$ (e) $\boldsymbol{u}_2$ (f) $\hat{\boldsymbol{w}}_2$

(g) $\boldsymbol{a}_3$ (h) $\boldsymbol{u}_3$ (i) $\hat{\boldsymbol{w}}_3$

(j) $\boldsymbol{a}_4$ (k) $\boldsymbol{u}_4$ (l) $\hat{\boldsymbol{w}}_4$

FIGURE 6.5 Ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$, vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ (SVD) et vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ (NMF) de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2), pour le cas additif.



(a) $\boldsymbol{a}_1$ (b) $\boldsymbol{u}_1$ (c) $\hat{\boldsymbol{w}}_1$

(d) $\boldsymbol{a}_2$ (e) $\boldsymbol{u}_2$ (f) $\hat{\boldsymbol{w}}_2$

(g) $\boldsymbol{a}_3$ (h) $\boldsymbol{u}_3$ (i) $\hat{\boldsymbol{w}}_3$

(j) $\boldsymbol{a}_4$ (k) $\boldsymbol{u}_4$ (l) $\hat{\boldsymbol{w}}_4$

FIGURE 6.6 Ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$, vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ (SVD) et vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ (NMF) de la collection des ensembles de données de la fleur avec perturbations (cf. figures 6.1 et 6.2), pour le cas non additif.

CHAPITRE 7 DÉCOMPOSITION D'UN ENSEMBLE DE DONNÉES DE JET CONFINÉ

On souhaite maintenant appliquer le concept de collection d'ensembles de données à l'exemple du jet confiné. Dans ce contexte, les ensembles de données correspondent à des mesures du champ de vitesse du jet à des moments différents. Plus spécifiquement, la collection est composée des mesures prises à 20 instants consécutifs. Les colonnes $\boldsymbol{a}_i$ de la matrice $A = [\boldsymbol{a}_1\ \boldsymbol{a}_2\ \cdots\ \boldsymbol{a}_{20}]$ représentent l'état du jet au temps t_i de manière à ce que $t_{i+1} > t_i$ et avec un pas de temps $t_{i+1} - t_i = \Delta t_i = \Delta t$ uniforme. Les $39 \times 71 = 2769$ données de chaque ensemble de mesures doivent être réorganisées en une seule colonne pour remplir les 20 colonnes de A. On a toujours le choix de traiter la décomposition des deux composantes du champ de vitesse individuellement, mais cette approche ne permet pas l'utilisation de la NMF. Conformément à la conclusion de la section 5, on choisit de combiner les deux composantes du champ de vitesse pour construire les matrices d'énergie qui sont affichées à la figure 7.2. Les valeurs singulières de la SVD et les coefficients d'une NMF de rang maximal (39) sont illustrés à la figure 7.1.

7.1 Application de la SVD

Les valeurs singulières de la SVD sont illustrées à la figure 7.1. On constate que la première valeur singulière est d'un ordre de grandeur supérieur aux autres valeurs. Ceci se produit parce que la SVD arrive à distinguer une composante $\boldsymbol{u}_1$ commune à tous les ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ sont illustrés aux figures 7.3 et 7.4. On constate que les autres vecteurs singuliers ($i \geq 2$) n'offrent pas d'interprétations claires des perturbations sur chaque ensemble de données. Il semble que le premier vecteur singulier soit important puisque dans tous les exemples considérés, il permet de représenter une caractéristique importante des données. On remarque que $\boldsymbol{u}_1$ possède des valeurs positives et que c'est le seul vecteur singulier qui pourrait avoir une interprétation claire. Par exemple, on peut comparer $\boldsymbol{u}_1$ à la valeur moyenne $\langle \boldsymbol{a} \rangle$ des colonnes de A. Cette comparaison est illustrée à la figure 7.7 et on constate qu'elle est bonne sans être exacte ($\| \frac{\langle \boldsymbol{a} \rangle}{\| \langle \boldsymbol{a} \rangle \|} - \boldsymbol{u}_1 \| = 0,6 \times 10^{-3}$). Cette comparaison est intéressante à cause de son interprétation physique : $\langle \boldsymbol{a}_i \rangle$ correspond à l'énergie moyenne du jet dans l'intervalle (t_1, t_{20}) et $\boldsymbol{u}_1$ semble bien approximer cette quantité. Nous y reviendrons plus en détail.

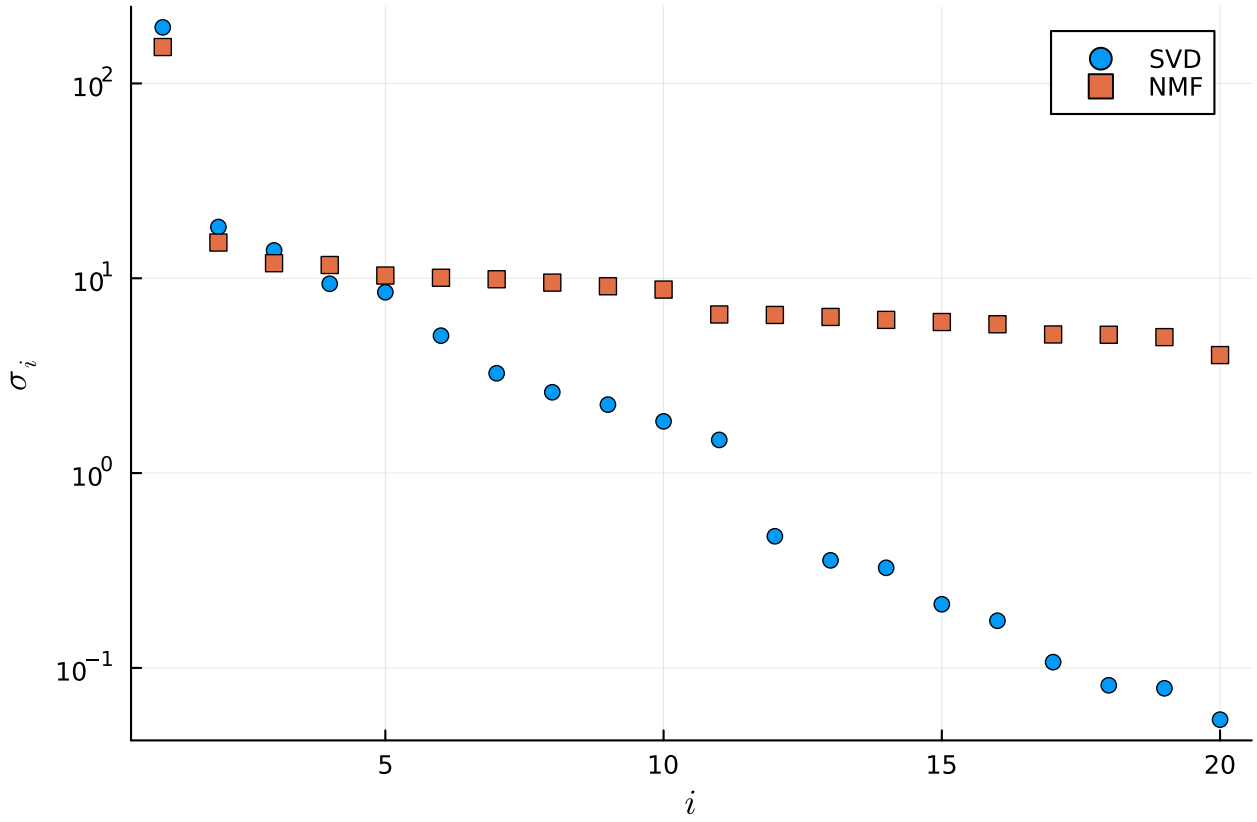
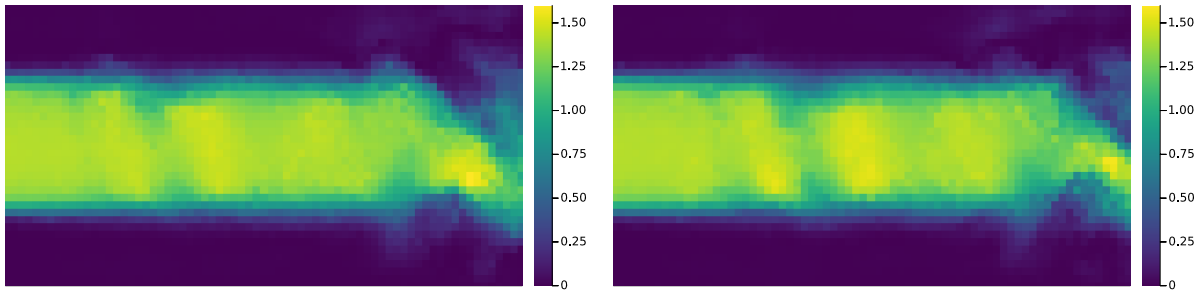
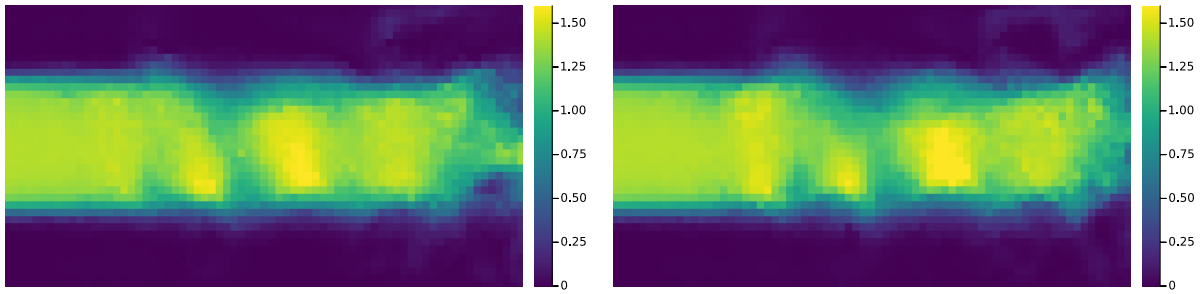


FIGURE 7.1 Valeurs singulières σ_i de la SVD et coefficients α_i d'une NMF de rang maximal (39), pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné.



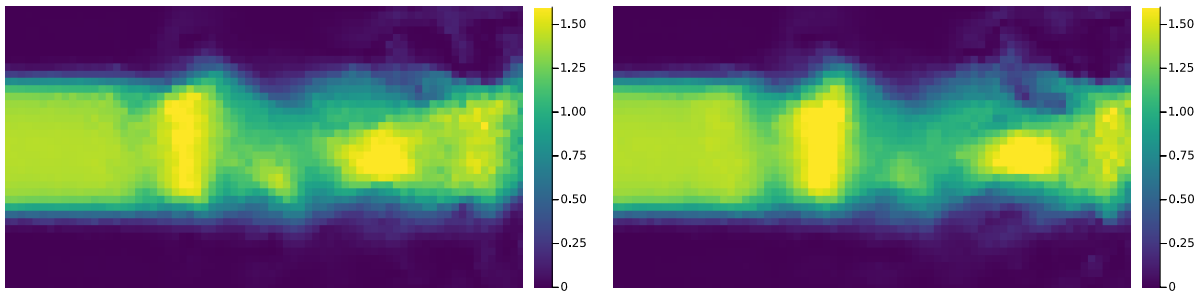
(a) $\boldsymbol{a}_1$

(b) $\boldsymbol{a}_5$



(c) $\boldsymbol{a}_9$

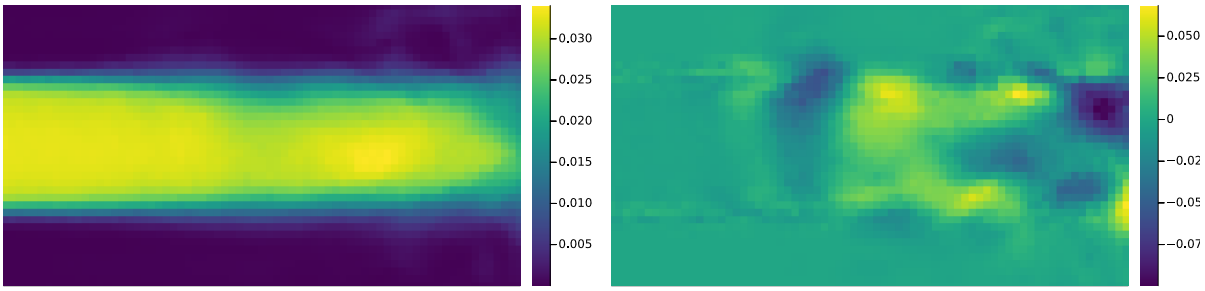
(d) $\boldsymbol{a}_{13}$



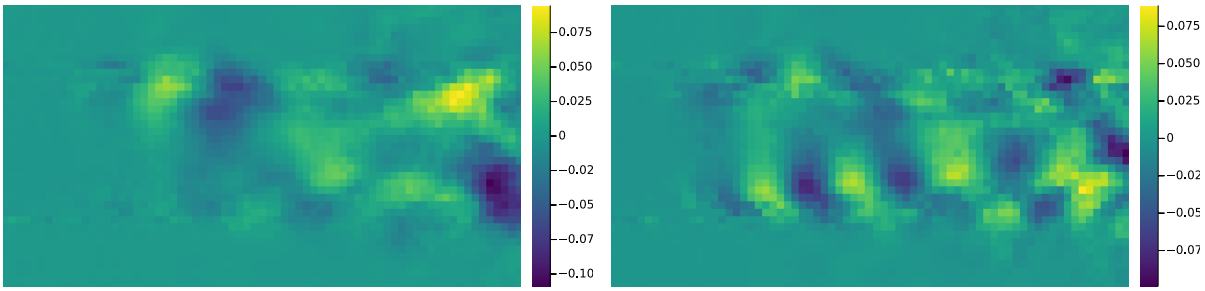
(e) $\boldsymbol{a}_{17}$

(f) $\boldsymbol{a}_{20}$

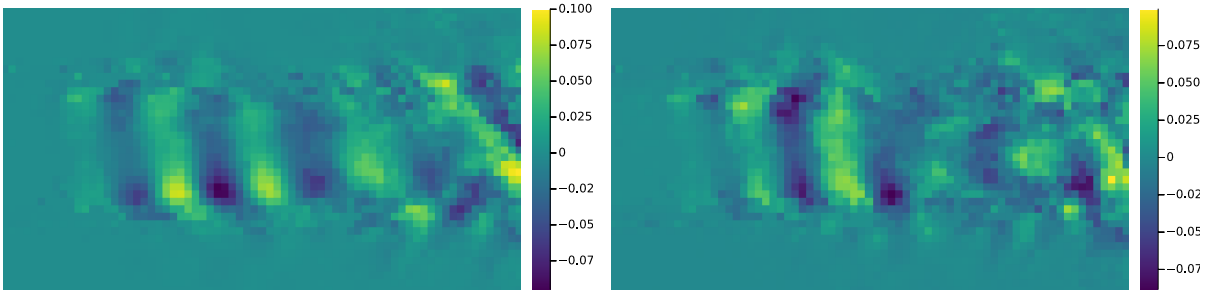
FIGURE 7.2 Colonnes $\boldsymbol{a}_i$ de la matrice A qui représentent l'énergie du jet confiné à différents moments t_i, où $t_{i+1} > t_i$, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné.



(a) $i = 1$ (b) $i = 2$

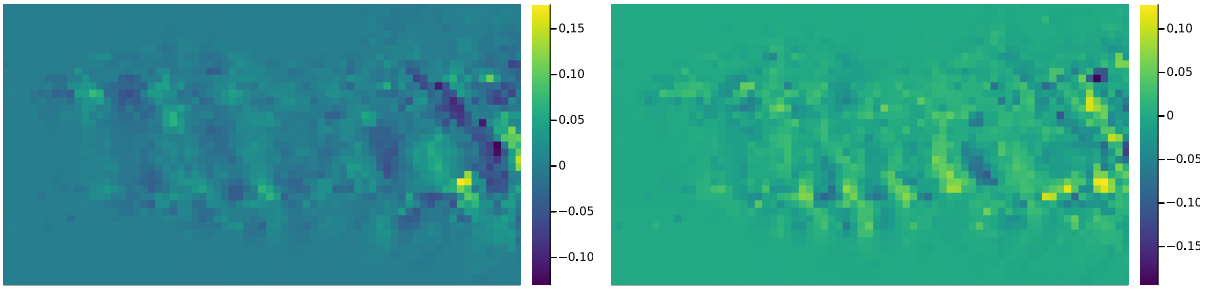


(c) $i = 3$ (d) $i = 4$

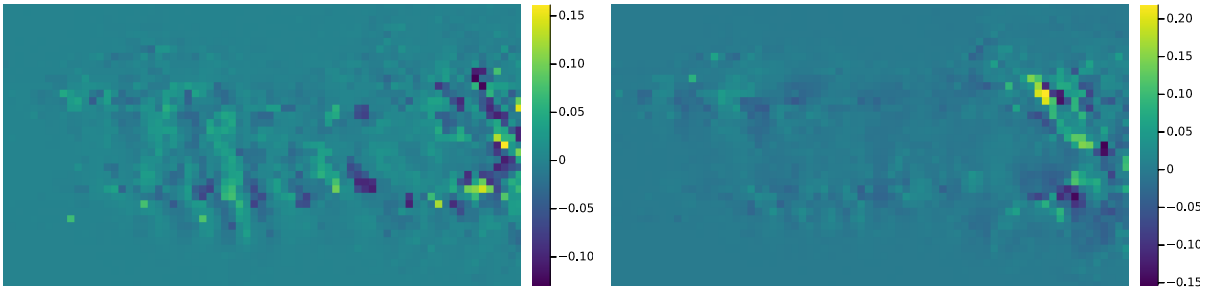


(e) $i = 5$ (f) $i = 6$

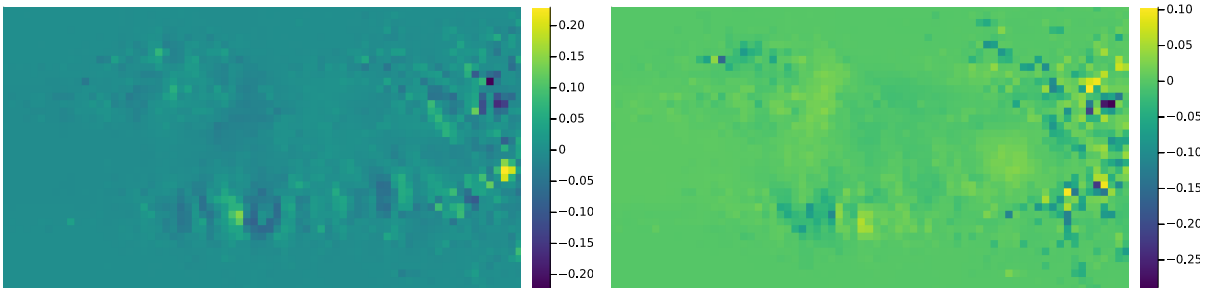
FIGURE 7.3 Vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ de la SVD de la matrice A, où $i = 1$ à 6, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné.



(a) $i = 7$ (b) $i = 8$



(c) $i = 9$ (d) $i = 12$



(e) $i = 16$ (f) $i = 20$

FIGURE 7.4 Vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ de la SVD de la matrice A, où $i \in \{7, 8, 9, 12, 16, 20\}$, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné.

7.2 Application de la NMF

Les coefficients α_i d'une NMF de rang 4 sont illustrés à la figure 7.1. On constate que le premier coefficient est d'un ordre de grandeur supérieur aux autres valeurs. Comme pour la SVD, ceci se produit parce que la NMF arrive à distinguer une composante $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ commune à tous les ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$. Les vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ sont illustrés aux figures 7.5 et 7.6. On remarque immédiatement que $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ ne semble pas approcher $\langle \boldsymbol{a} \rangle$ aussi bien que $\boldsymbol{u}_1$, comme on le constate à la figure 7.7. On trouve en effet que

$$\| \frac{\langle \boldsymbol{a} \rangle}{\| \langle \boldsymbol{a} \rangle \|} - \hat{\boldsymbol{w}}_1 \| = 0{,}241.$$

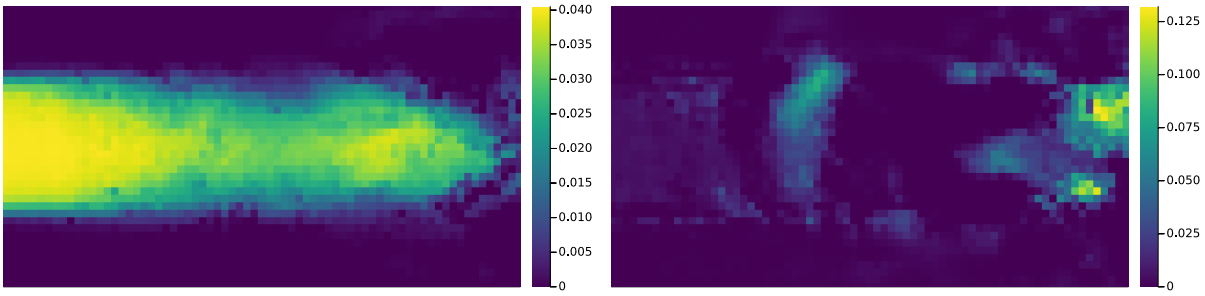
On n'est pas surpris par cet écart, étant donné la nature positive des coefficients de la NMF. On s'attend plutôt à ce que les vecteurs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ découpent les différents ensembles de données $\boldsymbol{a}_i$ en morceaux qui peuvent être additionnés par la suite pour reconstruire les caractéristiques de chaque ensemble. La valeur moyenne $\langle \boldsymbol{a} \rangle$ ne permet pas d'utiliser cette approche puisqu'une portion de chaque ensemble $\boldsymbol{a}_i$ s'y retrouvent ($\frac{1}{20}\boldsymbol{a}_i$ pour être précis),

$$\langle \boldsymbol{a} \rangle = \frac{1}{20} \sum_{i=1}^{20} \boldsymbol{a_i} = \frac{1}{20}\boldsymbol{a_1} + \cdots + \frac{1}{20}\boldsymbol{a_{20}}.$$

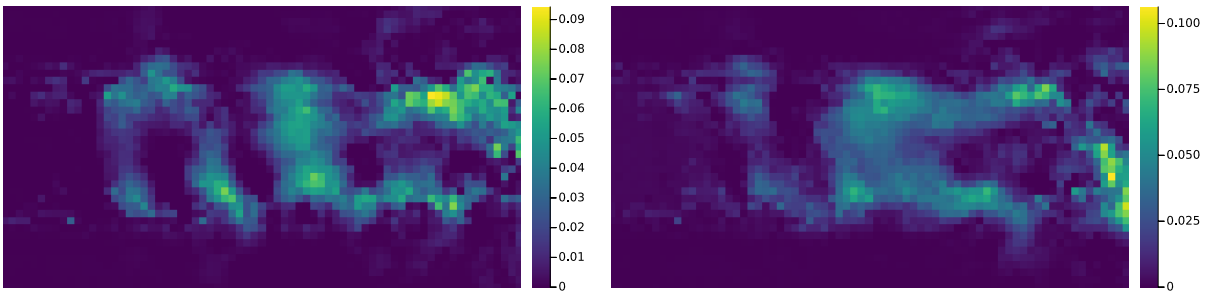
Il faudrait donc les soustraire à $\langle \boldsymbol{a} \rangle$ pour reconstruire chaque $\boldsymbol{a}_i$,

$$\boldsymbol{a_i} = 20\langle \boldsymbol{a} \rangle - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{20} \boldsymbol{a_j},$$

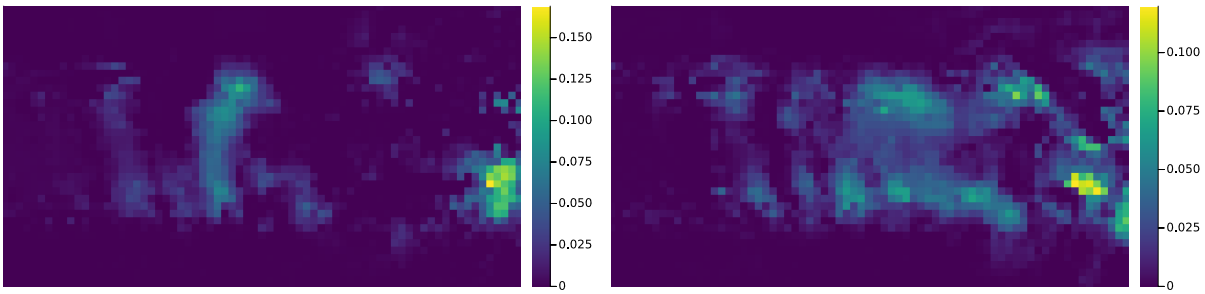
ce qui va à l'encontre de la contrainte de positivité des coefficients de WH. Ceci nous donne une bonne idée sur la façon d'interpréter $\hat{\boldsymbol{w}}_1$: il s'agit de ce qui est commun à tous les $\boldsymbol{a}_i$. Le vecteur positif $\hat{\boldsymbol{h}}_1$ permet de confirmer cette hypothèse puisque ses coefficients indiquent quelle partie de $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ il faut utiliser pour reconstruire chaque $\boldsymbol{a}_i$. Pour les données du jet, on trouve que chaque composante de $\hat{\boldsymbol{h}}_1$ est environ égale à 0,22. Comme ce vecteur est unitaire, ceci veut dire que chaque ensemble de données $\boldsymbol{a}_i$ reçoit pratiquement la même quantité de $\hat{\boldsymbol{w}}_i$. Les autres vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ donnent les autres morceaux nécessaires pour reconstruire les autres ensembles de données. Les algorithmes pour faire ces reconstructions proviennent des vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{h}}_i$. Ce qui rend la NMF plus difficile à définir est que pour $i \geq 2$, les vecteurs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ peuvent servir à décrire plus d'un ensemble de données $\boldsymbol{a}_i$ et en différentes proportions.



(a) $i = 1$ (b) $i = 2$

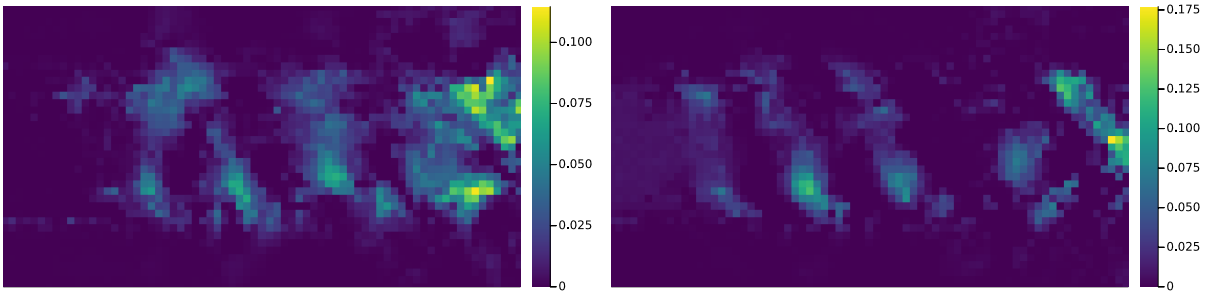


(c) $i = 3$ (d) $i = 4$

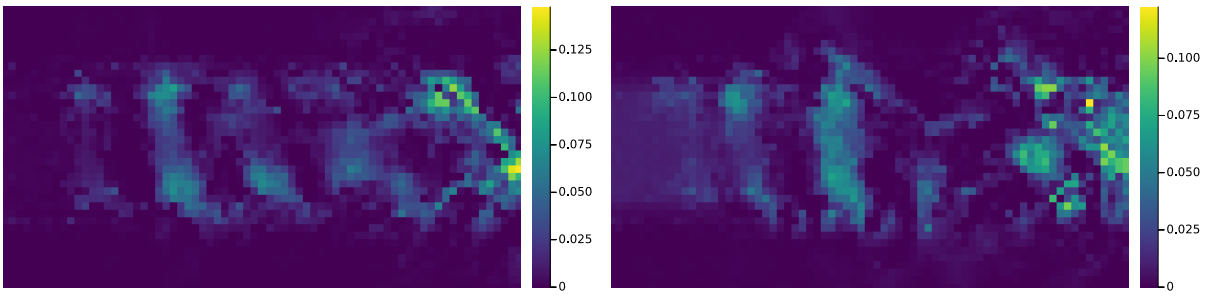


(e) $i = 5$ (f) $i = 6$

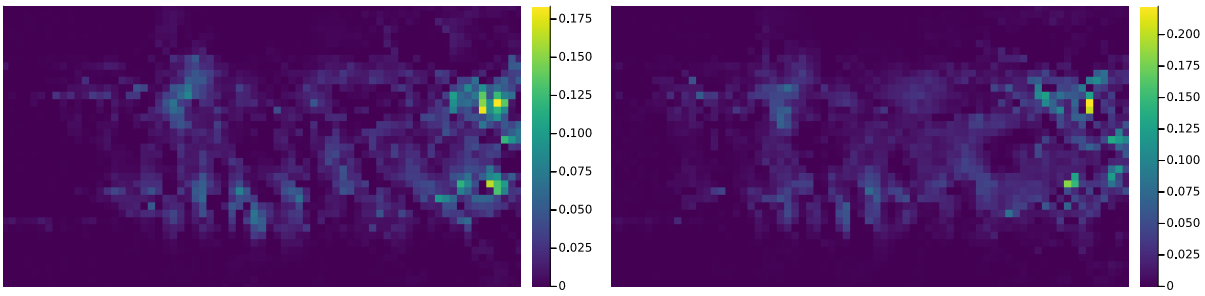
FIGURE 7.5 Vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ d'une NMF de rang maximal de la matrice A, où $i = 1$ à 6, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné.



(a) $i = 7$ (b) $i = 8$

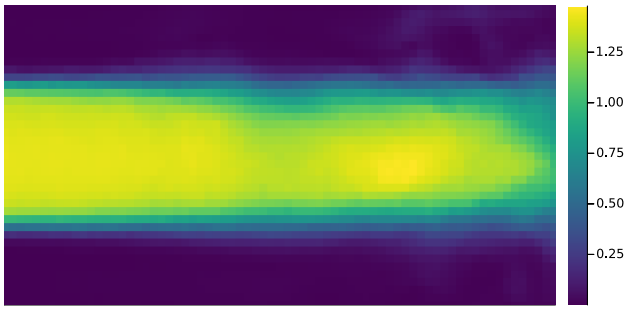


(c) $i = 9$ (d) $i = 12$

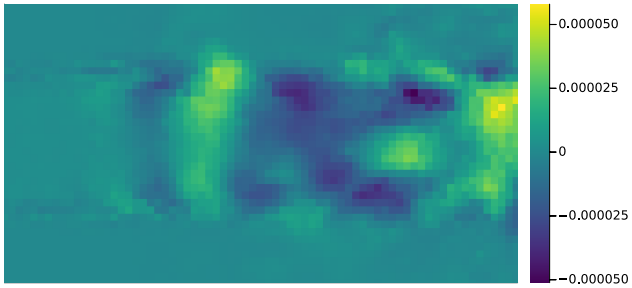


(e) $i = 16$ (f) $i = 20$

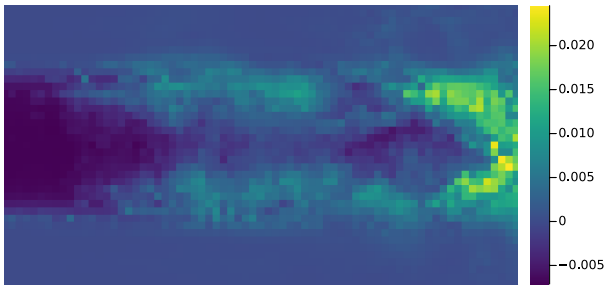
FIGURE 7.6 Vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ d'une NMF de rang maximal de la matrice A, où $i \in \{7, 8, 9, 12, 16, 20\}$, pour la collection d'ensembles de données de l'exemple du jet confiné.



(a) $\langle \boldsymbol{a}_i \rangle$



(b) $\frac{\langle \boldsymbol{a}_i \rangle}{\|\langle \boldsymbol{a}_i \rangle\|} - \boldsymbol{u}_1$



(c) $\frac{\langle \boldsymbol{a}_i \rangle}{\|\langle \boldsymbol{a}_i \rangle\|} - \hat{\boldsymbol{w}}_1$

FIGURE 7.7 Différence entre la valeur moyenne des colonnes $\boldsymbol{a}_i$ de A et le vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ de la SVD de A ainsi qu'avec le vecteur positif $\hat{\boldsymbol{w}}_1$.

7.3 En résumé

On constate que pour une collection d'ensembles de données plus complexes, la SVD et la NMF offrent des résultats intéressants, mais elles souffrent également de limitations. D'une part, la SVD offre un premier vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ qui semble bien représenter la valeur moyenne des ensembles de données, mais les autres vecteurs singuliers ne semblent pas simples à interpréter individuellement. La NMF permet d'obtenir des vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ qui ont une interprétation claire, mais la non unicité de cette décomposition signifie qu'on doit étudier attentivement chacun de ces vecteurs si on veut pouvoir en extraire une information utile. C'est comme si chaque NMF différente créait une nouvelle langue pour chaque livre qu'on souhaite lire. S'il faut apprendre un nouveau dictionnaire par cœur à chaque fois qu'on souhaite lire un livre, on a tout intérêt à aimer lire des dictionnaires. Néanmoins, on comprend que pour certaines tâches spécialisées, la NMF propose une approche intéressante, comme l'a révélé l'exemple de la fleur et de l'abeille.

Finalement, même si la SVD ne semble pas permettre une interprétation claire de tous ses vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$, la dernière remarque faite au sujet de la NMF va permettre de nous réconcilier avec la SVD. Le problème qui a été mis en lumière au sujet de la NMF est qu'on doit comprendre la signification de chaque vecteur positif $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ si on souhaite en tirer un avantage. Or, les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ n'offrent pas ce problème puisqu'ils contribuent tous à la matrice A. De plus, leur contribution est moins significative à mesure que i augmente. Ceci signifie qu'on peut contrôler et reproduire exactement les approximations qui seront construites à l'aide des vecteurs singuliers de la SVD. En d'autres termes, on peut construire une approximation pour chaque ensemble de données $\boldsymbol{a}_i$ à l'aide des k premiers vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$. Le problème revient alors à savoir si les approximations faites sont pertinentes.

CHAPITRE 8 APPROXIMATION DES DONNÉES D'UN ÉCOULEMENT TURBULENT

Dans ce chapitre, on montre qu'une approximation des données associées à un écoulement turbulent peut être obtenue à l'aide de la SVD ou à l'aide d'une NMF, sous les bonnes conditions. On montre également que la première matrice $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ de rang 1 obtenue par la SVD peut approximer l'écoulement moyen, toujours sous les bonnes conditions.

Les conditions qui permettent de faire ces approximations sont définies par la nature des données contenues dans la matrice qui sera décomposée. La nature de ces données est spécifique au contexte d'une simulation numérique d'un écoulement turbulent. Ceci nous permet de définir clairement le contexte dans lequel ces approximations sont valides, tout en définissant un cadre précis sur l'évolution de la turbulence. On ne cherche pas à approximer l'écoulement sur toute sa durée, mais seulement à un moment précis. Comme on l'a constaté plus tôt, un seul ensemble de données est insuffisant pour y arriver car les données sont incomplètes. On ne peut pas séparer la notion de turbulence de la notion de temps. En combinant plusieurs ensembles de données, on permet au temps d'être tenu en compte et c'est ce qui rend l'approximation plus précise. On doit toutefois prendre garde, car si trop de temps s'écoule, l'information contenue dans les données devient plus complexe et l'approximation devient de moins bonne qualité. On doit donc bien définir l'intervalle de temps sur lequel les ensembles de données seront considérés ainsi que le temps qui s'écoule entre chaque ensemble de mesures.

Dans ce qui suit, on produit d'abord la matrice qui sera décomposée, puis on énonce ses propriétés. Ensuite, on définit clairement le contexte dans lequel les approximations obtenues par la SVD et la NMF sont possibles. On termine en spécifiant la validité des approximations ainsi obtenues.

8.1 Matrice des états de l'écoulement et fluctuations du champ de vitesse

La nature des données étudiées est spécifique au contexte d'une simulation numérique d'un écoulement turbulent. L'objectif d'une telle simulation numérique est de générer des données pertinentes à l'étude de la turbulence. Ces données prennent généralement la forme d'une approximation numérique de l'évolution du champ de vitesse d'un écoulement. L'information pertinente est alors liée aux fluctuations de ce champ de vitesse et c'est ce qu'on souhaite approximer à l'aide d'une décomposition matricielle.

Une limite doit être placée sur la rapidité de l'évolution du champ de vitesse puisque la simulation

numérique doit demeurer stable tout au long de son exécution. Une évolution trop rapide pourrait rendre les résultats de la simulation imprécis, dans le meilleur des cas, et elle pourrait faire diverger rapidement la simulation dans le pire des cas. La condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) est un critère bien connu qui est souvent utilisé pour s'assurer que la discrétisation de l'évolution du champ de vitesse ne sera pas trop rapide lors d'une simulation numérique,

$$\frac{\Delta t}{h} U_0 < 1, \tag{8.1}$$

où h représente la taille de la discrétisation spatiale du domaine, Δt représente la taille du pas de temps entre chaque approximation du champ de vitesse et U_0 est la vitesse caractéristique de l'écoulement. La condition CFL peut être utilisée pour déterminer une borne supérieure sur Δt. On peut donc quantifier l'évolution du champ de vitesse à l'aide de cette borne.

On construit maintenant la matrice A, qu'on nomme *matrice des états*, pour laquelle on souhaite obtenir une approximation. La colonne i de A, notée $\boldsymbol{a}_i$, contient les données de l'écoulement au temps t_i et correspond au *vecteur d'état* à l'instant t_i. La façon dont les données sont ordonnées dans les vecteurs d'état n'est pas importante. On doit simplement conserver le même ordre pour tous les vecteurs d'état. Par exemple, si on note $w^i_{\ell,j}$ la composante ℓ du champ de vitesse au point j du domaine et à l'instant t_i, alors on a :

$$\begin{aligned} A &= \left[\boldsymbol{a}_1 \;\; \boldsymbol{a}_2 \;\; \cdots \;\; \boldsymbol{a}_{N_t} \right]; \\ \boldsymbol{a}_i &= (w^i_{1,1}, \cdots, w^i_{1,N_h}, w^i_{2,1}, \cdots, w^i_{2,N_h}, w^i_{3,1}, \cdots, w^i_{3,N_h}), \end{aligned}$$

où N_h correspond au nombre de points de données pour chaque composante du champ de vitesse et où N_t correspond au nombre total d'états. On note que les vecteurs d'état sont ordonnés dans la matrice des états de manière à ce que $t_{i+1} = t_i + \Delta t$. Les colonnes de la matrice A contiennent donc les différents états successifs qui décrivent l'évolution du champ de vitesse entre les temps t_1 et t_{N_t}. Cette construction n'est pas nouvelle et peut être comparée à l'approche « snapshot », utilisée par la POD [69].

Une propriété importante de la matrice des états est qu'elle ne sera jamais carrée, à moins d'avoir autant d'états que de données de vitesse ($N_t = 3N_h$). En général, on possède beaucoup moins de vecteurs d'état que de points de mesures ($N_t << N_h$). On souhaite utiliser le moins de vecteurs d'état possibles afin d'alléger les calculs sans toutefois compromettre la qualité de l'approximation. La matrice A sera donc grande et mince et on aura que $\text{rang}(A) = N_t$. Par exemple, il n'est pas rare d'avoir quelques millions de points de mesures alors qu'on aura à notre disposition que quelques centaines ou quelques milliers de vecteurs d'état. On doit déterminer une borne supérieure sur le nombre d'états N_t de manière à ce que l'évolution de l'écoulement ne devienne pas trop complexe

sur l'intervalle (t_1, t_{N_t}). Cette borne nous permettra également de limiter le nombre d'états à utiliser.

Pour identifier la borne qui sera imposée sur N_t, on doit réécrire la matrice des états à l'aide d'une décomposition simple qui nous permettra de mettre en évidence l'évolution du champ de vitesse. On rappelle qu'une simulation numérique calcule une approximation d'un écoulement à l'aide d'une suite de corrections $\boldsymbol{\delta w}^i$ afin de mettre à jour l'approximation numérique $\boldsymbol{w}^i$ pour le pas de temps suivant :

$$\boldsymbol{w}^{i+1} = \boldsymbol{w}^i + \boldsymbol{\delta w}^i.$$

Ceci nous permet d'écrire la relation

$$\boldsymbol{a}_{i+1} = \boldsymbol{a}_i + \boldsymbol{\delta a}_i, \tag{8.2}$$

pour les colonnes de A, où $\boldsymbol{\delta a}_i$ est la correction $\boldsymbol{\delta w}^i$, réécrite sous la forme d'un vecteur d'état. La décomposition cherchée pour la matrice des états est donc

$$\begin{aligned} A &= \boldsymbol{a}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\delta a}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\delta a}_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{\delta a}_{N_t-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ &= \boldsymbol{a}_1 \sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\delta a}_1 \sum_{i=2}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\delta a}_2 \sum_{i=3}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{\delta a}_{N_t-1} \boldsymbol{e}_{Nt}^{\mathrm{T}} \\ &= \boldsymbol{a}_1 \sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}} + \sum_{j=1}^{N_t-1} \sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{\delta a}_j \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}, \end{aligned} \tag{8.3}$$

où les $\boldsymbol{e}_i$ sont les vecteurs de la base canonique de dimension N_t (les colonnes de la matrice identité I_{N_t}). En général, on a que $\|\boldsymbol{\delta w}^i\| << \|\boldsymbol{w}^i\|$ afin de respecter la condition CFL, ce qui implique que $\|\boldsymbol{\delta a}_i\| << \|\boldsymbol{a}_1\|$ et donc que le premier terme de la décomposition (8.3) domine. On note que cette hypothèse n'est valide que si N_t n'est pas trop grand. On peut donc obtenir une borne pour N_t en imposant

$$\frac{\|A - \boldsymbol{a}_1 \sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\|}{\|\boldsymbol{a}_1 \sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\|} < \epsilon, \tag{8.4}$$

où ϵ correspond à la tolérance qu'on définit sur l'évolution du champ de vitesse, i.e. plus ϵ est petit, plus les vecteurs d'état $\boldsymbol{a}_i$ se ressemblent. Il faut noter que l'inégalité (8.4) est une mesure de la différence entre le vecteur d'état $\boldsymbol{a}_1$ et tous les autres vecteurs d'état contenus dans A. Il faut donc penser à la valeur de ϵ comme une mesure de l'erreur à l'échelle de tous les états simultanément.

Pour ramener cette valeur à l'échelle d'un seul état, il faut diviser ϵ par le nombre d'états N_t. On peut donc voir ϵ comme une borne sur la différence entre un état quelconque contenu dans A et le premier état en multipliant par le nombre d'états, comme on s'apprête à le démontrer. Cette remarque nous aide à comprendre quelle valeur attribuer à ϵ. En réécrivant les termes de l'inégalité (8.4), on trouve que

$$\begin{aligned}
\|A - \boldsymbol{a}_1 \sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\| &= \|\sum_{j=1}^{N_t-1} \boldsymbol{\delta a}_j \sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\| \\
&\leq \sum_{j=1}^{N_t-1} \|\boldsymbol{\delta a}_j \sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\| \\
&= \sum_{j=1}^{N_t-1} \|\boldsymbol{\delta a}_j\| \|\sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\| \\
&\leq \left[\sum_{j=1}^{N_t-1} \|\boldsymbol{\delta a}_j\|^2\right]^{\frac{1}{2}} \left[\sum_{j=1}^{N_t-1} \|\sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\|^2\right]^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \left[\sum_{j=1}^{N_t-1} \left(\max_{i\in\mathcal{J}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \left[\sum_{j=1}^{N_t-1} N_t - j\right]^{\frac{1}{2}} \\
&= \max_{i\in\mathcal{J}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \sqrt{N_t - 1} \sqrt{\frac{N_t^2 - N_t}{2}} \\
&= \max_{i\in\mathcal{J}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \sqrt{\frac{N_t(N_t-1)^2}{2}} \\
&\leq \max_{i\in\mathcal{J}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \sqrt{N_t^3}, \qquad (8.5)
\end{aligned}$$

où $\mathcal{J} = \{1, \cdots, N_t - 1\}$, et aussi

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{a}_1 \sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\| &= \left[\mathrm{tr}\left(\left(\sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_1 \sum_{j=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \\
&= \|\boldsymbol{a}_1\| \left[\mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^{N_t}\sum_{j=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \\
&= \|\boldsymbol{a}_1\| \sqrt{\mathrm{tr}\,(\,\mathrm{I}_{N_t})} \\
&= \|\boldsymbol{a}_1\| \sqrt{N_t}, \qquad (8.6)
\end{aligned}$$

où on a utilisé l'identité $\|B\|^2 = \mathrm{tr}(B^{\mathrm{T}}B)$ puisqu'on utilise la norme de Frobenius. En utilisant les relations (8.5) et (8.6), l'inégalité (8.4) devient

$$\max_{i \in \mathcal{J}} \left\{ \frac{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \right\} N_t < \epsilon. \tag{8.7}$$

En posant $\epsilon = 1$, on obtient la borne supérieure

$$N_t < \max_{i \in \mathcal{J}} \left\{ \frac{\|\boldsymbol{a}_1\|}{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|} \right\}. \tag{8.8}$$

Par exemple, il est commun d'avoir $\|\boldsymbol{\delta a}_i\|/\|\boldsymbol{a}_1\| \approx 0,01$ pour une simulation numérique, ce qui veut dire qu'on pourrait inclure jusqu'à environ $N_t = 100$ états avant que le premier état $\boldsymbol{a}_1$ ne domine plus la décomposition de la matrice des états. Si on dépasse ce nombre d'états, on peut s'attendre à ce que l'écart entre le premier et le dernier état soit suffisamment grand pour modifier significativement la décomposition de la matrice A. À l'aide de la condition CFL (8.1),

$$\Delta t < \frac{h}{U_0}, \tag{8.9}$$

on a maintenant les conditions (8.9) et (8.8) qui nous permettent de nous assurer que les états sont suffisamment similaires pour que la décomposition de la matrice des états révèle les caractéristiques de l'écoulement à un instant précis. Si ces inégalités ne sont pas respectées, il se pourrait que la dynamique contenue dans la matrice des états devienne trop complexe et que l'approximation qu'on tente de faire échoue.

8.2 Analyse de la SVD de la matrice des états

La SVD réduite de la matrice A permet d'écrire l'évolution de l'écoulement comme une somme de matrices de rang 1 :

$$\begin{aligned} A &= U\Sigma V^{\mathrm{T}} \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \cdots & \boldsymbol{u}_{N_t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_{N_t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \cdots & \boldsymbol{v}_{N_t} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ &= \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_{N_t} \boldsymbol{u}_{N_t} \boldsymbol{v}_{N_t}^{\mathrm{T}}, \end{aligned} \tag{8.10}$$

où $\sigma_i \geq \sigma_{i+1}$. Le théorème d'Eckart-Young nous dit que la meilleure approximation de rang k de A est

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}.$$

Ceci veut dire que pour toute matrice B de rang k et de même taille que A, on a que

$$\|A - B\| \geq \|A - A_k\|.$$

Ce résultat est important parce qu'il signifie que les premiers termes $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ contiennent la partie la plus importante de l'information contenue dans A. Pour comprendre comment relier ces matrices de rang 1 au champ de vitesse d'un écoulement, on doit d'abord déterminer le rôle de σ_i, $\boldsymbol{u}_i$ et $\boldsymbol{v}_i$.

Les valeurs singulières et les vecteurs singuliers de A correspondent aux valeurs propres et aux vecteurs propres des matrices AA^{T} et $A^{\mathrm{T}}A$. Puisque AA^{T} et $A^{\mathrm{T}}A$ sont symétriques et à valeurs réelles, leurs valeurs propres sont réelles et les vecteurs propres sont orthonormaux. Dans le contexte qui nous concerne, ces matrices ne sont pas seulement symétriques, elles sont aussi définies positives [1]. La SVD permet d'établir les relations :

$$A\boldsymbol{v}_i = \sigma_i \boldsymbol{u}_i; \tag{8.11}$$

$$A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i = \sigma_i \boldsymbol{v}_i, \tag{8.12}$$

où

$$A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{v}_i = \sigma_i^2 \boldsymbol{v}_i \quad \text{et} \quad AA^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i = \sigma_i^2 \boldsymbol{u}_i.$$

Il faut donc que les valeurs singulières σ_i portent les mêmes unités que la matrice A (unités de vitesse). Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i \in C(A)$ (l'espace des colonnes de A), ce qui signifie qu'ils sont représentatifs des états de l'écoulement. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i \in C(A^{\mathrm{T}})$ (l'espace des lignes de A), ce qui signifie qu'ils sont représentatifs de l'évolution des états de l'écoulement. Ces deux ensembles de vecteurs singuliers n'ont pas d'unités et représentent ainsi respectivement la corrélation spatiale et la corrélation temporelle des états de l'écoulement. Dans ce cas, où N_t est suffisamment petit (voir l'inégalité (8.8)), on se retrouve donc à avoir l'approximation

1. En général, on peut seulement garantir que la matrice $A^{\mathrm{T}}A$ (ou AA^{T}) sera semi-définie positive parce qu'on pourrait avoir au moins une valeur propre nulle. Toutefois, puisque $N_t << N_h$ et que les vecteurs d'état ne se répètent jamais exactement, on peut avoir des valeurs propres qui sont petites mais jamais nulles.

$$\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \approx \boldsymbol{a}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{a}_1 \sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}. \tag{8.13}$$

Cette approximation nous est inspirée par la décomposition (8.3) et par les résultats obtenus plus tôt dans le chapitre. La première valeur singulière σ_1 de la SVD semble toujours être supérieure d'au moins un ordre de grandeur aux autres valeurs lorsque les colonnes de A contiennent toutes une quantité importante d'informations similaires. Or, la construction de A et l'inégalité (8.8) peuvent nous garantir que ce sera toujours le cas. Mettons à l'épreuve cette observation. La SVD permet de trouver la matrice A_1 de rang 1 qui minimise l'écart $\|A - A_1\|$, sans être exacte. On peut donc vérifier l'approximation (8.13) en la comparant aux équations (8.11) et (8.12). L'approximation (8.13) semble nous indiquer que $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \approx \frac{1}{\sqrt{N_t}}[1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]$ et que $\boldsymbol{u}_1$ est ainsi orienté dans la même direction que $\boldsymbol{a}_1$. On vérifie ceci d'abord à l'aide de l'équation (8.11) et ensuite à l'aide de l'équation (8.12) :

$$\begin{aligned}
A\frac{1}{\sqrt{N_t}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} &= \left(\boldsymbol{a}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\delta a}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{\delta a}_{N_t-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \right) \frac{1}{\sqrt{N_t}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= \frac{\boldsymbol{a}_1}{\sqrt{N_t}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{\boldsymbol{\delta a}_1}{\sqrt{N_t}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} + \cdots + \frac{\boldsymbol{\delta a}_{N_t-1}}{\sqrt{N_t}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= \sqrt{N_t}\boldsymbol{a}_1 + \frac{(N_t-1)}{\sqrt{N_t}}\boldsymbol{\delta a}_1 + \frac{(N_t-2)}{\sqrt{N_t}}\boldsymbol{\delta a}_2 + \cdots + \frac{1}{\sqrt{N_t}}\boldsymbol{\delta a}_{N_t-1} \\
&= \sqrt{N_t}\boldsymbol{a}_1 + \sum_{i=1}^{N_t-1} \frac{(N_t-i)}{\sqrt{N_t}}\boldsymbol{\delta a}_i \\
&= \sqrt{N_t}\boldsymbol{a}_1 + \varepsilon_1;
\end{aligned} \tag{8.14}$$

et

$$
\begin{aligned}
A^{\mathrm{T}}\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|} &= \left(\boldsymbol{a}_1\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\delta a}_1\begin{bmatrix}0\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{\delta a}_{N_t-1}\begin{bmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \\
&= \left(\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} + \begin{bmatrix}0\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}\boldsymbol{\delta a}_1^{\mathrm{T}} + \cdots + \begin{bmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\end{bmatrix}\boldsymbol{\delta a}_{N_t-1}^{\mathrm{T}}\right)\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \\
&= \|\boldsymbol{a}_1\|\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} + \frac{\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|}\begin{bmatrix}0\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} + \cdots + \frac{\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta a}_{N_t-1}}{\|\boldsymbol{a}_1\|}\begin{bmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\1\end{bmatrix} \\
&= \|\boldsymbol{a}_1\|\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} + \sum_{j=1}^{N_t-1}\left(\frac{\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta a}_j}{\|\boldsymbol{a}_1\|}\sum_{i=j+1}^{N_t}\boldsymbol{e}_i\right) \\
&= \|\boldsymbol{a}_1\|\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} + \mathcal{E}_2. \qquad (8.15)
\end{aligned}
$$

Ceci nous permet de conclure que si $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \approx \frac{1}{\sqrt{N_t}}[1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]$, alors $\boldsymbol{u}_1$ est proportionnel à $\boldsymbol{a}_1$ et inversement, si $\boldsymbol{u}_1$ est proportionnel à $\boldsymbol{a}_1$, alors $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \approx \frac{1}{\sqrt{N_t}}[1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]$. Ceci est conditionnel à ce que $\|\mathcal{E}_1\| < \sqrt{N_t}\|\boldsymbol{a}_1\|$ et $\|\mathcal{E}_2\| < N_t\|\boldsymbol{a}_1\|$. On montre que ces deux conditions sont effectivement vérifiées,

$$
\begin{aligned}
\|\mathcal{E}_1\| &= \| \sum_{i=1}^{N_t-1} \frac{(N_t-i)}{\sqrt{N_t}} \boldsymbol{\delta a}_i \| \\
&\leq \sum_{i=1}^{N_t-1} \frac{(N_t-i)}{\sqrt{N_t}} \|\boldsymbol{\delta a}_i\| \\
&\leq \max_{i\in\mathcal{I}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \sum_{i=1}^{N_t-1} \frac{(N_t-i)}{\sqrt{N_t}} \\
&= \max_{i\in\mathcal{I}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \left(\sqrt{N_t}(N_t-1) - \frac{1}{2}\sqrt{N_t}(N_t-1) \right) \\
&= \max_{i\in\mathcal{I}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \left(\frac{1}{2}\sqrt{N_t}(N_t-1) \right) \\
&< \frac{1}{2}\sqrt{N_t} N_t \frac{\|\boldsymbol{a}_1\|}{N_t} = \frac{\sqrt{N_t}}{2}\|\boldsymbol{a}_1\|,
\end{aligned}
$$

et

$$
\begin{aligned}
\|\mathcal{E}_2\| &= \| \sum_{j=1}^{N_t-1} \left(\frac{\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\delta a}_j}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i \right) \| \\
&\leq \| \sum_{j=1}^{N_t-1} \left(\|\boldsymbol{\delta a}_j\| \sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i \right) \| \\
&\leq \max_{i\in\mathcal{I}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \| \sum_{j=1}^{N_t-1} \sum_{i=j+1}^{N_t} \boldsymbol{e}_i \| \\
&\leq \max_{i\in\mathcal{I}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \left[\sum_{i=1}^{N_t-1} i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \max_{i\in\mathcal{I}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \left[\int_0^{N_t} x^2 dx \right]^{\frac{1}{2}} \\
&= \sqrt{\frac{N_t^3}{3}} \max_{i\in\mathcal{I}} \{\|\boldsymbol{\delta a}_i\|\} \\
&< \sqrt{\frac{N_t^3}{3}} \frac{\|\boldsymbol{a}_1\|}{N_t} = \frac{N_t}{\sqrt{3}}\|\boldsymbol{a}_1\|,
\end{aligned}
$$

où on a utilisé l'inégalité (8.8).

Les relations (8.14) et (8.15) nous permettent donc de faire les approximations

$$A\frac{1}{\sqrt{N_t}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} \approx \sqrt{N_t}\boldsymbol{a}_1 = (\sqrt{N_t}\|\boldsymbol{a}_1\|)\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|},$$

et

$$A^{\mathrm{T}}\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \approx \|\boldsymbol{a}_1\|\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} = (\sqrt{N_t}\|\boldsymbol{a}_1\|)\frac{1}{\sqrt{N_t}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}.$$

Or, ces approximations ont précisément la forme des équations (8.11) et (8.12), ce qui nous permet de conclure que

$$\boldsymbol{v}_1 \approx \frac{1}{\sqrt{N_t}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_1 \approx \frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \quad \text{et} \quad \sigma_1 \approx \sqrt{N_t}\|\boldsymbol{a}_1\|. \tag{8.16}$$

Le raisonnement a été fait en utilisant la relation $\boldsymbol{a}_{i+1} = \boldsymbol{a}_i + \boldsymbol{\delta a}_i$ pour $i = 1, 2, \cdots, N_t$ et en utilisant $\boldsymbol{\delta a}_1$ pour exprimer tous les $\boldsymbol{\delta a}_i$. Toutefois, rien n'empêche de faire le même raisonnement en réécrivant chaque $\boldsymbol{\delta a}_i$ comme une correction d'un autre état de l'écoulement. Ceci veut donc dire qu'en général, si N_t n'est pas trop grand, on devrait avoir

$$\boldsymbol{v}_1 \approx \frac{1}{\sqrt{N_t}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_1 \approx \frac{\boldsymbol{a}_i}{\|\boldsymbol{a}_i\|} \quad \text{et} \quad \sigma_1 \approx \sqrt{N_t}\|\boldsymbol{a}_i\|.$$

Il est intéressant de remarquer que la première valeur singulière σ_1 n'est pas seulement une mesure de l'écoulement ($\|\boldsymbol{a}_i\|$), mais elle est aussi une fonction du nombre d'états contenus dans A via $\sqrt{N_t}$. On remarque également que l'approximation du vecteur singulier $\boldsymbol{v}_1$ est en effet un vecteur positif et qu'il ne dépend pas des états de l'écoulement. C'est précisément un vecteur de cette

forme qu'on a observé à la section 7. L'approximation du vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ est indépendante de l'état utilisé pour l'exprimer. Ceci est une conséquence de la borne supérieure qui est placée sur N_t (voir l'inégalité (8.8)). Dans le cas où N_t est trop grand, les états vont varier plus fortement sur l'intervalle (t_1, t_{N_t}), ce qui risque de produire des valeurs singulières secondaires d'un ordre de grandeur comparable à σ_1. Dans ce cas, le premier mode de la SVD n'est plus simplement proportionnel à un seul état $\|\boldsymbol{a}_i\|$, mais il devient plutôt une combinaison linéaire de quelques états représentatifs de la dynamique de l'écoulement sur cet intervalle de temps. Ceci nous indique pourquoi la valeur moyenne des états $\langle \boldsymbol{a}_i \rangle$ a donné une bonne approximation du vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ comme on l'a observé à la section 7 : lorsque la borne (8.8) pour N_t est respectée, alors $\frac{\langle \boldsymbol{a} \rangle}{\|\langle \boldsymbol{a} \rangle\|}$ est une aussi bonne approximation que $\frac{\boldsymbol{a}_i}{\|\boldsymbol{a}_i\|}$ pour $\boldsymbol{u}_1$. On ne doit pas être surpris de ce résultat puisque $\langle \boldsymbol{a} \rangle$ devrait mieux représenter tous les états qu'un seul état $\boldsymbol{a}_i$ individuel.

Il faut toutefois faire attention à ne pas associer $\boldsymbol{u}_1$ à $\langle \boldsymbol{a} \rangle$. Il s'agit d'une bonne approximation dans notre contexte, mais cette relation n'est pas exacte. Pour s'en convaincre, il suffit de prendre une matrice pour laquelle les colonnes varient beaucoup d'une à l'autre. Un cas extrême qui illustre bien ce point est donné par la matrice identité :

$$\mathrm{I}_N = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ & & & & 0 \\ 0 & \cdots & & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \frac{\langle \boldsymbol{e}_i \rangle}{\|\langle \boldsymbol{e}_i \rangle\|} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} \\ \frac{1}{\sqrt{N}} \\ \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{N}} \end{bmatrix} \neq \boldsymbol{u}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

On termine avec la quantification de l'erreur produite par l'approximation

$$A \approx A_k = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^{\mathrm{T}}. \tag{8.17}$$

Le théorème d'Eckart-Young nous garantit que l'approximation (8.17) est celle qui minimise l'erreur $\|A - B\|$. En norme de Frobenius, ceci nous donne la valeur suivante pour l'erreur de cette approximation,

$$\begin{aligned}
\|A - A_k\| &= \|\sigma_{k+1}\boldsymbol{u}_{k+1}\boldsymbol{v}_{k+1}^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^{\mathrm{T}}\| \\
&= \| \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_{k+1} & \cdots & \boldsymbol{u}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{k+1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_{k+1}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_r^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \| \\
&= \sqrt{\sigma_{k+1}^2 + \cdots + \sigma_r^2}. \qquad (8.18)
\end{aligned}$$

L'erreur relative est donc

$$\begin{aligned}
\frac{\|A - A_k\|}{\|A\|} &= \sqrt{\frac{\sigma_{k+1}^2 + \cdots + \sigma_r^2}{\sigma_1^2 + \cdots + \sigma_r^2}} \\
&\leq \sqrt{\frac{\sigma_{k+1}^2 + \cdots + \sigma_r^2}{\sigma_1^2}} \\
&= \sqrt{\frac{\sigma_{k+1}^2}{\sigma_1^2} + \cdots + \frac{\sigma_r^2}{\sigma_1^2}}. \qquad (8.19)
\end{aligned}$$

Ceci nous donne une façon rapide et efficace pour estimer numériquement l'erreur relative,

$$\frac{\|A - A_k\|}{\|A\|} \approx \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_1}.$$

Cette approximation peut être imprécise si les valeurs singulières σ_i ne décroissent pas assez rapidement à partir de $i = k+1$. Il suffit alors d'utiliser la valeur singulière suivante, σ_{k+2}, pour évaluer le ratio $\frac{\sigma_{k+2}}{\sigma_1}$ et le comparer à $\frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_1}$. Si les deux ratios sont les mêmes, alors on sait qu'on a peut-être trop sous-évalué l'erreur relative et ceci nous indique que la contribution de $\sigma_{k+2}\boldsymbol{u}_{k+2}\boldsymbol{v}_{k+2}^{\mathrm{T}}$ est comparable à celle de $\sigma_{k+1}\boldsymbol{u}_{k+1}\boldsymbol{v}_{k+1}^{\mathrm{T}}$. On peut alors décider de conserver l'approximation A_k ou d'utiliser plutôt A_{k+1}.

8.3 Analyse de la NMF

L'analyse de la NMF est plus compliquée que celle de la SVD puisqu'on ajoute la contrainte de positivité. On souhaite présenter ici seulement quelques résultats qui permettent d'estimer la précision d'une approximation faite à l'aide d'une NMF. Il faudrait procéder à une étude plus approfondie de la NMF pour bien mettre en lumière son potentiel dans le contexte des écoulements turbulents. On rappelle d'abord quelques éléments au sujet de la NMF et de son application dans le contexte qui nous intéresse. On détermine ensuite une borne supérieure pour l'erreur qui s'applique à cette approximation.

Définition naïve de la NMF

On a vu plus tôt que la NMF est une décomposition qui respecte la positivité des coefficients de A. Elle permet de décomposer la matrice A sous la forme

$$A = WH + E_r = \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}_1 \cdots \boldsymbol{w}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{h}_r^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} + E_r = \boldsymbol{w}_1 \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{w}_r \boldsymbol{h}_r^{\mathrm{T}} + E_r, \tag{8.20}$$

où r est le rang de WH, E_r est l'erreur de représentation et où les coefficients de W et H sont positifs : $W_{ij} \geq 0$ et $H_{ij} \geq 0$. On a vu également qu'on peut réécrire cette décomposition d'une manière qui permet de mesurer et d'ordonner la contribution de chaque matrice $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 en utilisant des vecteurs positifs $\hat{\boldsymbol{w}}_i$ et $\hat{\boldsymbol{h}}_i$ qui sont unitaires. La produit WH de la décomposition (8.20) peut donc s'écrire sous la forme

$$WH = \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{r} \|\boldsymbol{w}_i\| \|\boldsymbol{h}_i\| \frac{\boldsymbol{w}_i}{\|\boldsymbol{w}_i\|} \frac{\boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}}{\|\boldsymbol{h}_i\|} = \sum_{i=1}^{r} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}, \tag{8.21}$$

où $\alpha_i = \|\boldsymbol{w}_{p_i}\| \|\boldsymbol{h}_{p_i}\|$, $\boldsymbol{w}_{p_i} = \|\boldsymbol{w}_{p_i}\| \hat{\boldsymbol{w}}_i$ et $\boldsymbol{h}_{p_i} = \|\boldsymbol{h}_{p_i}\| \hat{\boldsymbol{h}}_i$. On note qu'on a réordonné les termes dans le dernier terme de l'égalité (8.21) de manière à ce que $\alpha_i \geq \alpha_{i+1}$.

La positivité des coefficients de W et de H nous force à utiliser l'énergie du champ de vitesse puisque cette quantité est positive en tout temps. Cette restriction n'est pas trop limitante a priori puisqu'en général, l'énergie est une quantité d'intérêt dans l'étude de la turbulence et en particulier dans le contexte qui nous intéresse. On peut donc reprendre la formulation de la matrice des états A, mais cette fois ci, les colonnes $\boldsymbol{a}_i$ représentent l'énergie de l'écoulement à différents instants.

NMF de rang 1 ($r = 1$)

On peut relier une NMF de rang 1 directement à l'approximation $A_1 = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ de rang 1 obtenue par la SVD. Ce lien est important puisqu'il nous permet de mieux comprendre les matrices $\alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 d'une NMF de rang r quelconque. Comme la matrice A est à coefficients positifs, le théorème de Perron-Frobenius garantit que le vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ sera positif. On sait que le vecteur singulier $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ peut être approximé par le vecteur positif $\frac{1}{\sqrt{N_t}}[1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]$ comme l'a révélé notre étude de la SVD. La matrice A_1 répond donc à la définition de la NMF et peut être utilisée comme NMF de rang 1 :

$$A = WH + E_1 = A_1 + E_1.$$

Le théorème d'Eckart-Young nous dit qu'on n'arrivera pas à trouver une meilleure approximation et le théorème de Perron-Frobenius nous garantit que cette matrice est construite à partir de vecteurs positifs. La formulation de la NMF nous permet de poser $\alpha_1 = \sigma_1$, $\hat{\boldsymbol{w}}_1 = \boldsymbol{u}_1$ et $\hat{\boldsymbol{h}}_1 = \boldsymbol{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{N_t}}[1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]^{\mathrm{T}}$.

NMF de rang $r > 1$

Quel est le rôle de $\alpha_1 \hat{\boldsymbol{w}}_1 \hat{\boldsymbol{h}}_1^{\mathrm{T}}$ dans une NMF de rang $r > 1$? Pour une NMF de rang 1, on arrive à associer WH à l'approximation A_1 de rang 1 obtenue par la SVD. On sait qu'en modifiant le rang r de la NMF, on doit modifier les matrices W et H et donc la matrice $\alpha_1 \hat{\boldsymbol{w}}_1 \hat{\boldsymbol{h}}_1^{\mathrm{T}}$ dépend de r. Comme on l'a remarqué à l'aide des exemples présentés plus tôt dans le chapitre, l'approximation $\alpha_1 \hat{\boldsymbol{w}}_1 \hat{\boldsymbol{h}}_1^{\mathrm{T}}$ ne représente pas bien la valeur moyenne de l'énergie sur tous les états lorsque $r > 1$.

On avait expliqué ceci par l'ajout de la contrainte de positivité sur les coefficients de la NMF. Bien que α_1 soit du même ordre de grandeur que σ_1, on ne peut pas donner à $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ la même interprétation que $\boldsymbol{u}_1$ lorsque $r > 1$. La SVD permet aux vecteurs singuliers de prendre des valeurs négatives. Le vecteur singulier $\boldsymbol{u}_1$ peut donc être corrigé par les autres vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ afin d'améliorer la représentation de chacun des états. Or, les vecteurs positifs de la NMF ne permettent pas ce genre d'interaction entre les vecteurs positifs puisqu'ils ne peuvent que s'additionner pour décrire les états $\boldsymbol{a}_i$. Il faut donc que $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ puisse servir de base commune à tous les états puisque les autres vecteurs positifs ne pourront pas soustraire d'énergie à $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ pour représenter un état $\boldsymbol{a}_i$ quelconque. Le vecteur positif $\hat{\boldsymbol{w}}_1$ est donc une approximation de la composante d'énergie commune à tous les états. Ceci explique pourquoi le premier vecteur positif $\hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}$ prend encore la forme approximative $\frac{1}{\sqrt{N_t}}[1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]^{\mathrm{T}}$ observée pour $\boldsymbol{v}_1$.

Ainsi, pour que $\alpha_1 \hat{\boldsymbol{w}}_1 \hat{\boldsymbol{h}}_1^{\mathrm{T}}$ conserve la même signification à travers toutes les NMF de rang $r > 1$, il faut que tous les états $\boldsymbol{a}_i$ conservent une portion commune importante d'énergie. On rappelle que les matrices $\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la NMF ne sont pas naturellement ordonnées et que $\boldsymbol{w}_1 \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$ pourrait ne pas correspondre à $\alpha_1 \hat{\boldsymbol{w}}_1 \hat{\boldsymbol{h}}_1^{\mathrm{T}}$ puisque rien n'impose que $p_1 = 1$. La borne supérieure sur N_t décrite par l'inégalité (8.8) est suffisante pour garantir que $\boldsymbol{w}_1 \boldsymbol{h}_1^{\mathrm{T}}$ conserve son interprétation ($p_1 = 1$).

Il nous reste à déterminer une borne supérieure pour l'erreur commise par l'approximation de rang

k obtenue à partir des éléments de la NMF de rang r. On a donc

$$\begin{aligned}
\|A - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}\| &= \|WH + E_r - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}\| \\
&= \|\sum_{i=1}^{r} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}} + E_r - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}\| \\
&= \|\sum_{i=k+1}^{r} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}} + E_r\| \\
&\leq \sum_{i=k+1}^{r} \alpha_i \|\hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}\| + \|E_r\| \\
&= \sum_{i=k+1}^{r} \alpha_i \|\hat{\boldsymbol{w}}_i\| \|\hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}\| + \|E_r\| \\
&\leq \left[\sum_{i=k+1}^{r} \alpha_i^2 \|\hat{\boldsymbol{w}}_i\|^2\right]^{\frac{1}{2}} \left[\sum_{i=k+1}^{r} \|\hat{\boldsymbol{h}}_i\|^2\right]^{\frac{1}{2}} + \|E_r\| \\
&\leq \sqrt{\alpha_{k+1}^2 + \cdots + \alpha_r^2}\sqrt{r-k} + \|E_r\| \\
&\leq \sqrt{(r-k)\alpha_{k+1}^2}\sqrt{r-k} + \|E_r\| \\
&= (r-k)\alpha_{k+1} + \|E_r\|,
\end{aligned}$$

où on a que $E_r = A - \sum_{i=1}^{r} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}$ est l'erreur commise par la NMF de rang r qui approxime la matrice A. L'erreur relative est donc bornée par

$$\begin{aligned}
\frac{\|A - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \hat{\boldsymbol{w}}_i \hat{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}}\|}{\|A\|} &\leq \frac{(r-k)\alpha_{k+1} + \|E_r\|}{\|A\|} \\
&\leq \frac{(r-k)\alpha_{k+1} + \|E_r\|}{\alpha_1} \\
&= (r-k)\frac{\alpha_{k+1}}{\alpha_1} + \frac{\|E_r\|}{\alpha_1}.
\end{aligned}$$

Ce résultat nous dit que plus k est proche de r, plus l'erreur sera petite. En particulier, dans le cas où $k = r$, alors l'erreur dépend seulement de l'erreur de représentation E_r de la NMF de rang r. À l'inverse, si $k = 1$, alors l'erreur est potentiellement maximale puisque le terme $(r-1)\frac{\alpha_2}{\alpha_1}$ maximise $(r-k)\frac{\alpha_{k+1}}{\alpha_1}$. En particulier, si r est élevé alors $k = 1$ semble être un mauvais choix car α_1 est potentiellement plus petit (l'énergie est répartie sur plus de vecteurs positifs) et la borne sur l'erreur est divisée par α_1. On comprend donc qu'il n'est pas avantageux d'utiliser une approximation de rang $k < r$ construite à partir d'une NMF de rang r, surtout lorsque k est nettement plus petit

que r. Par exemple, si on tient à utiliser une approximation de faible rang ($k = 1$ ou $k = 2$), alors mieux vaut utiliser une NMF qui est aussi de faible rang. Ceci étant dit, on pourrait avoir des raisons spécifiques liées à l'interprétation d'une approximation de faible rang k faite à partir d'une NMF de rang r.

On termine en soulignant à nouveau qu'une approximation de rang $k < r$ faite à partir d'une NMF de rang r n'est peut-être pas la meilleure stratégie. On pourrait considérer l'utilisation directe d'une NMF de rang k qui permettrait d'alléger les calculs et pour laquelle l'erreur se limite à E_k. Cette approche alternative, dans le cas d'une NMF, permettrait de prendre pleinement avantage de la précision d'une approximation de faible rang comme le montre notre estimation de la borne sur l'erreur. Toutefois, la précision d'une approximation dépend de ce qu'on souhaite en faire. Une discussion générale sur la borne de l'erreur d'une approximation sert simplement de guide lorsqu'aucun autre critère de validité n'est défini. Or, la force d'une NMF est de permettre l'interprétation d'un ensemble de données à l'aide de caractéristiques spécifiques qui ont une interprétation claire. Une NMF de rang r pourrait permettre d'obtenir une description des états d'un système à l'aide de k caractéristiques. Une approximation de rang k deviendrait alors utile pour identifier les états qui possèdent ce sous-ensemble de k caractéristiques d'intérêt.

Troisième partie

MODÉLISATION DE LA VISCOSITÉ TURBULENTE À L'AIDE DE DÉCOMPOSITIONS MATRICIELLES

CHAPITRE 9 SIMULATION NUMÉRIQUE D'UN JET TURBULENT CONFINÉ

On doit générer des ensembles de données à l'aide de simulations numériques avant de procéder à la modélisation de la viscosité turbulente. Ceci nous permet d'avoir un portrait fiable des données avec lesquelles le modèle devra composer lors de sa mise en œuvre. La méthode des éléments finis est utilisée pour mener cette simulation numérique à l'aide du logiciel Elmer FEM (`www.elmerfem.org`). Les maillages sont générés à l'aide du logiciel GMSH (`gmsh.info`). Les logiciels Paraview (`www.paraview.org`) et Julia (`julialang.org`) sont utilisés pour visualiser les résultats.

9.1 Simulation numérique d'un jet turbulent

On produit maintenant des données d'un jet turbulent confiné à l'aide d'une simulation numérique afin d'avoir un portrait fiable des données avec lesquelles le modèle de viscosité turbulente devra composer lors de sa mise en œuvre. Dans ce qui suit, on présente les détails relatifs aux paramètres de cette simulation numérique et on présente ensuite les résultats.

9.1.1 Géométrie, conditions aux limites et propriétés du fluide

Le domaine est un cylindre de rayon $R = 1$ et de longueur $L = 5R = 5$. Un jet circulaire de rayon $R_{\text{jet}} = 0{,}1$ et de vitesse maximale $\boldsymbol{u}_{\text{jet}} = (u_{\text{jet}}, 0, 0) = (1, 0, 0)$ traverse la conduite en son centre. Une faible vitesse d'entrée $\boldsymbol{u}_0 = (u_0, 0, 0) = (0{,}01, 0, 0)$ est imposée partout ailleurs à l'entrée pour stabiliser l'écoulement. Une pression nulle est imposée à la sortie. On permet au champ de vitesse de glisser le long de la paroi de la conduite ($\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0$). La géométrie et les conditions aux limites sont illustrées à la figure 9.1. La condition initiale en vitesse est donnée par une translation du profil d'entrée sur toute la longueur du domaine et elle est illustrée à la figure 9.3.

Les propriétés du fluide sont choisies de manière à générer un nombre de Reynolds de 10 000. On écrit l'équation (3.11) sous une forme adimensionnelle pour simplifier le choix des propriétés du fluide :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{u} + (\rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{u} = \frac{1}{\mathrm{Re}} \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\boldsymbol{u})) - \nabla p; \tag{9.1}$$

où

$$t = \frac{u_c}{L_c} \tilde{t}, \qquad \boldsymbol{u} = \frac{\tilde{\boldsymbol{u}}}{u_c} \nabla = L_c \tilde{\nabla}, \qquad p = \frac{\tilde{p}}{\rho u_c^2}, \qquad Re = \frac{\rho u_c L_c}{\mu_c}.$$

Les variables munies d'un « ˜ » portent les unités [1]. Les grandeurs caractéristiques pour chaque variable portent la lettre c en indice.

9.1.2 Maillage

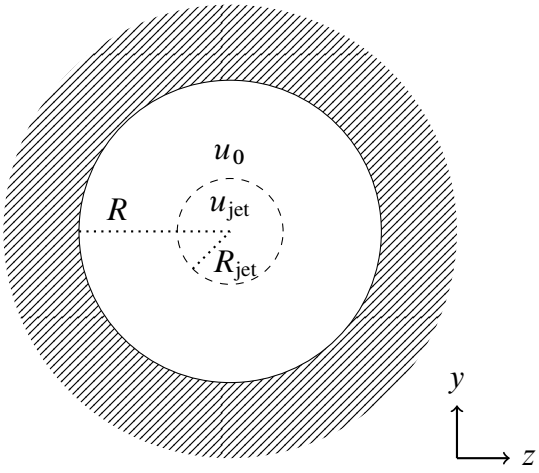
Le maillage illustré à la figure 9.2 est composé de 234 867 tétraèdres dont la taille varie entre 0,03 et 0,2. On compte 297 419 nœuds au total ce qui nous permet d'utiliser des éléments linéaires en pression et quadratiques en vitesse (P2-P1). Une zone de raffinement en forme de cylindre conique sur la première moitié du domaine est conçue de manière à permettre une description plus précise de la région où le jet devient instable.

9.1.3 Résultats

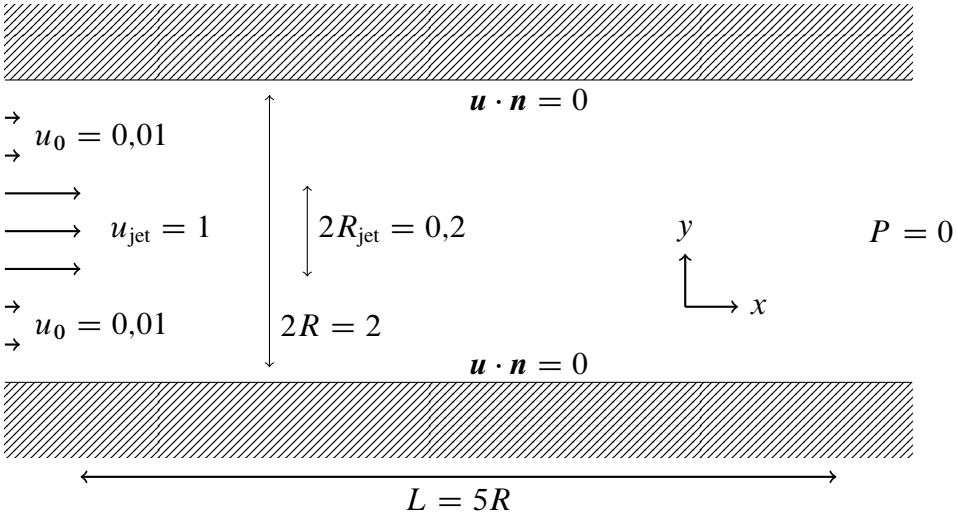
Le domaine a été décomposé en 10 partitions à l'aide de la fonction « PartGraphKway » de la librairie Metis (`glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis`) afin de pouvoir exécuter la simulation en parallèle avec 10 processeurs. On utilise l'élément de Taylor-Hood (P2-P1).

Les figures 9.3 à 9.6 illustrent l'énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet. Ce plan est limité à la zone de raffinement dans le rectangle $(0, 2) \times (-0{,}3, 0{,}3)$ dans le plan $z = 0$. La simulation a été arrêtée à $t = 791$ parce qu'une quantité suffisante de données ont été accumulées. À $t = 0$, on voit que l'énergie a un profil uniforme, conformément à la condition initiale utilisée. Cette condition initiale crée une région de cisaillement intense à l'endroit où la vitesse passe de 1 à zéro. Cette surface correspond au cylindre de rayon 0,1, tel que spécifié par les conditions initiales. Les irrégularités du maillage déforment ce profil suffisamment pour rendre le jet instable et crée de la turbulence. On peut observer cette instabilité se développer aux temps subséquents et jusqu'à la fin de la simulation.

1. Cette notation va à l'envers de la convention, mais elle permet de simplifier la présentation.

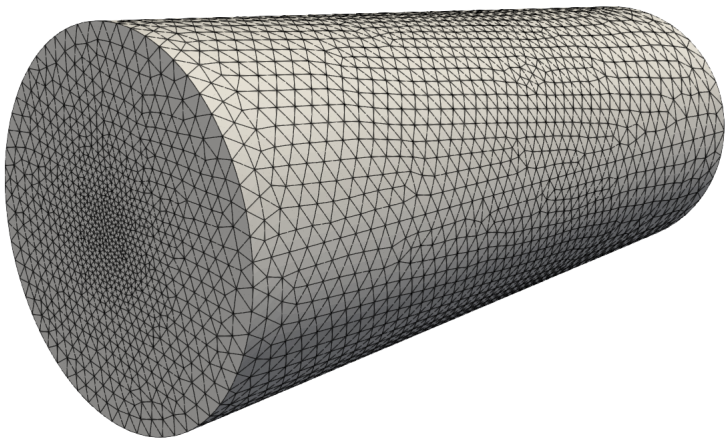


(a) Coupe transversale de la conduite

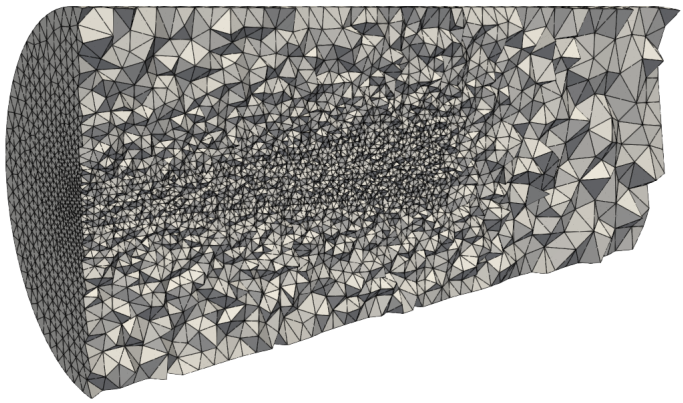


(b) Coupe longitudinale de la conduite

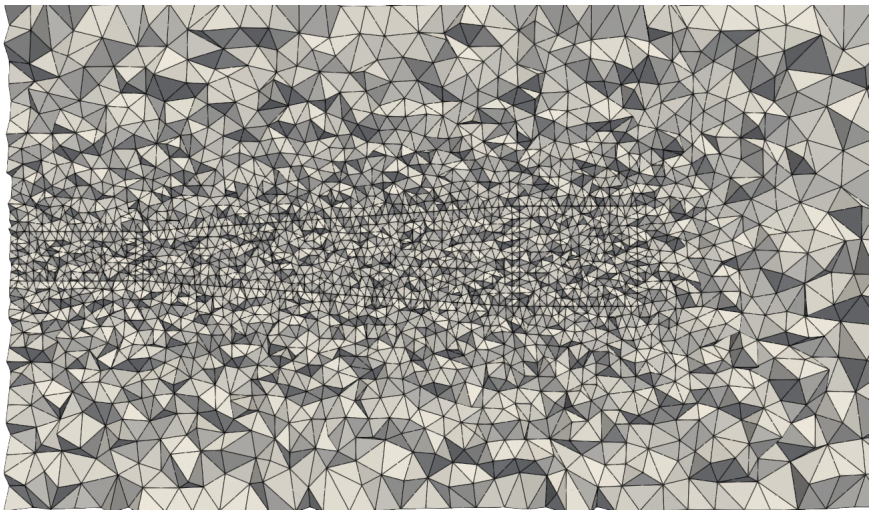
FIGURE 9.1 Géométrie du domaine et conditions aux limites pour la simulation numérique du jet confiné.



(a) Vue en perspective du domaine



(b) Vue en perspective de l'intérieur du domaine



(c) Vue en plan de la zone de raffinement

FIGURE 9.2 Maillage pour la simulation numérique du jet confiné.

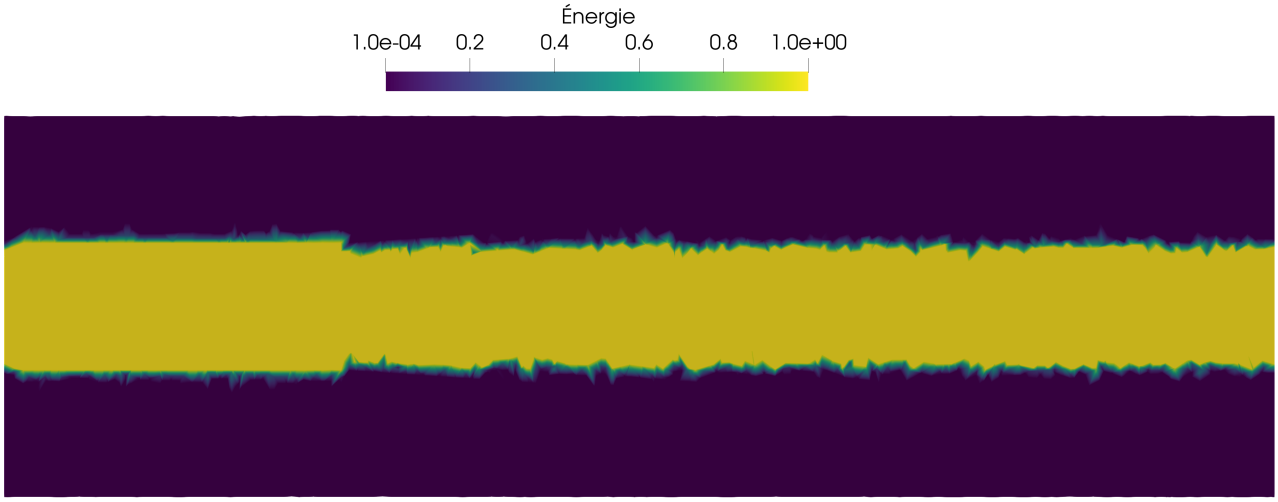
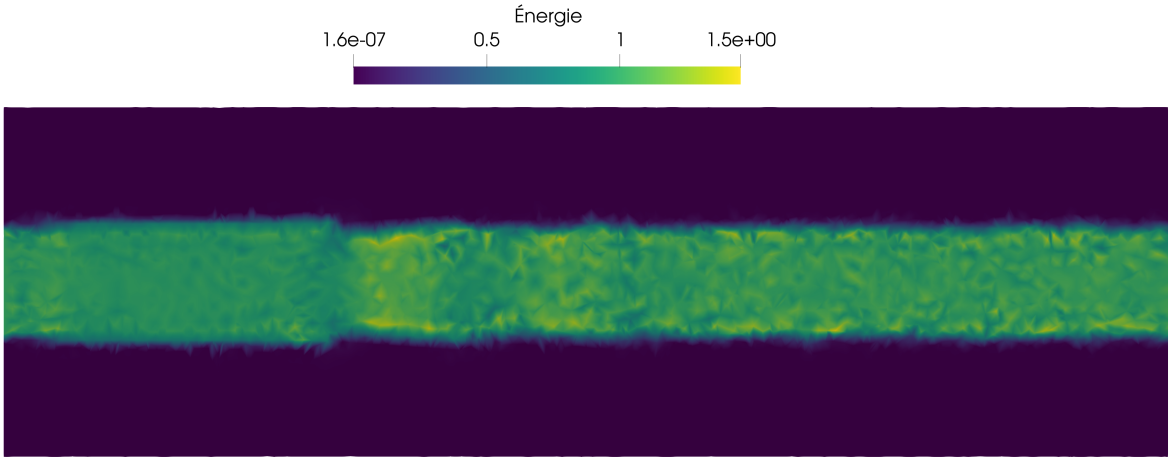
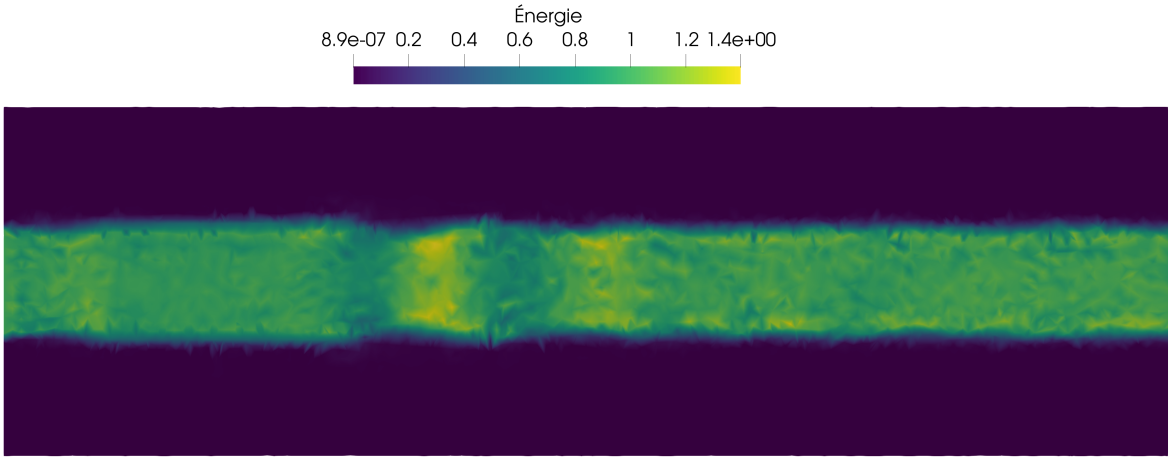


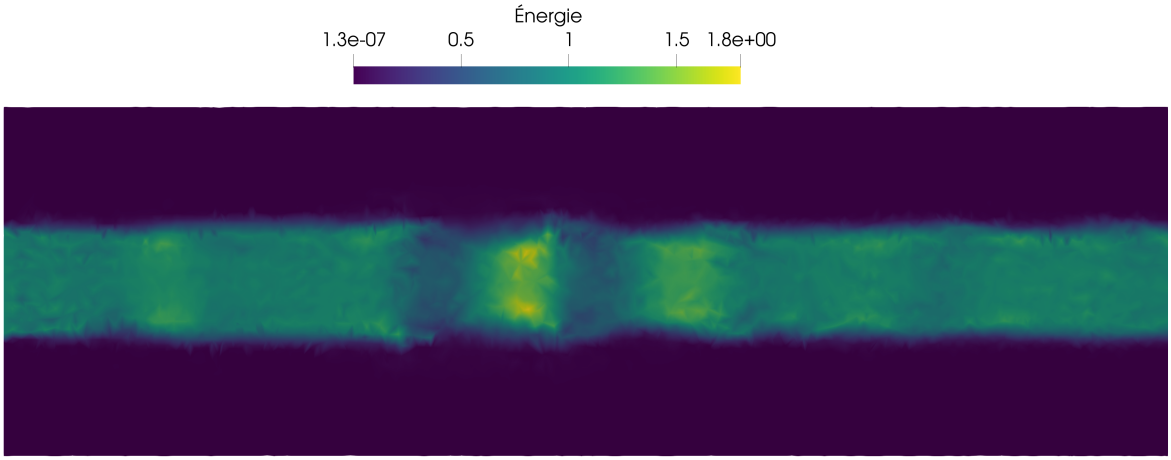
FIGURE 9.3 Condition initiale sur l'énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet.



(a) $t = 50$

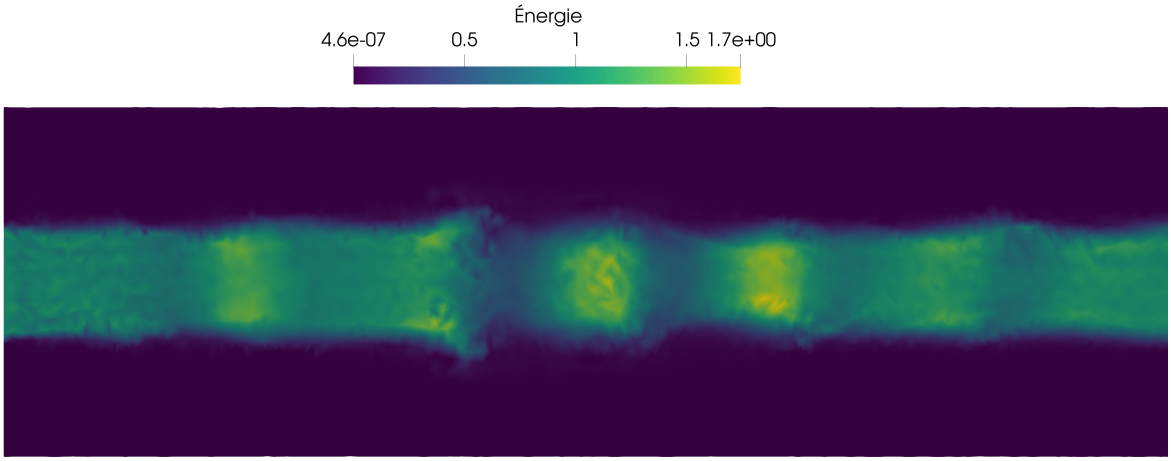


(b) $t = 100$

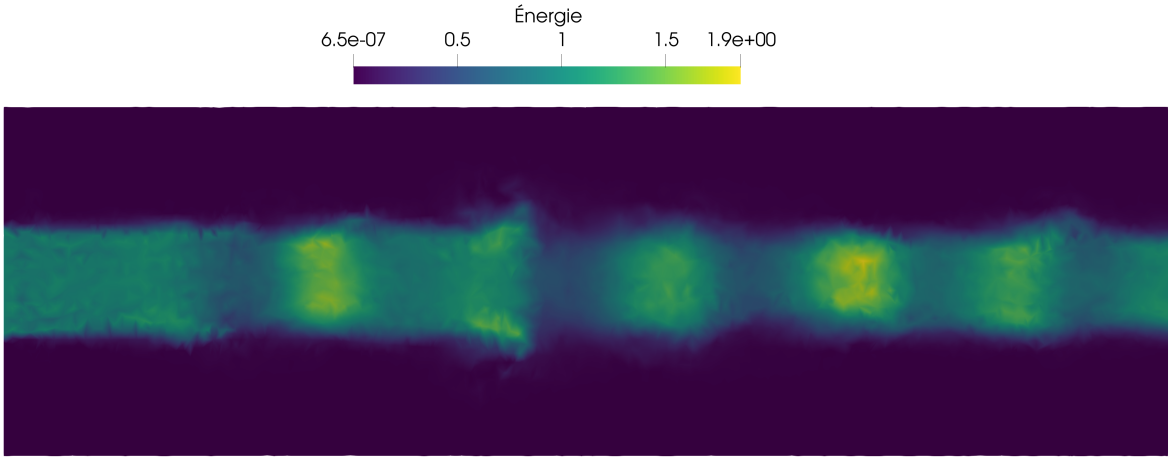


(c) $t = 200$

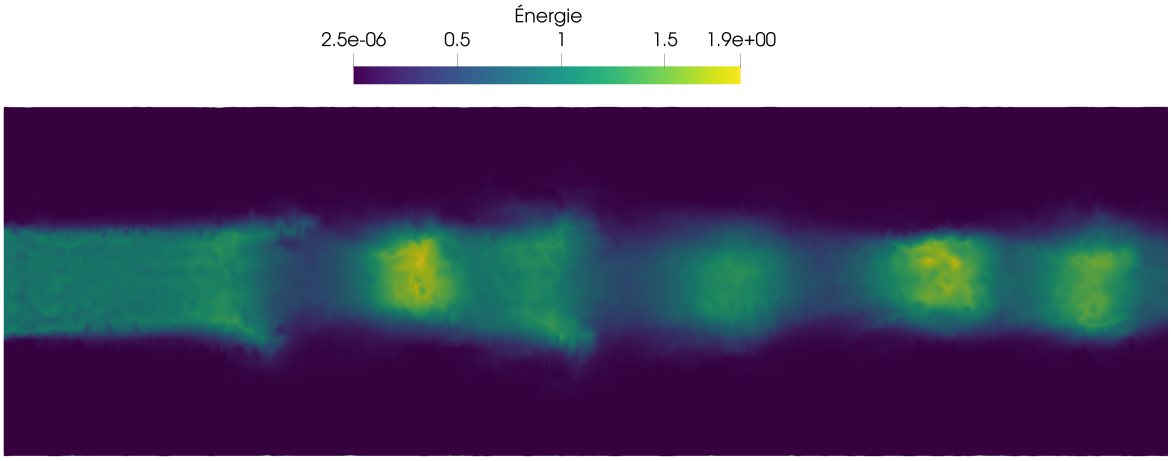
FIGURE 9.4 Énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet ($t = 50, 100, 200$).



(a) $t = 300$

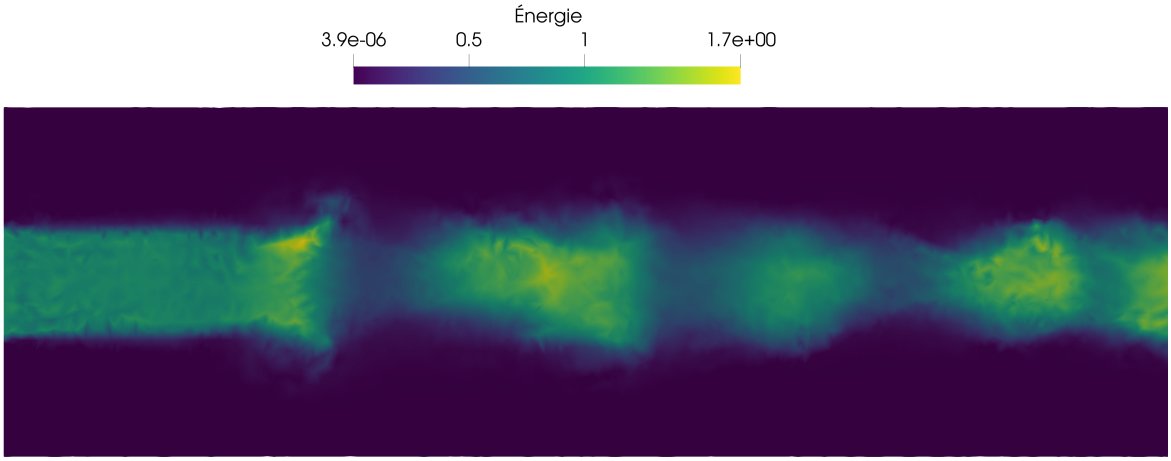


(b) $t = 400$

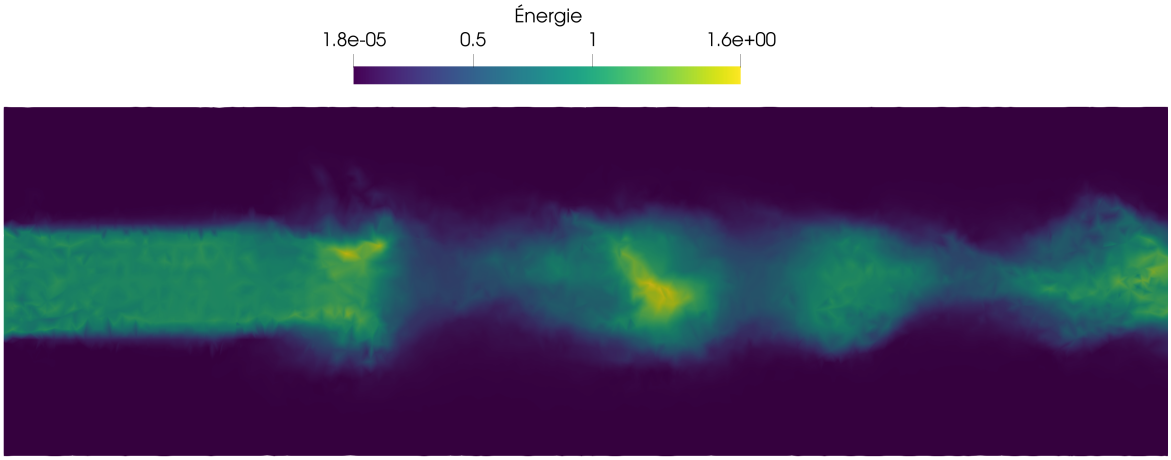


(c) $t = 500$

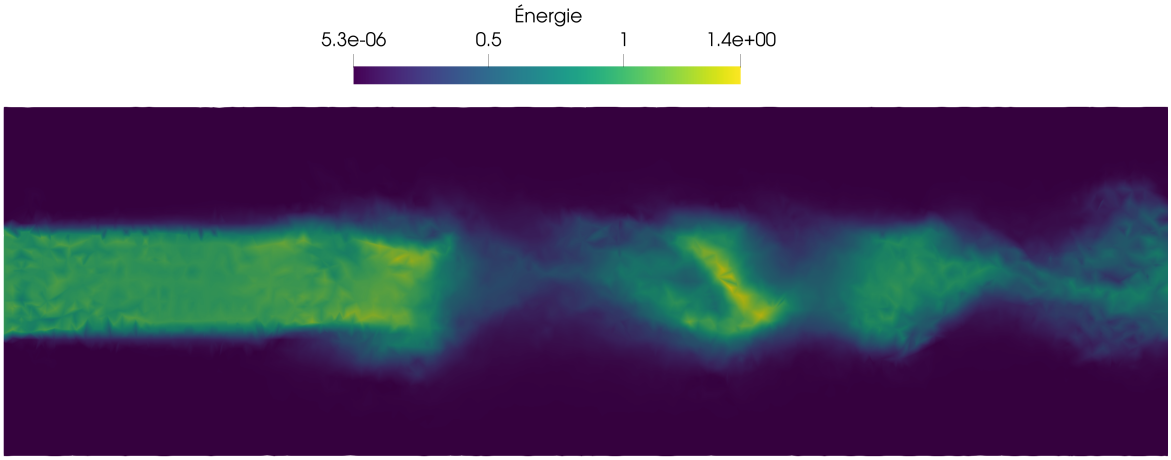
FIGURE 9.5 Énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet ($t = 300, 400, 500$).



(a) $t = 600$



(b) $t = 700$



(c) $t = 791$ (temps final)

FIGURE 9.6 Énergie du jet dans un plan de coupe parallèle à l'axe du jet ($t = 600, 700, 791$).

CHAPITRE 10 MODÉLISATION DE LA VISCOSITÉ TURBULENTE

L'objectif de ce chapitre est de présenter un nouveau modèle de viscosité turbulente et un algorithme qui permet de le mettre en œuvre. On procède d'abord à l'analyse qui permet d'identifier les fluctuations du champ de vitesse d'un écoulement qu'on peut associer à la turbulence de l'écoulement. On montre ensuite comment construire une viscosité turbulente à l'aide d'une approximation des fluctuations identifiées. On termine en détaillant un algorithme qui permet de mettre en œuvre ce modèle de viscosité turbulente dans le contexte de la simulation numérique d'un écoulement turbulent.

10.1 Identification des fluctuations turbulentes d'un écoulement

Ce ne sont pas toutes les fluctuations du champ de vitesse d'un écoulement qui doivent être associées à de la turbulence. N'importe quel écoulement de nature transitoire subira des fluctuations. La turbulence se distingue par l'instabilité des fluctuations qui génère un transfert d'énergie distinctif des grandes échelles vers les petites échelles. Ce concept de cascade d'énergie qui s'écoule des grandes échelles vers les plus petites échelles à été étudié et formalisé par Kolmogorov dans les années 1940 et est la pierre angulaire de la modélisation de la turbulence.

Les points à traiter dans cette section sont :

1. Les fluctuations exprimées par la SVD ;
2. L'évolution des valeurs singulières dans le temps ;

10.1.1 Fluctuations exprimées par la SVD

On considère maintenant plus attentivement le rôle des vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$, car on veut comprendre comment la SVD tente de reproduire les fluctuations du champ de vitesse dans le temps. On rappelle que les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i \in C(A)$ et $\boldsymbol{v}_i \in C(A^{\mathrm{T}})$ représentent respectivement les fluctuations spatiales et temporelles des états $\boldsymbol{a}_i$ qui correspondent aux colonnes de la matrice des états A. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$ possèdent N_t composantes qui indiquent comment les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ sont distribués dans les colonnes de A. Puisque les colonnes de A correspondent aux états à différents temps, les vecteurs $\boldsymbol{v}_i$ indiquent donc comment les vecteurs $\boldsymbol{u}_i$ expriment l'écoulement dans le temps.

Le premier vecteur singulier $\boldsymbol{v}_1$ a déjà été étudié. L'approximation $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \approx \frac{1}{\sqrt{N_t}}[1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]$ a été décrite à la section 8.2, elle permet de mieux comprendre l'importance de la matrice $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$, qui

semble représenter la valeur moyenne des états. On a conclu que cette approximation est bonne lorsque les états $\boldsymbol{a}_i$ sont suffisamment similaires.

On complète maintenant le portrait que permet de peindre la SVD à l'aide de ses matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1. On étudie la décomposition d'un écoulement laminaire pour mettre en évidence ce qui devrait être différent lorsque l'écoulement devient turbulent.

Décomposition d'un écoulement laminaire

Commençons avec le cas le plus simple, l'écoulement stationnaire. On a

$$\begin{aligned} A &= [\boldsymbol{a}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}_1] \\ &= \boldsymbol{a}_1 [1 \quad \cdots \quad 1] \\ &= \left(\|\boldsymbol{a}_1\| \sqrt{N_t} \right) \left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N_t}} \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right) \\ &= \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}. \end{aligned}$$

Ce résultat correspond parfaitement à la matrice de rang 1 dominante, déduite de l'équation (8.13). Ainsi, dans le cas stationnaire, notre interprétation de $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ est exacte. Comment change cette interprétation si l'écoulement demeure laminaire, mais s'il n'est plus stationnaire ?

Supposons que $\boldsymbol{a}_1$ correspond à un état initial quelconque et que l'évolution de l'écoulement peut être décrit à l'aide d'une fonction quelconque $f(t)$. On aurait alors l'état $\boldsymbol{a}_i = \boldsymbol{a}_1 f(t_i)$ au temps t_i, avec $f(t_1) = 1$. La matrice A demeure de rang 1,

$$\begin{aligned} A &= [\boldsymbol{a}_1 \quad \boldsymbol{a}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}_{N_t}] \\ &= \boldsymbol{a}_1 [f(t_1) \quad f(t_2) \quad \cdots \quad f(t_{N_t})] \\ &= (\|\boldsymbol{a}_1\| \|\boldsymbol{f}\|) \left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|} \right) \left(\frac{\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}}{\|\boldsymbol{f}\|} \right) \\ &= \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}. \end{aligned}$$

Supposons maintenant que $\boldsymbol{a}_1$ correspond encore à un état initial quelconque, mais cette fois ci, que l'évolution de l'écoulement ne se produit que sur une partie du domaine représenté par $\boldsymbol{\delta a}_1$ et à l'aide d'une fonction quelconque $f(t)$. On aurait donc l'état $\boldsymbol{a}_i = \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{\delta a}_1 f(t_i)$ au temps t_i avec

$f(t_1) = 0$. La matrice A demeure de rang 1,

$$\begin{aligned}
A &= [\boldsymbol{a}_1 \quad \boldsymbol{a}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}_{N_t}] \\
&= \boldsymbol{a}_1[1 \quad 1 + \boldsymbol{\delta a}_1 f(t_2) \quad \cdots \quad 1 + \boldsymbol{\delta a}_1 f(t_{N_t})] \\
&= \boldsymbol{a}_1[1 \quad \cdots \quad 1] + \boldsymbol{\delta a}_1[0 \quad f(t_2) \quad \cdots \quad f(t_{N_t})] \\
&= \left(\|\boldsymbol{a}_1\|\sqrt{N_t}\right)\left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{N_t}}\begin{bmatrix}1\\ \vdots \\ 1\end{bmatrix}\right) + (\|\boldsymbol{\delta a}_1\|\|\boldsymbol{f}\|)\left(\frac{\boldsymbol{\delta a}_1}{\|\boldsymbol{\delta a}_1\|}\right)\left(\frac{\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}}{\|\boldsymbol{f}\|}\right) \\
&= \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}.
\end{aligned}$$

On a réussi à enrichir le rang de A en ajoutant une fluctuation $\boldsymbol{\delta a}_1$ indépendante de l'état stationnaire. On peut retrouver notre interprétation de $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ si $\boldsymbol{\delta a}_1$ représente une correction qui est calculée lors d'une simulation numérique, telle que celle décrite à la section 8.1, pour faire évoluer l'écoulement dans le temps. Ceci nous apprend que le rang de A peut demeurer faible si les pas de temps de la simulation numérique ne sont pas trop grands et que l'écoulement demeure laminaire.

Cette condition est suffisante pour définir un écoulement laminaire, mais n'est pas nécessaire. Si d'emblée, le rang de A est faible, alors notre analyse s'applique et on peut déclarer que l'écoulement est laminaire. Supposons toutefois qu'il y a k fluctuations laminaires qui agissent sur le domaine. Ceci peut se produire s'il y a k obstacles qui se déplacent lentement et indépendamment dans l'écoulement. Il faut alors k différentes fonctions $f(t)$ et k différents vecteurs $\boldsymbol{\delta a}$ pour décrire l'écoulement. Le rang de A sera alors égal à $k + 1$ puisqu'il faut aussi tenir compte de l'état initial $\boldsymbol{a}_1$. Cette augmentation de la valeur du rang pourrait nous faire croire que l'écoulement n'est pas laminaire, alors que c'est faux. Il faut donc un autre critère pour décider de la turbulence de l'écoulement lorsque le rang de A devient élevé.

Décomposition d'un écoulement turbulent

On utilise les données de la simulation numérique du jet turbulent confiné décrite au chapitre 9. La matrice A des états est construite de manière à ce que chaque colonne $\boldsymbol{a}_i$ corresponde à l'énergie contenue dans le champ de vitesse au temps t_i. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$ obtenus par la SVD de A sont illustrés aux figures 10.1 à 10.3.

Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$ décrivent des oscillations d'amplitude et de fréquence variables. Il serait utile de savoir si ces oscillations ont un lien avec la turbulence de l'écoulement ou si elles sont simplement produites par la SVD. Pour répondre à cette interrogation, on peut voir comment la SVD de A est affectée par la permutation de ses colonnes. On utilise une matrice de permutation

P de dimensions $N_t \times N_t$ qui peut être une permutation simple ou composée. On note qu'alors, rien n'oblige que $P = P^{\mathrm{T}}$ puisque P pourrait être le produit de plusieurs matrices de permutation simples. On a donc que

$$\tilde{A} = AP = U\Sigma V^{\mathrm{T}}P = U\Sigma(V^{\mathrm{T}}P) = U\Sigma(P^{\mathrm{T}}V)^{\mathrm{T}} = U\Sigma\tilde{V}^{\mathrm{T}}$$

et

$$\tilde{A} = AP = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} P = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i (P^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i) = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \tilde{\boldsymbol{v}}_i^{\mathrm{T}},$$

où $\|\tilde{\boldsymbol{v}}_i\| = \|\boldsymbol{v}_i\| = 1$, ce qui semble indiquer qu'une permutation des colonnes de A correspond à une permutation des composantes de $\boldsymbol{v}_i$. On peut confirmer que la SVD de AP conserve les mêmes valeurs singulières et les mêmes vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ que A,

$$\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{v}}_i = (AP)(P^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i) = A(PP^{\mathrm{T}})\boldsymbol{v}_i = A\boldsymbol{v}_i = \sigma_i \boldsymbol{u}_i$$

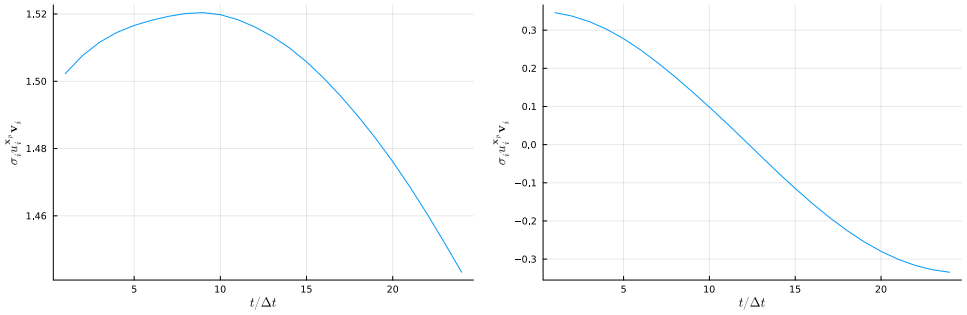
et

$$\tilde{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i = (AP)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i = P^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i) = P^{\mathrm{T}}(\sigma_i \boldsymbol{v}_i) = \sigma_i (P^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i) = \sigma_i \tilde{\boldsymbol{v}}_i.$$

La signification de cette propriété est « profonde ». L'ordre avec lequel les états $\boldsymbol{a}_i$ sont placés dans A ne modifie pas ses valeurs singulières ni la forme des fluctuations spatiales du champ de vitesse exprimées par les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$. Toutefois, la forme des vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$ est modifiée, ce qui signifie que les oscillations observées aux figures 10.1 à 10.3 dépendent du temps et portent donc une signification physique importante.

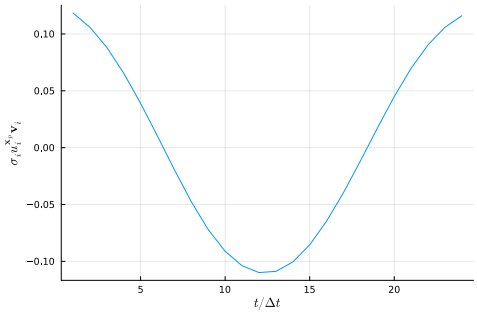
La figure 10.4 illustre les vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$, où $u_i^{\boldsymbol{x}_p}$ désigne la composante de $\boldsymbol{u}_i$ qui correspond au point $\boldsymbol{x}_p$. Ceux-ci donnent une mesure de l'amplitude des oscillations au point $\boldsymbol{x}_p$ du domaine, exprimées par chaque matrice $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1. Seule leur amplitude $\sigma_i |u_i^{\boldsymbol{x}_p}|$ les distinguent des vecteurs singuliers $\boldsymbol{v}_i$. Les valeurs de $u_i^{\boldsymbol{x}_p}$ changent pour chaque vecteur singulier $\boldsymbol{v}_i$, ce qui permet de reconstruire le profil temporel particulier $f_p(t)$ de l'écoulement au point $\boldsymbol{x}_p$, tel qu'illustré à la figure 10.4,

$$f_p(t) \approx \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i = \sum_{i=1}^{k} c_i \boldsymbol{v}_i \in C(A^{\mathrm{T}}).$$

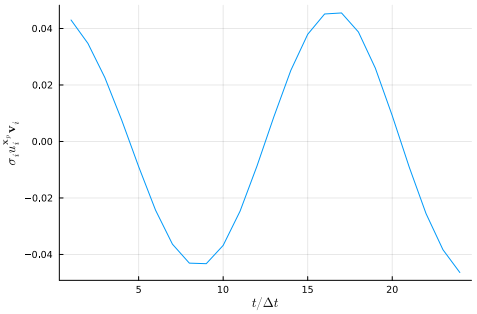


(a) $i = 1$

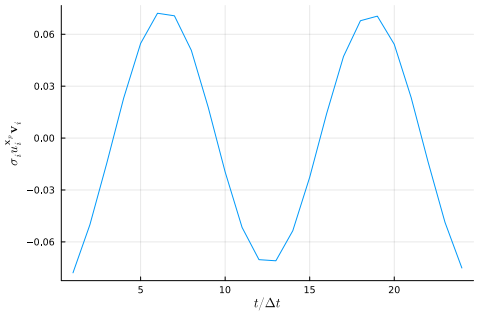
(b) $i = 2$



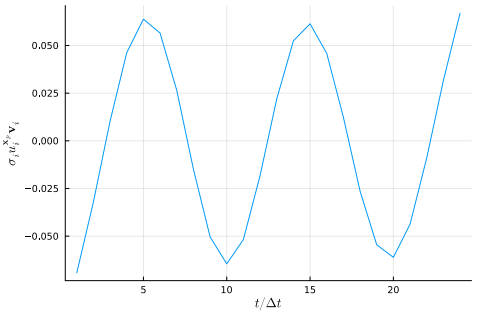
(c) $i = 3$



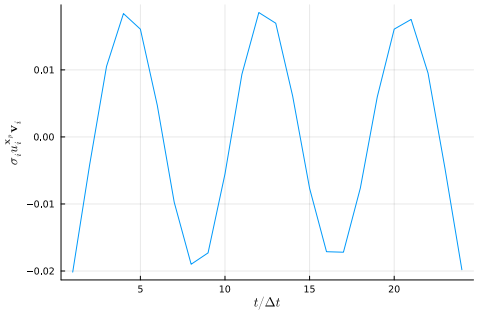
(d) $i = 4$



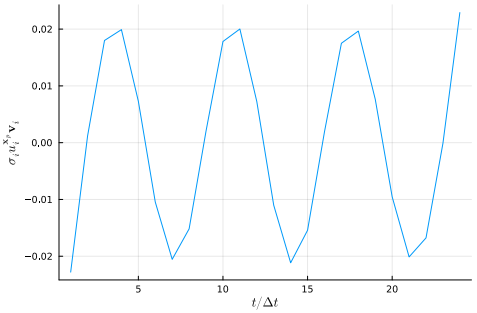
(e) $i = 5$



(f) $i = 6$

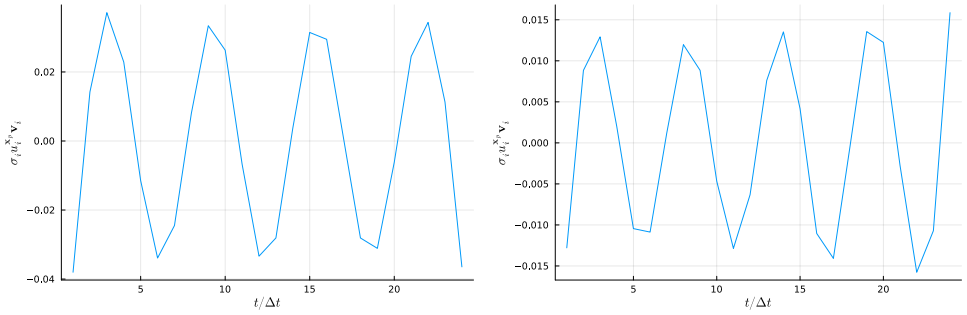


(g) $i = 7$

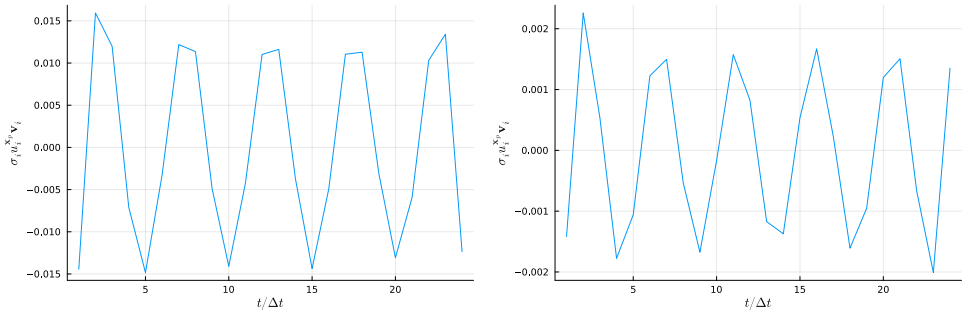


(h) $i = 8$

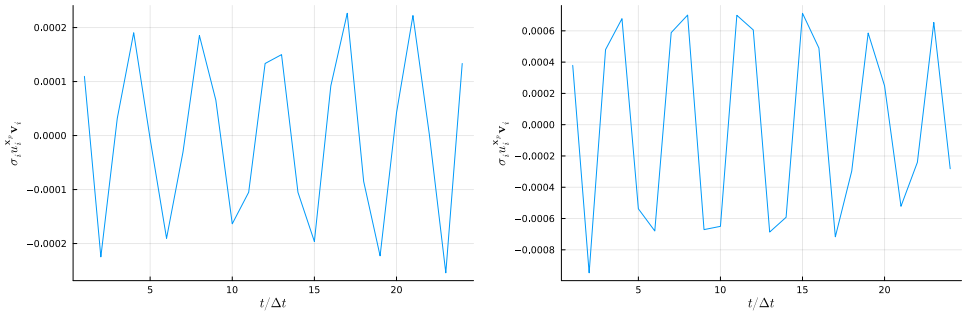
FIGURE 10.1 Vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A ($i = 1, 2, \ldots, 8$).



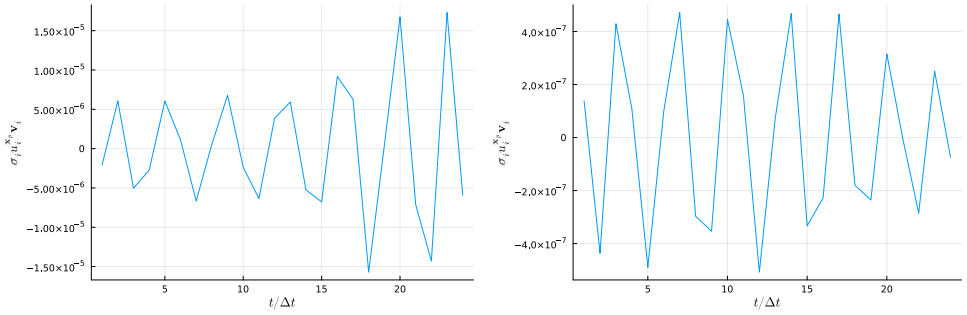
(a) $i = 9$ (b) $i = 10$



(c) $i = 11$ (d) $i = 12$

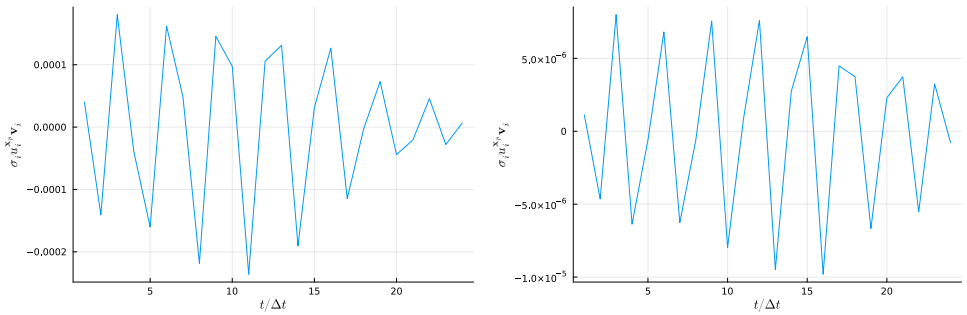


(e) $i = 13$ (f) $i = 14$



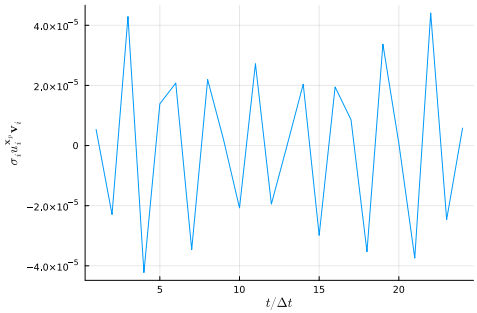
(g) $i = 15$ (h) $i = 16$

FIGURE 10.2 Vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A ($i = 9, 10, \ldots, 16$).

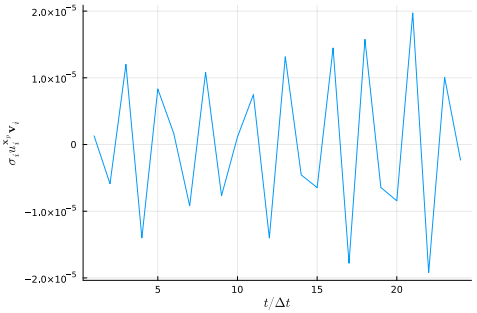


(a) $i = 17$

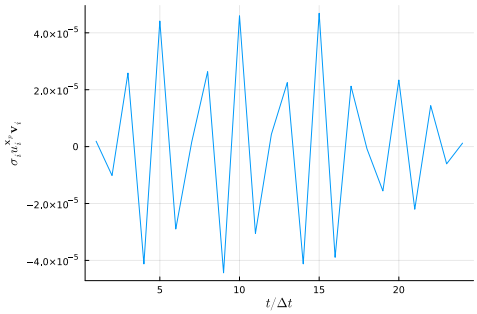
(b) $i = 18$



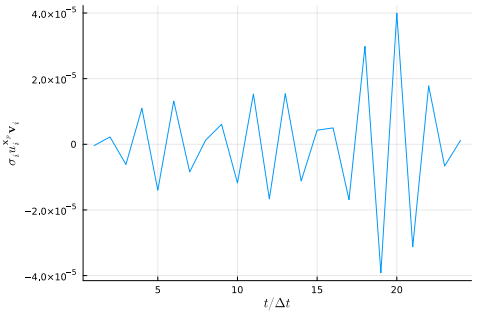
(c) $i = 19$



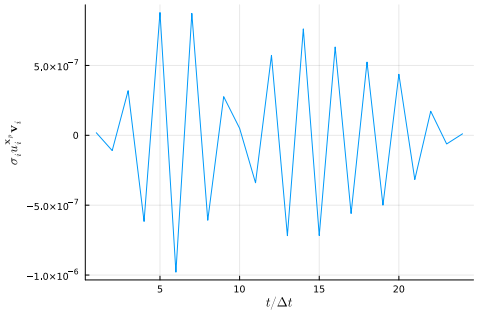
(d) $i = 20$



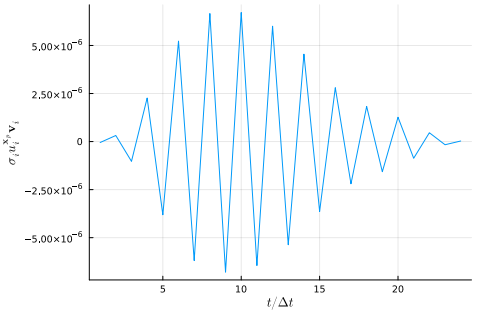
(e) $i = 21$



(f) $i = 22$

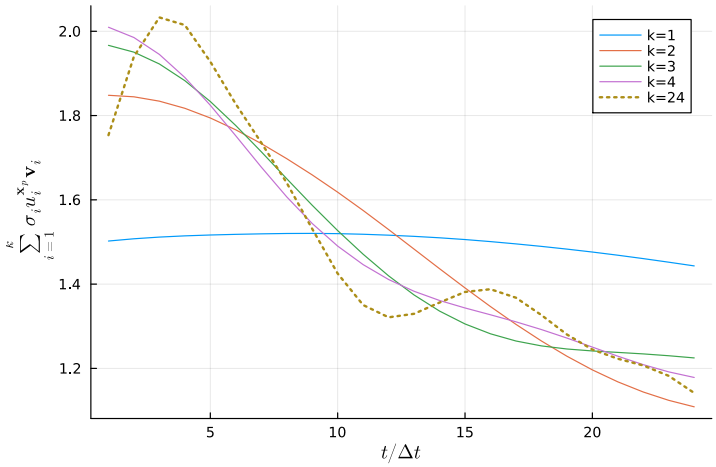


(g) $i = 23$

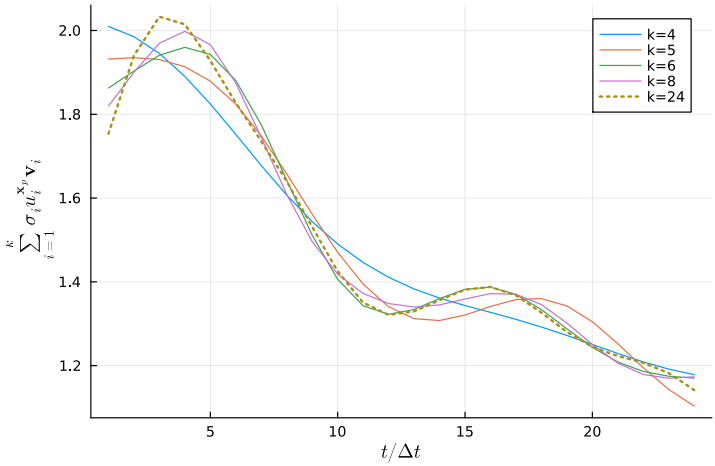


(h) $i = 24$

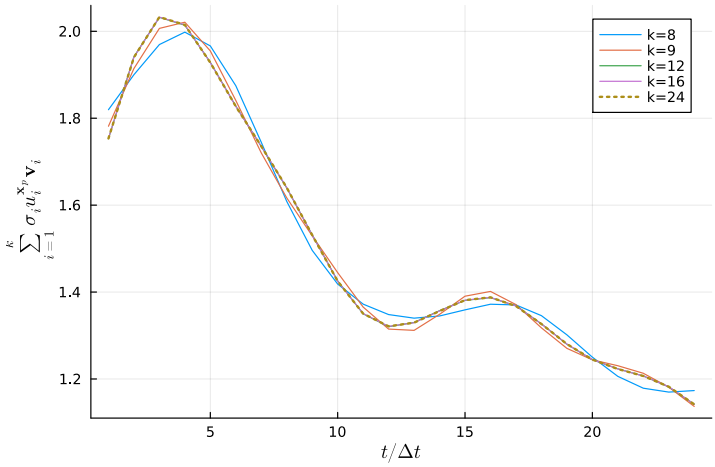
FIGURE 10.3 Vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A ($i = 17, 18, \ldots, 24$).



(a) $k = 1$ à 4

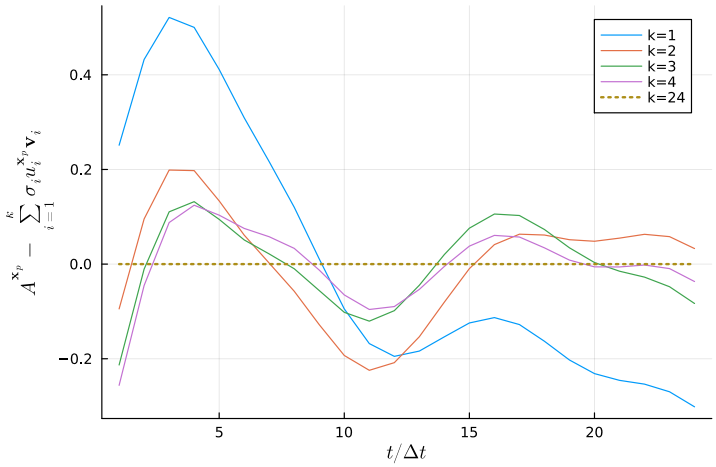


(b) $k = 4$ à 8

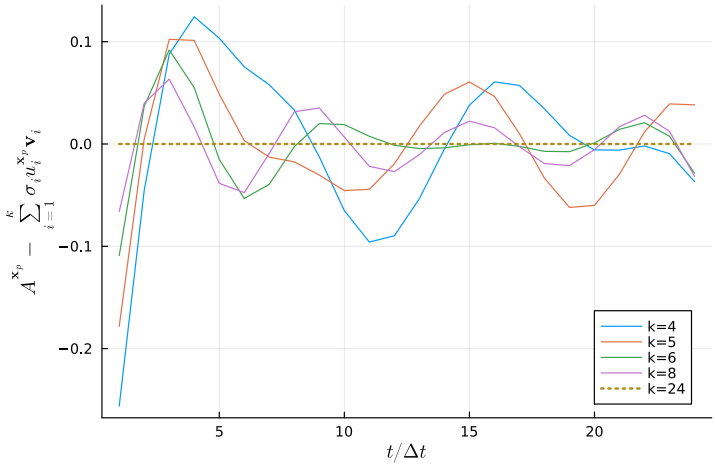


(c) $k = 8$ à 24

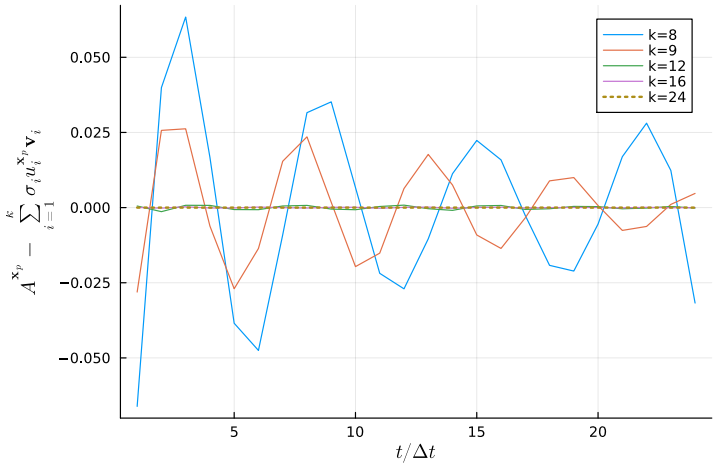
FIGURE 10.4 Superposition des k premiers vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A.



(a) $k = 1$ à 4



(b) $k = 4$ à 8



(c) $k = 8$ à 24

FIGURE 10.5 Partie résiduelle A' générée par la superposition des k premiers vecteurs singuliers pondérés $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ de la SVD de la matrice des états A.

A priori, les fluctuations exprimées par chaque matrice $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 de la SVD ne peuvent pas être associées directement aux fluctuations turbulentes du champ de vitesse. L'analyse qu'on a pu en faire suggère qu'en contrôlant l'erreur $\|A - A_k\|$, on peut trouver une valeur de k qui permet d'approximer les fluctuations du champ de vitesse par les fluctuations exprimées par la SVD. On propose donc une approximation qui prend la forme

$$A = \overline{A} + A', \tag{10.1}$$

où $\overline{A}$ et A' représentent respectivement la partie filtrée et la partie résiduelle des états de l'écoulement. L'approximation qu'on vient de décrire s'exprime aussi comme :

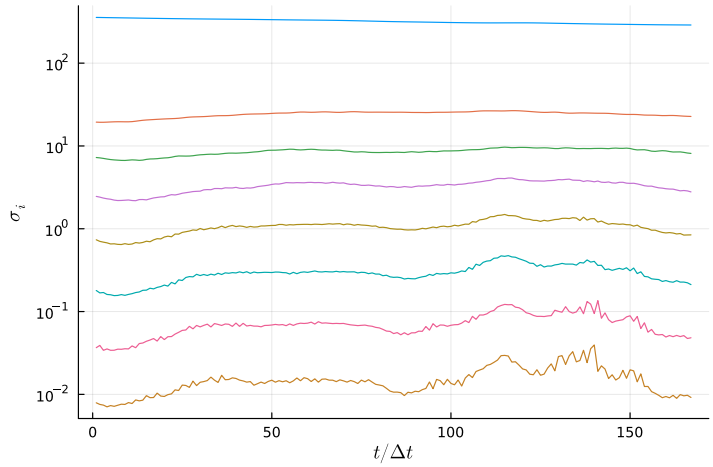
$$\overline{A} \approx A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \quad \text{et} \quad A' \approx A - A_k = \sum_{i=k+1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}. \tag{10.2}$$

On peut visualiser l'approximation $\overline{A} = A_k$ pour différentes valeurs de k, en un point quelconque du domaine, en utilisant la somme des k premiers vecteurs singuliers pondérés. Les approximations de $\overline{A}$ sont illustrées à la figure 10.4 et les approximations de A' sont illustrées à la figure 10.5. On observe une différence apparente entre les résultats lorsque la valeur de k est inférieure à 4. Lorsque k se rapproche de 8, cette différence est beaucoup moins apparente et elle devient imperceptible lorsque k atteint 12. On sait que les contributions $\sigma_i u_i^{\boldsymbol{x}_p} \boldsymbol{v}_i$ deviennent de moins en moins importantes lorsque k augmente à cause des valeurs singulières décroissantes.

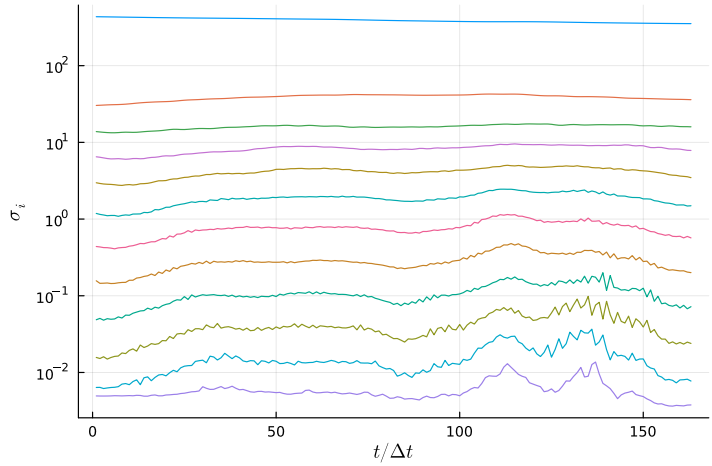
10.1.2 Évolution des valeurs singulières dans le temps

On propose de suivre l'évolution des valeurs singulières lorsqu'on met à jour les colonnes de la matrice des états. On a alors un ensemble de N_t valeurs singulières pour chaque collection d'états associée à un sous-intervalle de temps. À l'aide de ces ensembles de valeurs singulières, on peut étudier la variation de chaque σ_i dans le temps.

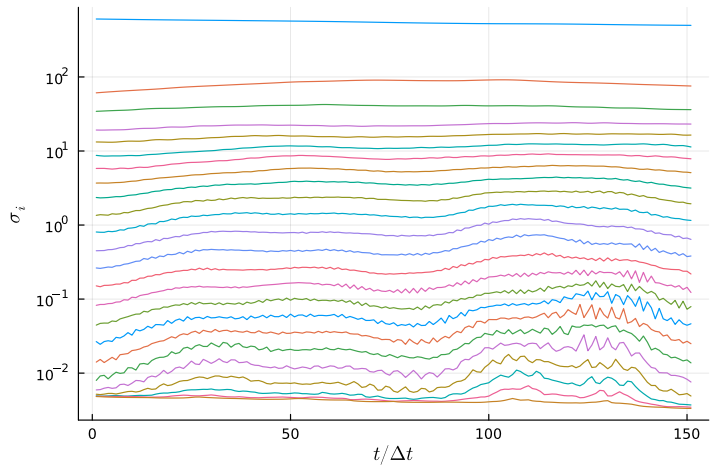
La figure 10.6 illustre ces variations pour différentes valeurs de N_t, pour la durée de l'écoulement. On note que chaque état $\boldsymbol{a}_i$ est séparé de quatre pas de temps. En étudiant la figure 10.6, on constate que les plus grandes valeurs singulières sont stables dans le temps, peu importe la valeur de N_t. Les plus petites valeurs singulières subissent les plus grandes variations. On discerne clairement une augmentation de l'énergie contenue dans les plus petites valeurs singulières entre les temps t_{100} et t_{150}, ce qui correspond aux pas de temps 550 à 750. En regardant les figures 9.5 et 9.6, on constate que cet intervalle de temps correspond au moment où le jet se fragmente et que son énergie se dissipe.



(a) $r = 8$



(b) $r = 12$



(c) $r = 24$

FIGURE 10.6 Évolution des valeurs singulières de A_r dans le temps pour $r = 8$, 12 et 24.

Il semble donc y avoir un transfert d'énergie entre les grandes échelles et les petites échelles de l'écoulement puisque les grandes échelles perdent de l'énergie lentement et que les petites échelles voient plutôt leur énergie croître puis diminuer. Les plus grandes échelles perdent de l'énergie plus lentement parce que l'énergie transférée est petite par rapport à l'énergie totale qu'elles contiennent. Les fluctuations des petites échelles semblent plus instables parce qu'elles contiennent moins d'énergie. On peut identifier les matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 qui jouent un rôle intermédiaire dans ce transfert d'énergie. On observe à la figure 10.6 que la dernière moitié des valeurs singulières sont affectées plus fortement par ce transfert d'énergie. On peut lire directement l'ordre de grandeur de l'énergie des fluctuations sur la figure 10.6 et ce, indépendamment du rang de A. L'ordre de grandeur de l'énergie associée aux plus fortes fluctuations se situe entre 10^{-2} et 1.

Il faut prendre garde à l'interprétation qu'on fait de l'évolution des valeurs singulières σ_i dans le temps. On rappelle que la matrice A est modifiée de $[\boldsymbol{a}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}_{N_t}]$ à $[\boldsymbol{a}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}_{N_t+1}]$ lorsque le temps passe de t_{N_t} à t_{N_t+1}. Ceci veut dire que les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ vont aussi vraisemblablement changer. Ainsi, $\sigma_i(t_{N_t}+1)$ ne décrit pas l'énergie des mêmes fluctuations que $\sigma_i(t_{N_t})$. Néanmoins, le résultat illustré à la figure 10.6 est intéressant puisqu'on constate que la SVD permet de tracer portrait du processus de transfert de l'énergie à travers l'écoulement, indépendamment du rang r de A.

On peut calculer le taux de transfert d'énergie au temps t_{N_t} associé à chaque matrice $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1. Ceci donne une idée de ce qui arriverait à l'énergie des fluctuations exprimées par les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ au temps t_{N_T+1} s'ils n'étaient pas modifiés par la SVD.

La matrice A contient l'énergie des états de l'écoulement. La dérivée de A par rapport au temps exprime donc la variation de l'énergie cinétique de l'écoulement dans le temps. On peut utiliser une différence avant pour approximer $\frac{dA}{dt}$,

$$\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &\approx \frac{A(t+\Delta t)-A(t)}{\Delta t} \\
&= \frac{1}{\Delta t}\Big([\boldsymbol{a}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}_{N_t+1}] - [\boldsymbol{a}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{a}_{N_t}]\Big) \\
&= \frac{1}{\Delta t}\Big([(\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_1) \quad \cdots \quad (\boldsymbol{a}_{N_t+1}-\boldsymbol{a}_{N_t})]\Big) \\
&= \frac{1}{\Delta t}[\boldsymbol{\delta a}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\delta a}_{N_t}],
\end{aligned}$$

où $\boldsymbol{\delta a}_i = \boldsymbol{a}_{i+1} - \boldsymbol{a}_i$ sont les corrections introduites à l'équation (8.2). On peut estimer la valeur du taux de transfert d'énergie pour chaque matrice $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 en calculant $\frac{d\sigma_i}{dt}$. En utilisant la relation (8.11),

$$A\boldsymbol{v}_i = \sigma_i \boldsymbol{u}_i \;\Rightarrow\; \sigma_i = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{v}_i,$$

on peut relier la dérivée de σ_i à la dérivée de A,

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma_i}{dt} &\approx \frac{\sigma_i(t+\Delta t)-\sigma_i(t)}{\Delta t} \\
&= \frac{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} A(t+\Delta t)\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} A(t)\boldsymbol{v}_i}{\Delta t} \\
&= \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \left(\frac{A(t+\Delta t)-A(t)}{\Delta t} \right) \boldsymbol{v}_i \\
&= \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \left[\frac{\boldsymbol{\delta a}_1}{\Delta t} \quad \cdots \quad \frac{\boldsymbol{\delta a}_{N_t}}{\Delta t} \right] \boldsymbol{v}_i \\
&\approx \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \frac{dA}{dt} \boldsymbol{v}_i .
\end{aligned}$$

On peut vérifier cette relation en calculant directement la dérivée de σ_i,

$$\sigma_i = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{v}_i \;\Rightarrow\; \frac{d\sigma_i}{dt} = \frac{d}{dt}(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{v}_i),$$

où la dérivée du terme de droite est

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{v}_i) &= \frac{d\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}}{dt} A\boldsymbol{v}_i + \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \frac{dA}{dt}\boldsymbol{v}_i + \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} A \frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} \\
&= \frac{d\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}}{dt}\sigma_i \boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \frac{dA}{dt}\boldsymbol{v}_i + \sigma_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} \\
&= \frac{\sigma_i}{2}\frac{d}{dt}(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i) + \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \frac{dA}{dt}\boldsymbol{v}_i + \frac{\sigma_i}{2}\frac{d}{dt}(\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i) \\
&= \frac{\sigma_i}{2}\frac{d}{dt}(1) + \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \frac{dA}{dt}\boldsymbol{v}_i + \frac{\sigma_i}{2}\frac{d}{dt}(1) \\
&= \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \frac{dA}{dt}\boldsymbol{v}_i .
\end{aligned}$$

On arrive donc à l'approximation

$$\frac{d\sigma_i}{dt} = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \frac{dA}{dt}\boldsymbol{v}_i \approx \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \left[\frac{\boldsymbol{\delta a}_1}{\Delta t} \quad \cdots \quad \frac{\boldsymbol{\delta a}_{N_t}}{\Delta t} \right] \boldsymbol{v}_i . \tag{10.3}$$

Cette approximation est intéressante puisqu'elle permet d'estimer la variation de l'énergie pour chaque matrice $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1. Les dérivées sont illustrées à la figure 10.7 pour la SVD avec $N_t = 24$ au temps $t = 110$, qui correspond au pas de temps 550.

On constate que les valeurs de $\frac{d\sigma_i}{dt}$ sont toutes négatives. Ceci signifie qu'il y a un transfert net d'énergie des grandes échelles jusqu'aux petites échelles, à travers toutes les fluctuations de l'écoulement. On remarque par ailleurs que le taux de transfert d'énergie est optimal pour $i = 7$, ce qui signifie que les fluctuations contenues dans la matrice $\sigma_7 \boldsymbol{u}_7 \boldsymbol{v}_7^{\mathrm{T}}$ de rang 1 perdent leur énergie plus

rapidement que les autres matrices de rang 1.

Les dérivées $\frac{d\sigma_i}{dt}$ sont illustrées à la figure 10.8 pour différents temps pour la durée de la simulation. On constate que le taux de transfert d'énergie conserve une allure similaire tout au long de la simulation numérique. Cette observation est cohérente avec la nature de l'écoulement, mais ceci n'est pas cohérent avec les résultats illustrés à la figure 10.6, qui indiquent que l'énergie des petites fluctuations devrait aussi croître dans le temps. C'est ici que l'interprétation des matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 fait défaut. Comme on l'a souligné plus haut, ces matrices sont modifiées chaque fois que la matrice A est modifiée. L'évolution des valeurs singulières $\sigma_i(t)$ donnent une vision macroscopique du transfert d'énergie qui se produit dans l'écoulement, alors que les dérivées $\frac{d\sigma_i}{dt}$ donnent une vision à court terme de l'évolution des fluctuations telles qu'elles sont exprimées en espace par les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$. L'interprétation des matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 n'est pas complètement inutile. Lorsque $i = 1$, on a bien une interprétation $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ qui est valide et on constate que l'évolution de $\sigma_1(t)$, présentée à la figure 10.6, est bien en accord avec les valeurs de $\frac{d\sigma_1}{dt}$ présentées à la figure 10.8. L'énergie de la première matrice $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$ de rang 1 diminue graduellement dans le temps, conformément à l'ordre de grandeur de la valeur prédite.

Par exemple, au temps t_{125}, on trouve

$$\frac{d\sigma_1}{dt} \approx \boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \dfrac{\boldsymbol{\delta a}_1}{0,08} & \cdots & \dfrac{\boldsymbol{\delta a}_{125}}{0,08} \end{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 = -15,1,$$

ce qui permet de prédire la valeur

$$\sigma_1(t_{126}) \approx \sigma_1(t_{125}) + \frac{d\sigma_1}{dt}\Delta t = 546,3 - 1,08 = 545,1,$$

alors que la valeur obtenue est $\sigma_1(t_{126}) = 545,2$. L'erreur relative est de $0,018$ % ce qui est excellent. On peut se servir des valeurs $\sigma_1(t_{125})$ et $\sigma_1(t_{126})$ pour calculer une différence avant et la comparer à $\frac{d\sigma_1}{dt}$,

$$\frac{\sigma_1(t_{126}) - \sigma_1(t_{125})}{0,08} = -13,8,$$

ce qui représente un écart relatif de $9,4$ % avec la valeur de $\frac{d\sigma_1}{dt}$ calculée en t_{125}. L'accord entre ces deux valeurs n'est pas excellent, mais il est intéressant. On peut expliquer cet écart par le mécanisme qu'on a décrit plus haut. La dérivée $\frac{d\sigma_1}{dt} = -15,1$ prédit la variation de l'énergie contenue dans les fluctuations exprimées par $\boldsymbol{u}_1$ au temps t_{125}, mais $\frac{\sigma_1(t_{126})-\sigma_1(t_{125})}{0,08} = -13,8$ estime la différence d'énergie contenue par les fluctuations exprimées par $\boldsymbol{u}_1$ obtenue au temps t_{126} et par les fluctuations exprimées par $\boldsymbol{u}_1$ obtenue au temps t_{125}. La SVD a été refaite entre ces deux temps et les fluctuations exprimées par $\boldsymbol{u}_1$ ont donc changé. Toutefois, vu l'interprétation de $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}$, on sait que $\boldsymbol{u}_1$ représente bien la valeur moyenne de l'écoulement qui ne varie pas

trop rapidement. On rappelle que $\Delta t = 0,08$ correspond à quatre pas de temps de la simulation numérique.

Dans le contexte d'une simulation numérique, on peut utiliser la dérivée des valeurs singulières pour estimer une borne supérieure sur le temps Δt qui peut s'écouler avant d'avoir à mettre à jour la SVD de la matrice A. Les vecteurs singuliers $\boldsymbol{u}_i$ et $\boldsymbol{v}_i$ sont déjà connus au moment du calcul de $\boldsymbol{\delta a}_{N_t}$, pendant la simulation numérique. On peut donc estimer la dérivée des valeurs singulières avant de faire la SVD de A sur le prochain sous-intervalle de temps,

$$\begin{aligned} \sigma_i(t_{N_t+1}) &\approx \sigma_i(t_{N_t}) + \left(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \dfrac{\boldsymbol{\delta a}_1}{\Delta t} & \cdots & \dfrac{\boldsymbol{\delta a}_{N_t}}{\Delta t} \end{bmatrix} \boldsymbol{v}_i \right) \Delta t \\ &= \sigma_i(t_{N_t}) + \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\delta a}_1 & \cdots & \boldsymbol{\delta a}_{N_t} \end{bmatrix} \boldsymbol{v}_i . \end{aligned} \tag{10.4}$$

Or, la seule quantité inconnue de l'équation (10.4) au temps t_{N_t}, est la correction $\boldsymbol{\delta a}_{N_t}$ que la simulation doit produire pour passer au temps suivant t_{N_t+1}. Normalement, il faudrait attendre que la simulation converge, puis modifier les colonnes de A et finalement refaire la SVD pour obtenir les valeurs singulières et constater leur variation. L'équation (10.4) dit qu'il est possible d'estimer le taux de variation des valeurs singulières en temps réel, lors du calcul des itérations de la simulation numérique. Ceci permet d'établir une stratégie afin de déterminer pour quels pas temps de la simulation il est nécessaire de recalculer la SVD, ce qui permet ainsi d'économiser des ressources de calcul.

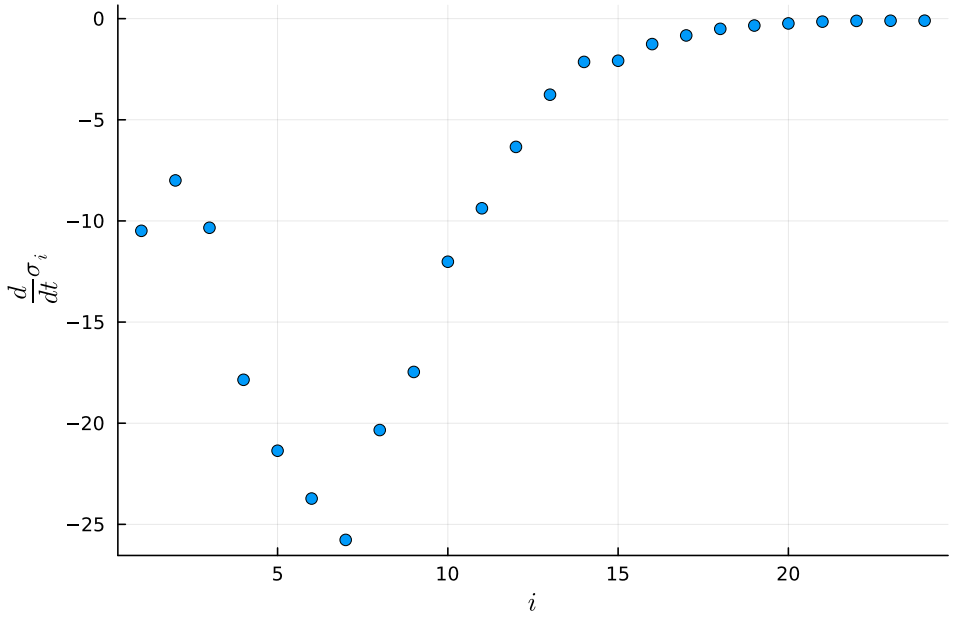


FIGURE 10.7 Estimation de la dérivée des valeurs singulières $\frac{d\sigma_i}{dt}$ pour $N_t = 24$ à $t = 110$.

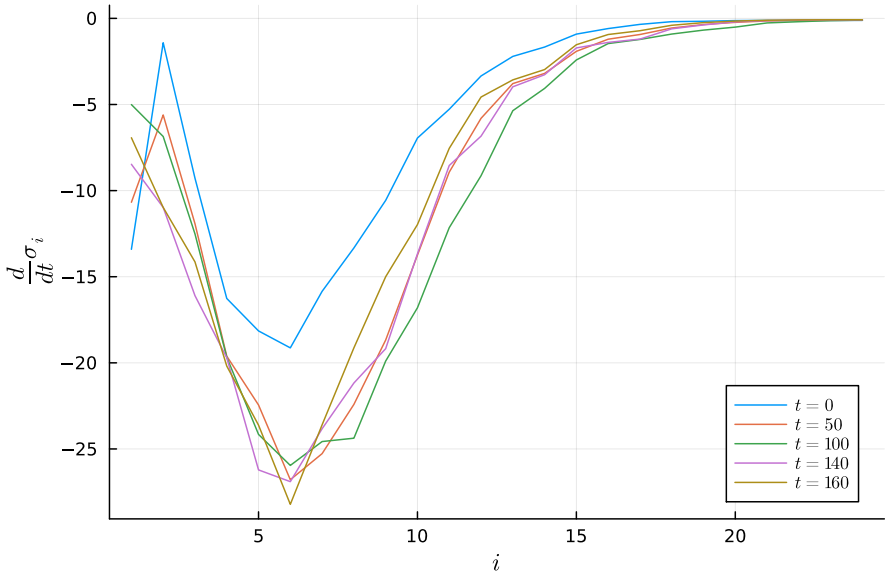


FIGURE 10.8 Estimation de la dérivée des valeurs singulières $\frac{d\sigma_i}{dt}$ pour $N_t = 24$ à différents pas de temps.

10.2 Modèle de viscosité turbulente

Plusieurs expressions peuvent être utilisées pour créer une viscosité turbulente à partir de l'énergie des fluctuations du champ de vitesse A' et d'une taille de filtre Δ [2]. Le choix d'une forme particulière peut dépendre des propriétés de l'écoulement considéré. Sachant que le modèle de Smagorinsky célèbre ses 60 ans cette année et qu'il s'agit du modèle qui a lancé l'approche LES, on choisit la forme

$$\nu_T = C_s \Delta \sqrt{\|A'\|}, \tag{10.5}$$

où C_s est la constante de Smagorinsky, Δ est la taille du filtre et A' est l'approximation des fluctuations turbulentes introduite aux équations (10.1) et (10.2). Cette équation est symbolique et sert à illustrer la forme recherchée. Il faut lui apporter une modification parce qu'écrite sous cette forme, elle est constante dans tout le domaine et inclut tous les états dans un intervalle de durée $\Delta t\,(N_t - 1)$. On souhaite obtenir une expression qui estime ν_T en chaque point $\boldsymbol{x}_p$ du domaine et pour le dernier état seulement. On note $\boldsymbol{e}_p \in \mathbb{R}^{N_h}$ le vecteur de la base canonique dont la seule composante non nulle correspond à la ligne de A qui contient l'énergie de l'écoulement au point $\boldsymbol{x}_p$. On introduit également les vecteurs de la base canonique $\boldsymbol{\tau}_i \in \mathbb{R}^{N_t}$ qui permettent d'exprimer le temps sous la forme vectorielle

$$(t_1, t_2, \cdots, t_{N_t}) = \sum_{i=1}^{N_t} t_i \boldsymbol{\tau}_i .$$

À l'aide de cette notation, on peut exprimer les fluctuations de l'état $\boldsymbol{a}_{N_t}$ de l'écoulement au point $\boldsymbol{x}_p$ et au temps t_{N_t} sous la forme $\boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}} A' \boldsymbol{\tau}_{N_t}$. La matrice A' symbolise la partie résiduelle de la matrice des états et est approximée par $A - A_k$. On aura donc $|\boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}}(A - A_k)\boldsymbol{\tau}_{N_t}| \approx \boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}} A' \boldsymbol{\tau}_{N_t}$, où on doit placer la soustraction $A - A_k$ en valeur absolue puisqu'elle peut prendre des valeurs négatives dues à la troncature de la SVD. On peut donc se servir de l'équation (8.18) pour s'assurer que l'erreur introduite par cette troncature ne dépasse pas un certain seuil de tolérance. La forme (10.5) devient donc

$$\nu_T = C_s \Delta \sqrt{|\boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}}(A - A_k)\boldsymbol{\tau}_{N_t})|}, \tag{10.6}$$

où $\boldsymbol{x}_p$ est le point du domaine où on évalue ν_T au temps t_{N_t}.

10.3 Visualisation du modèle de viscosité turbulente proposé

On peut maintenant visualiser la viscosité turbulente générée par le modèle (10.6). On s'intéresse au dernier pas de temps de la simulation et on compare ce résultat au modèle de Smagorinsky classique en utilisant la valeur $C_s = 0{,}15$ pour les deux modèles. La SVD est faite à partir de $N_t = 24$ états, tous espacés de quatre pas de temps $\Delta t = 0{,}08$. On calcule la viscosité turbulente pour trois approximations A_k différentes, en utilisant les valeurs k = 4, 8 et 12. La viscosité turbulente obtenue pour chaque approximation est affichée à la figure 10.9.

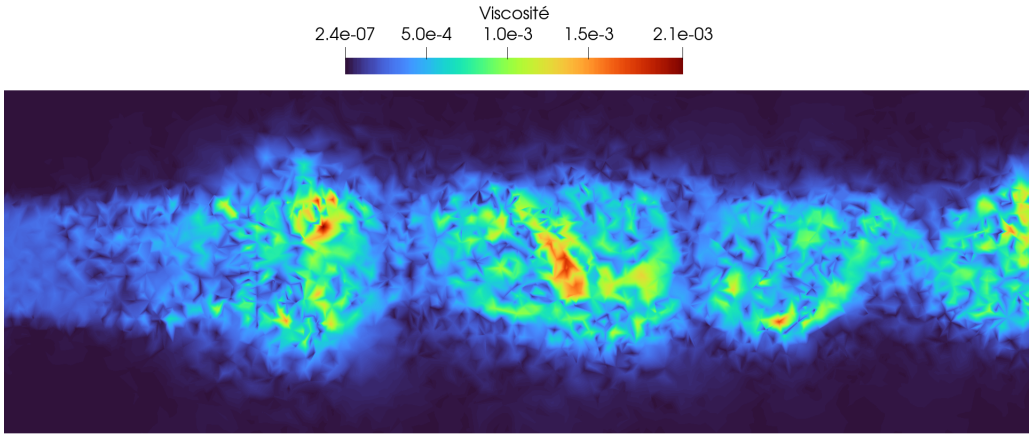
En comparant les viscosités générées par les différentes approximations A_k, illustrées à la figure 10.9, on constate des caractéristiques similaires. Il y a une petite différence dans les fluctuations exprimées par chaque approximation, mais ce n'est pas ce qui distingue ces dernières. L'intensité de la viscosité turbulente décroît lorsque k augmente. C'est exactement le comportement attendu puisque lorsque k augmente, l'intensité des fluctuations contenues dans A' diminue et un moins grand nombre de matrices $\sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ de rang 1 sont utilisées pour construire ν_T.

On peut estimer l'erreur relative de chaque approximation A_k à l'aide de la relation (8.20). On trouve :

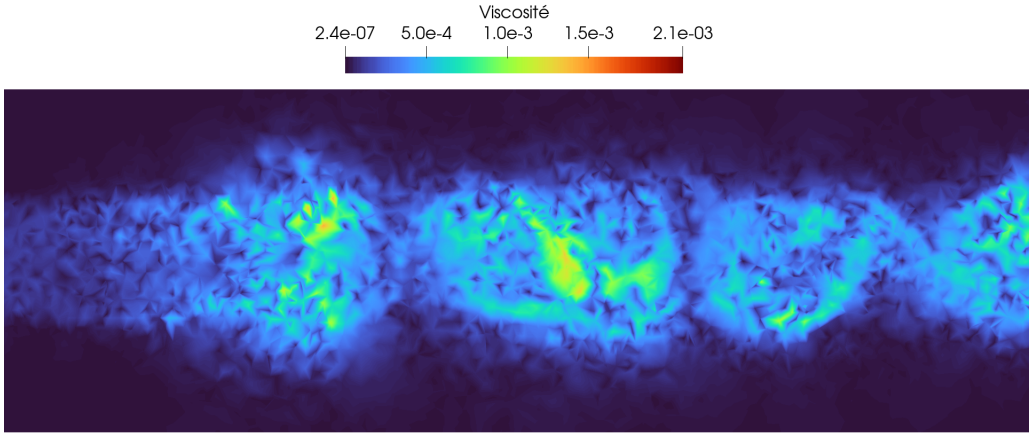
$$\begin{aligned}
\frac{\|A - A_4\|}{\|A\|} &\leq 4{,}0\ \%; \\
\frac{\|A - A_8\|}{\|A\|} &\leq 0{,}83\ \%; \\
\frac{\|A - A_{12}\|}{\|A\|} &\leq 0{,}088\ \%.
\end{aligned}$$

Cette mesure de l'erreur peut aussi servir à mesurer l'énergie contenue dans A' et elle indique donc quelle portion de l'énergie de l'écoulement va être dissipée par ν_T.

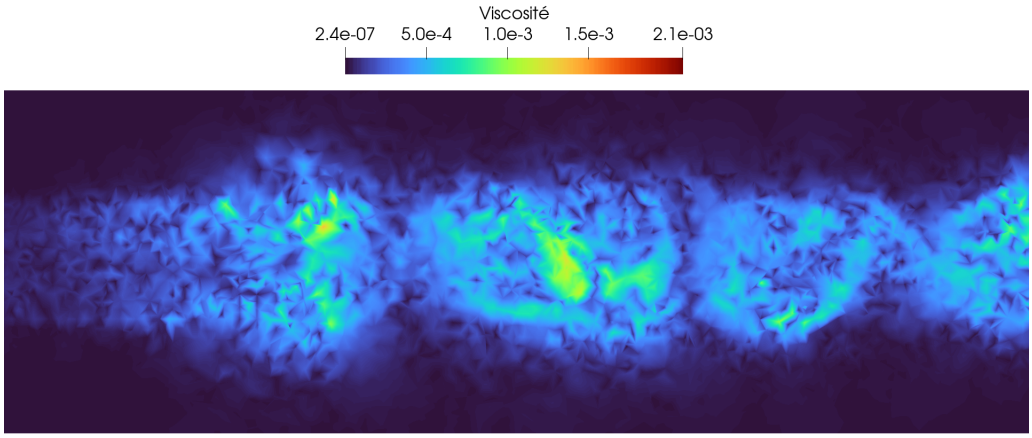
La figure 10.10 propose une façon d'illustrer le modèle de viscosité turbulente proposé, le modèle de Smagorinsky ainsi que la vorticité pour les données numériques du jet turbulent confiné. On constate que le modèle (10.6) et le modèle de Smagorinsky sont différents. En comparant avec la vorticité, on comprend que le modèle construit à l'aide de A_k n'introduit pas de viscosité turbulente là où il y a de la vorticité à l'entrée du jet dans le domaine. Les régions où la viscosité turbulente est la plus forte sont aussi différentes, même si l'ordre de grandeur de la valeur de la viscosité turbulente, à travers le jet, est la même pour les deux modèles.



(a) $k = 4$

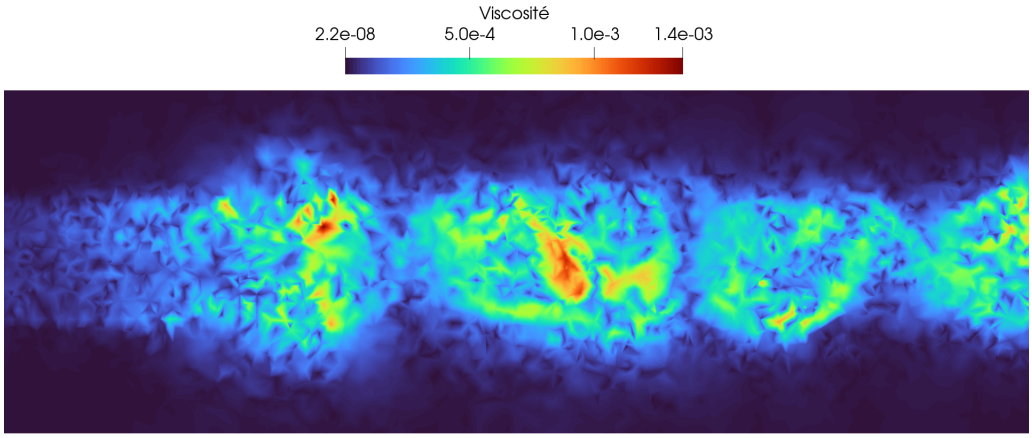


(b) $k = 8$

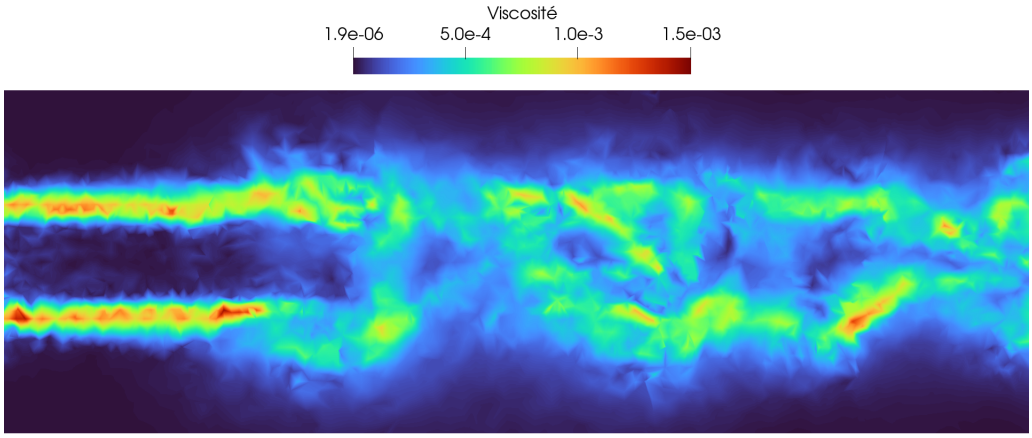


(c) $k = 12$

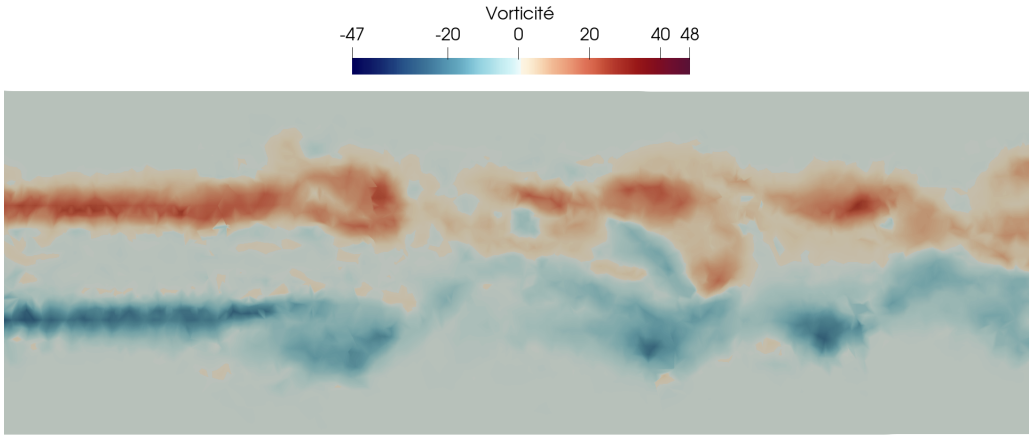
FIGURE 10.9 Viscosité turbulente $\nu_T = C_s \Delta \sqrt{|\boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}}(A - A_k)\boldsymbol{\tau}_{N_t})|}$ pour $k = 4$, 8 et 12, calculée pour les données de simulation numérique du jet turbulent confiné (cf. figures 9.3 à 9.6).



(a) $\nu_T = C_s \Delta \sqrt{|\boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}}(A - A_{12})\boldsymbol{\tau}_{N_t})|}$



(b) Modèle de Smagorinsky



(c) Vorticité

FIGURE 10.10 Illustrations du modèle de viscosité turbulente proposé, du modèle de Smagorinsky et de la vorticité pour les données numériques du jet turbulent confiné (cf. figures 9.3 à 9.6).

10.4 Algorithme pour la mise en œuvre du modèle de viscosité turbulente

Dans ce qui suit, on suppose qu'un maillage a été généré, que des conditions limites et initiales ont été définies et qu'une stratégie de discrétisation a été choisie pour approximer une solution $\boldsymbol{w}$ aux équations de Navier-Stokes :

1. **Initialisation**

   Étant donné : α_{tol}, ϵ_{tol}, ε_{tol}, N_t, ℓ_c et ν_T

   (Afin de simplifier la présentation on choisit $\nu_T = 0$, voir la section 10.4.1)

2. **Solveur Navier-Stokes**

   2.1 Mise à jour de la solution $\boldsymbol{w}_j$ aux équations de Navier-Stokes :

   si $t_{j+1} = t_f$ alors **ARRÊT**

   si $t_{j+1} < t_f$ alors $t_{j+1} = t_j + \Delta t_j$ et $\boldsymbol{w}_{j+1} = \boldsymbol{w}_j + \boldsymbol{\delta w}_j$

   si $\boldsymbol{\delta w}_j < \epsilon_{\text{tol}}$ alors **ARRÊT**

   2.2 Si $j < N_t$

   2.2.1 Construction de la première matrice d'états : $A \rightarrow [A\ \boldsymbol{a}_{j+1}]$

   2.2.2 Sauter la mise à jour de la viscosité turbulente : $\varepsilon = 0$

   2.3 Si $j \geq N_t$

   2.3.1 Mise à jour de la matrice d'états : $A = [\boldsymbol{a}_{j-N_t-1}\ \ldots\ \boldsymbol{a}_j] \rightarrow A = [\boldsymbol{a}_{j-N_t}\ \ldots\ \boldsymbol{a}_{j+1}]$

   2.3.2 Calcul de la dernière correction : $\boldsymbol{\delta a}_j = \boldsymbol{a}_{j+1} - \boldsymbol{a}_j$

   2.3.3 Estimation du taux de transfert d'énergie à l'aide de la dernière SVD :

   $$\varepsilon_i = \frac{d\sigma_i}{dt} \approx \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}} \left[\frac{\boldsymbol{\delta a}_{j-N_t-1}}{\tau_j} \quad \ldots \quad \frac{\boldsymbol{\delta a}_j}{\tau_j} \right] \boldsymbol{v}_i \text{ où } \tau_j = \frac{1}{N_t - 1}(t_j - t_{j-N_t-1})$$

3. **Mise à jour de la viscosité turbulente**

   3.1 Si $\varepsilon_i < \varepsilon_{\text{tol}}$ pour $i \in \{1, \ldots, N_t\}$ alors **retour à l'étape 2**

   3.2 Calcul de la SVD de la matrice des états : $A = \sum_{i=1}^{N_t} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$

   3.3 Choix du rang k de l'approximation A_k :

   On prend la plus petite valeur k t.q. $\dfrac{\|A - A_k\|}{\|A\|} \leq \alpha_{\text{tol}}$

   3.4 Construction de l'approximation de A' au temps t_{N_t+1} :

   $A'\boldsymbol{\tau}_{N_t} = \boldsymbol{a}_{N_t+1} - \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\tau}_{N_t}$

   3.5 Mise à jour de la viscosité turbulente en chaque point $\boldsymbol{x}_p$ du domaine :

   $\nu_T = C_s \Delta \sqrt{|\boldsymbol{e}_p^{\mathrm{T}}(A - A_k)\boldsymbol{\tau}_{N_t})|}$

   Retour à l'étape 2

10.4.1 Choix des paramètres initiaux

Les quantités α_{tol}, ϵ_{tol}, ε_{tol}, N_t, ℓ_c et ν_T doivent être initialisées. Les tolérances α_{tol}, ϵ_{tol} et ε_{tol} sont propres à l'écoulement étudié et dépendent de la précision souhaitée. Le paramètre N_t correspond au nombre d'états à conserver dans la matrice des états et peut être déterminée à l'aide de la borne donnée par l'équation (8.8).

La taille caractéristique de filtre ℓ_c peut être constante ou varier en chaque point du maillage. On peut construire ℓ_c à partir de la taille des éléments ou des arêtes associées à chaque nœud de calcul $\boldsymbol{x}_p$. Il serait possible aussi d'utiliser une définition plus complexe pour définir ℓ_c à partir de A. Plus spécifiquement, on sait que les fluctuations spatiales contenues dans A sont liées à la taille du filtre LES induit par le maillage. On pourrait extraire ℓ_c à partir d'une analyse des tailles caractéristiques des fluctuations contenues dans A. Il faut toutefois estimer l'erreur associée à une telle approche afin de pouvoir juger de sa fiabilité.

La valeur initiale de la viscosité turbulente ν_T peut tout simplement être nulle. La matrice des états peut alors être construite pendant les premiers pas de temps de la simulation numérique si le taux de transfert d'énergie ne dépasse pas la tolérance ε_{tol} fixée pour $t_j < t_{N_t}$. Ceci se produit lorsqu'on effectue la simulation numérique d'un écoulement transitoire initialement laminaire qui devient graduellement turbulent. Ce type d'approche est fréquent puisqu'elle assure la stabilité de la simulation numérique et on ne détient souvent pas suffisamment d'information sur la nature de l'écoulement pour construire un état initial ayant de la turbulence pleinement développée. Si, au contraire, on démarre une simulation dans un état où la turbulence est développée, il est alors fort probable qu'on détienne suffisamment d'information pour construire une meilleure viscosité turbulente initiale. Par exemple, si on a accès à des états précédents, comme dans le cas d'un redémarrage d'une simulation numérique, alors on peut déjà construire la matrice des états, quitte à ce que N_t soit initialement plus petit. Dans l'éventualité où on n'aurait pas accès aux données nécessaires, on pourrait lancer une simulation préliminaire avec des paramètres modifiés qui permettrait d'extraire l'information requise en quelques pas de temps seulement.

On considère ainsi que les quantités nécessaires pour initialiser l'algorithme présenté sont accessibles et ne posent aucune difficulté particulière à la réalisation d'un ensemble raisonnable de types de simulations numériques d'écoulements turbulents.

CHAPITRE 11 CONCLUSION

On conclut cette thèse en trois temps. On effectue d'abord une synthèse des travaux. On souligne ensuite ce qui limite la méthodologie. On termine en identifiant les améliorations futures et les pistes de recherche qui sont ouvertes.

11.1 Synthèse des travaux

Les trois parties qui composent cette thèse sont :

1. La modélisation numérique d'écoulements turbulents ;
2. Les décompositions matricielles d'ensembles de données ;
3. La modélisation numérique d'écoulements turbulents à l'aide de décompositions matricielles.

Dans ce qui suit, on élabore sur chacune de ces parties.

11.1.1 Modélisation numérique d'écoulements turbulents

La première partie de la thèse sert à présenter l'évolution et les rouages de la modélisation numérique de la turbulence, en particulier pour l'approche LES. On en profite aussi pour analyser la forme des modèles les plus utilisés et pour mettre en évidence les forces et les faiblesses de chacun de ces modèles.

Au chapitre 2 on procède à une revue de littérature qui permet de retracer les origines de l'approches LES aux travaux de J. Smagorinsky, qui a proposé un modèle de viscosité turbulente il y a 60 ans. Le modèle de Smagorinsky est le moins performant, mais aussi le modèle le plus utilisé. Il semble ainsi que la simplicité l'emporte sur la performance. Ce trait n'est pas spécifique au modèle de Smagorinsky et peut s'expliquer par plusieurs points soulignés à la section 2.2. On en conclut que les avantages d'un modèle qui reproduit la physique des petites échelles avec une grande fidélité sont moindres devant l'ampleur du coût en ressources de calculs. On observe souvent ce principe, mis en pratique lorsqu'on préfère laisser la diffusion numérique jouer le rôle de viscosité turbulente. Il suffit alors de choisir un maillage suffisamment grossier ou bien un schéma numérique suffisamment dissipatif. Cette approche permet d'éviter d'avoir à identifier un modèle de viscosité turbulente adapté au problème étudié et d'avoir à le mettre en œuvre. Ce principe est aussi à la base de l'approche LES implicite, mentionnée à la section 3.1.7. Néanmoins, plusieurs modèles performants ont été développés dans le dernier quart de siècle, en plus des modifications

apportées au modèle de Smagorinsky au début des années 1990. Une liste des modèles les plus utilisés est donnée à la section 2.4. Une présentation détaillée pour chacun de ces modèles est donnée au chapitre 3.

On retrace les origines de l'approche statistique de la modélisation de la turbulence au chapitre 2. On s'inspire grandement de la POD qui trouve ses racines dans l'approche statistique et qui tente, entre autre, de donner une description mathématique des structures cohérentes qui ont été reconnues expérimentalement dans les années 1970 par Roshko [65]. Ceci nous a permis d'orienter nos efforts dans la bonne direction et de mieux comprendre comment utiliser les décompositions matricielles. On observe aussi que les approches qui utilisent la POD et ses variantes visent souvent à construire une ROM afin de remplacer les équations aux dérivées partielles non linéaires de Navier-Stokes par des EDO linéaires, simples à résoudre. Ces équations simplifiées servent souvent ensuite à déduire des propriétés analytiques ou à reproduire des simulations numériques à faible coût. Ce type d'approche ne convient donc pas à notre étude puisque pour obtenir une ROM, il faut d'abord produire des données précises, souvent à l'aide d'une approche DNS ou LES, ce qui n'est pas aligné avec notre objectif qui correspond davantage à l'étape qui précède l'approche ROM.

On remarque finalement que l'idée de construire une viscosité turbulente à l'aide des données extraites d'une POD a été suggérée en 1988 [66] pour obtenir une ROM dans le contexte de la couche limite d'un écoulement turbulent près d'une paroi. L'idée n'est certainement pas nouvelle, mais au meilleur de notre connaissance, l'application de cette idée pour produire un modèle de viscosité turbulente pendant qu'une simulation numérique s'exécute n'a pas encore été tentée. Ce qui s'en rapproche le plus est une étude faite en 2020 [72] et qui utilise la POD pendant l'exécution d'une simulation numérique, mais pour reconstruire le tenseur des contraintes visqueuses. Cette approche n'est pas alignée avec nos objectif puisque l'effort requis pour arriver à modéliser le tenseur des contraintes visqueuses est supérieur à l'effort requis pour simplement produire une viscosité turbulente. L'auteur constate d'ailleurs que l'approche donne des résultats similaires aux approches WALE et de Smagorinsky, mais qu'elle nécessite environ 12 % de ressources de calcul additionnelles. De plus, le problème étudié est un écoulement dans une conduite exhibant une turbulence isotrope.

11.1.2 Décompositions matricielles d'un ensemble de données

La seconde partie de la thèse fait initialement une présentation naïve des décompositions matricielles et s'oriente ensuite graduellement vers une démarche plus habile. Les décompositions matricielles et la modélisation des écoulements turbulents trouvent généralement un terrain commun via une approche statistique à l'aide d'une corrélation à deux points. On prend en exemple la POD qui a été héritée de la PCA, une méthode qui appartient au paradigme de l'analyse statistique.

L'information extraite d'une POD est souvent utilisée pour identifier des structures cohérentes. Or, on vise une application des décompositions matricielles qui est fondamentalement différente. Cette différence vient de la façon avec laquelle les termes d'une décomposition matricielle sont utilisés. On ne souhaite pas utiliser les décompositions matricielles pour identifier des structures cohérentes. On utilise les décompositions pour identifier les fluctuations du champ de vitesse qui sont susceptibles de bien approximer la turbulence de l'écoulement. On doit donc réexaminer les décompositions matricielles en détail avec cette nouvelle perspective.

Les décompositions étudiées sont la SVD et la NMF. L'application de la SVD s'impose d'elle-même puisqu'elle est à la base de la POD et parce qu'elle possède des propriétés recherchées, telles que l'existence, l'unicité et l'optimalité au sens des moindres carrés. La NMF ne possède aucune de ces propriétés. Elle n'est ni unique, ni optimale et peut ne pas exister. Sa définition est plus complexe que celle de la SVD puisqu'on exige que ses coefficients soient positifs. Cette dernière propriété permet d'attribuer une interprétation utile à toutes les matrices de rang 1 de la NMF, ce qui n'est pas possible avec la SVD.

Lors de l'utilisation d'une POD, il peut être affirmé sans preuve ni vérification que la première matrice de rang 1 correspond à la valeur moyenne de l'écoulement [72]. Or, on détermine que cette affirmation est fausse. Dans un contexte précis, on peut toutefois affirmer que cette première matrice de rang 1 donne une bonne approximation de l'écoulement moyen. Il semble que ce genre de propriété n'ait jamais été documentée. On corrige la situation en montrant que l'interprétation des premières matrices de rang 1 peut avoir une signification physique, mais que les conditions doivent le permettre. Les matrices de rang 1 subséquentes ne bénéficient pas de cet avantage et doivent être interprétées prudemment. La NMF ne souffre pas de ce problème. Elle est conçue de manière à ce que les matrices de rang 1 qui en découlent n'aient que des coefficients positifs. Ainsi, l'information contenue dans chaque matrice de rang 1 ne peut que se superposer sans jamais interagir. Ceci peut poser un problème si une certaine forme d'interaction est souhaitée entre les données. De plus, pour utiliser efficacement les matrices de rang 1 de la NMF, on constate qu'on doit leur attribuer chacune une signification particulière et qu'il est préférable d'en inclure autant que possible dans l'approximation de la matrice des états.

En comparant l'effet du filtre chapeau, présenté au chapitre 3, à l'effet des décompositions matricielles, on comprend que l'application d'une décomposition matricielle ne peut pas être vue comme un filtre chapeau au sens classique. Cette remarque est importante puisque dans l'anticipation de l'application d'une décomposition matricielle, on pourrait se demander s'il ne serait pas plus simple d'utiliser une approximation de faible rang pour filtrer directement le champ de vitesse de l'écoulement. Cette idée doit être explorée plus en profondeur.

On apprend qu'il y a plusieurs façons d'organiser les données sous forme matricielle avant d'y

appliquer une décomposition. On peut organiser les données en matrices indépendantes, ou bien on peut les réunir pour qu'elles forment les blocs d'une même matrice. Il faut bien choisir l'organisation des données parce que certaines configurations peuvent donner de mauvais résultats et elles peuvent même empêcher la NMF d'être appliquée. Dans le cas du champ de vitesse de l'écoulement d'un fluide, les valeurs peuvent être autant positives que négatives, ce qui veut dire que la NMF ne peut pas être appliquée. Une solution simple à ce problème est d'utiliser une formulation de l'énergie de l'écoulement. Ceci permet non seulement de garantir la positivité des coefficients de la matrice à décomposer, mais aussi de réunir toutes les composantes du champ de vitesse en une seule matrice.

On arrive à relier une NMF de rang 1 à la première matrice de rang 1 de la SVD à l'aide du théorème de Perron-Frobenius. Ce résultat est intéressant puisqu'il permet d'obtenir rapidement une première approximation pour la première matrice de rang 1 d'une NMF de rang supérieur. Même si la formulation de la NMF ne contient pas l'équivalent des valeurs singulières de la SVD, on peut tout de même extraire des coefficients similaires pour chaque matrice de rang 1 de la NMF et les réorganiser par ordre de grandeur. Cette réorganisation permet d'analyser les différentes matrices de rang 1 en fonction de leur contenu en énergie. Les colonnes des matrices de la NMF deviennent alors unitaires, mais rien ne garantit leur orthogonalité. On montre que plus le rang de la NMF est élevé, moins la première matrice de rang 1 de la NMF correspond à la première matrice de rang 1 de la SVD. En ordonnant les matrices de rang 1 selon leur norme, on constate que la première matrice de rang 1 conserve tout de même une ressemblance avec la première matrice de rang 1 de la SVD. La positivité des coefficients de la NMF nous permet de donner une interprétation simple de la première matrice de rang 1 de la NMF : il s'agit de l'information qui est commune à toutes les colonnes de la matrice décomposée. On vérifie toutefois que contrairement à la SVD, la première matrice de rang 1 de la NMF n'est pas une bonne approximation de la valeur moyenne de l'écoulement, ce qui a du sens puisque les coefficients qui composent les matrices de la NMF doivent être positifs.

On obtient finalement une borne sur l'erreur commise par une approximation de rang k obtenue d'une décomposition matricielle. Dans le cas de la SVD, le lien entre le rang de l'approximation et la borne sur l'erreur est simple. Dans le cas de la NMF, ce lien est moins simple puisqu'on doit aussi spécifier le rang de la NMF. La borne obtenue permet de clarifier la situation et nous indique qu'une approximation de faible rang provenant d'une NMF de rang élevé pourrait donner de mauvais résultats. L'incertitude ne vient pas de la qualité de la borne trouvée, mais bien du manque d'information pour guider le choix de la NMF à utiliser. On conclut donc que le rang de la NMF est une information incomplète pour juger de son utilité. Il faut donner un sens aux matrices de rang de 1 de la NMF pour qu'elle soit utile. Pour cette raison on ne pousse pas davantage notre exploration de la NMF.

11.1.3 Modélisation numérique d'écoulements turbulents à l'aide de décompositions matricielles

Dans la troisième partie de la thèse, on complète les connaissances développées au sujet de la SVD afin de construire un modèle de viscosité turbulente. On développe les outils nécessaires pour aider à l'identification de la turbulence via les caractéristiques de la matrice des états et des composantes de sa SVD. On explique ensuite comment se servir de ces outils et on en souligne les aspects importants.

On procède d'abord à l'étude théorique de la SVD d'un écoulement laminaire stationnaire et on montre que le rang de la matrice des états est égal à 1. On étudie ensuite un écoulement laminaire transitoire simple. On déduit que la SVD demeure simple dans ce cas particulier puisque la matrice des états peut être de faible rang. Toutefois, si l'écoulement laminaire possède suffisamment de fluctuations simples non turbulentes, alors le rang de la matrice des états peut devenir élevé. La mesure du rang de la matrice des états n'est donc pas suffisante pour déterminer si un écoulement est laminaire ou turbulent. Plus de travail est requis pour mieux comprendre le lien entre le rang de la SVD et la turbulence d'un écoulement. Les développements faits dans l'étude de la POD suggèrent que l'étude du spectre des valeurs singulières contient l'information nécessaire pour obtenir une mesure de la turbulence d'un écoulement. Ceci a du sens puisque les valeurs singulières sont liées au rang de la matrice des états et contiennent l'information sur l'énergie des fluctuations de l'écoulement. Les travaux faits jusqu'à présent sur l'étude du lien entre les valeurs singulières et le spectre d'énergie des échelles spatiales est exhaustif. Kolmogorov a formulé sa fameuse cascade d'énergie des grandes échelles vers les plus petites échelles et cette approche est devenue canonique. Pour l'utiliser, il faut toutefois avoir en main une mesure des tailles caractéristiques des échelles spatiales de fluctuations turbulentes de l'écoulement. Cette approche suggère donc un travail supplémentaire qui pousserait notre étude dans une direction intéressante mais ardue, d'autant plus que les nombreuses études liées à la POD se sont largement concentrées sur cette piste. On préfère donc adopter une stratégie plus simple et plus adaptée aux besoins de notre modèle qui s'applique davantage au contexte des simulations numériques. La mesure nécessaire pour évaluer la turbulence d'un écoulement réside dans la variation temporelle du spectre des valeurs singulières. Cette approche est nouvelle puisqu'il semble que l'évolution temporelle des valeurs singulières n'a pas encore été étudiée sous cet angle. Cette approche a aussi du sens, car elle peut être rattachée à la théorie de Kolmogorov puisque les échelles spatiales et temporelles des fluctuations turbulentes sont fondamentalement indissociables.

Pour procéder à l'analyse des valeurs singulières dans le temps, on doit avoir en main des données qui conviennent au contexte dans lequel l'information déduite sera utilisée. On obtient alors des données de jet turbulent pour un nombre de Reynolds de 10 000 à l'aide d'une simulation numé-

rique et de la méthode des éléments finis. On applique ensuite la SVD aux données de la simulation numérique afin d'étudier la variation des valeurs singulières dans le temps. Chaque application de la SVD est faite à l'aide de N_t pas de temps antérieurs, tous espacés de 4 pas de temps de simulation numérique. Ainsi, on obtient un ensemble de N_t valeurs singulières pour chaque mise à jour de la SVD qui se fait à des intervalles constants.

L'analyse de l'évolution des N_t valeurs singulières dans le temps est intéressante. On remarque que la variation des valeurs singulières n'est pas uniforme. Les premières valeurs singulières varient lentement. On rappelle que les plus grandes valeurs singulières représentent l'énergie des plus grandes échelles de l'écoulement. Notre interprétation de la première matrice de rang 1 nous indique donc que ce comportement est normal et qu'il approxime bien la fluctuation de l'énergie des plus grandes échelles de l'écoulement. Les plus petites valeurs singulières fluctuent beaucoup plus rapidement dans le temps, en particulier lorsque les grandes échelles de l'écoulement cèdent de l'énergie aux plus petites échelles en se décomposant. On a ainsi un outil pour visualiser et estimer le transfert de l'énergie des grandes échelles vers les petites échelles. Afin de corroborer ce portrait et comprendre comment utiliser cette information, on développe une expression inédite de la dérivée des valeurs singulières par rapport au temps. L'expression de cette approximation est simple et pratique puisqu'elle peut être calculée pendant les itérations d'une simulation numérique, sans avoir besoin de mettre à jour la SVD de l'écoulement et avec un coût supplémentaire faible puisqu'il s'agit d'un produit entre une matrice et deux vecteurs.

En mettant à l'épreuve l'approximation proposée par l'expression de la dérivée des valeurs singulières, on constate qu'elle ne correspond pas à la variation des valeurs singulières dans le temps, particulièrement pour les petites valeurs singulières. On trouve que cette nouvelle approximation des dérivées prédisent des valeurs strictement négatives tout au long de la simulation, alors que certaines valeurs singulières augmentent clairement dans le temps. Lorsque les petites échelles de l'écoulement reçoivent de l'énergie des plus grandes échelles, on s'attend à ce que l'énergie des petites échelles augmente. On doit aussi inclure l'énergie dissipée par les petites échelles à ce bilan. Quoi qu'il en soit, on doit d'abord comprendre la nature du portrait dressé par ces deux mesures. Les plus grandes valeurs singulières varient comme la valeur prédite par leur dérivée, mais pas de façon exacte. Encore une fois, il semble y avoir un lien entre ces deux mesures de la variation des valeurs singulières, mais on doit d'abord comprendre leur interprétation avant de pouvoir tirer des conclusions.

La valeur numérique que prend chaque valeur singulière, à chaque pas de temps, peut être interprétée comme l'énergie contenue dans les fluctuations appartenant à une certaine échelle spatio-temporelle. Toutefois, la SVD a été modifiée par une mise à jour entre deux évaluations. Or, la première matrice de rang 1 ne varie pas trop lors de la mise à jour de la SVD, puisqu'elle peut être

liée aux plus grandes échelles de l'écoulement. Ce n'est pas le cas pour les petites valeurs singulières, qui fluctuent beaucoup plus. Ceci veut dire que les vecteurs singuliers changent eux aussi lors de la mise à jour de la SVD. Cette observation est à la fois troublante et remarquable. Elle est troublante parce qu'on comprend alors que l'expression des fluctuations des échelles intermédiaires et des petites échelles change à chaque pas de temps. On peut donc difficilement associer une interprétation claire à ces échelles si leur représentation change à chaque mise à jour de la SVD. Sauf que les courbes tracées par les valeurs singulières dans le temps semblent continues. Il y a donc une continuité dans la représentation de ces échelles et elle est reliée à l'énergie des fluctuations. La dérivée d'une valeur singulière, au temps t_{N_t}, représente la variation de l'énergie des fluctuations telles qu'elles sont exprimées par la SVD à ce temps précis. La nature dissipative de l'écoulement prédit que les fluctuations qui existent à un temps donné perdent leur énergie. Le transfert d'énergie des grandes échelles vers les petites échelles se produit lorsque les grandes fluctuations deviennent plus petites, soit par dissipation, soit par fragmentations. Les dérivées des valeurs singulières ne sont pas positives parce que si deux valeurs singulières voisines échangent de l'énergie, comme le suggère la cascade de Kolmogorov, alors elles changent aussi de place dans le spectre puisqu'elles sont réordonnées automatiquement par la SVD. On souligne que cette observation n'est valide que pour le cas du jet turbulent étudié. D'autres problèmes doivent être étudiés pour produire une analyse plus complète, qui permettra de mieux comprendre cette relation.

À l'aide des notions acquises au sujet des matrices de rang 1 de la SVD, on réussi à construire une approximation de rang k de la matrice des états de l'écoulement. Puisqu'on peut décomposer la matrice des états en une somme de deux matrices qui représentent la partie filtrée et la partie résiduelle de l'écoulement, on se sert de l'approximation de rang k pour représenter la partie filtrée de la matrice des états. On obtient ainsi une approximation de la partie résiduelle qui sert alors à modéliser l'énergie des fluctuations contenues dans la partie turbulente de l'écoulement. L'interprétation incertaine des matrices de rang 1, qui représentent les petites échelles, ne nous permet pas de les identifier individuellement aux fluctuations turbulentes de l'écoulement. Toutefois, la borne sur l'erreur de l'approximation de rang k de la matrice des états se transfère directement sur l'approximation de la partie résiduelle et peut servir à mesurer l'énergie qui y est contenue. Ceci nous permet de contrôler l'erreur de représentation du modèle. De plus, comme on l'a appris lors de l'étude des modèles de viscosité turbulente existants, on bénéficie d'une certaine marge de manœuvre face à l'erreur de représentation des petites échelles puisque leur représentation précise n'est pas le critère le plus important pour qu'un modèle de viscosité turbulente fonctionne bien.

On sait que plusieurs formes de viscosité turbulente peuvent être construites à partir d'une mesure de l'énergie. La forme précise peut dépendre de l'utilisation spécifique qu'on souhaite en faire. On choisit d'utiliser une forme simple qui rappelle le modèle de Smagorinsky et on calcule la viscosité turbulente associée à différentes approximations de la matrice des états en faisant varier le rang de

l'approximation. On constate qu'une viscosité turbulente générée à l'aide d'une approximation de rang élevé dissipe l'énergie avec moins d'intensité. On compare ensuite le nouveau modèle à celui de Smagorinsky. On constate que les deux modèles sont d'allure distincte et que le nouveau modèle ne partage pas la propension du modèle de Smagorinsky à introduire de la viscosité turbulente supplémentaire là où la vorticité est élevée. Malgré ces différences, on trouve que les deux modèles sont du même ordre de grandeur pour une approximation de rang $k = 12$ de la matrice des états. Cette valeur correspond au rang qui contient les fluctuations les plus importantes contenues dans la matrice des états telles que mesurées par la dérivée des valeurs singulières.

Un algorithme est présenté pour mettre en œuvre le nouveau modèle de viscosité turbulente dans le contexte d'une simulation numérique à l'aide de l'approche LES. On explique comment mettre en place les éléments nécessaires à la réalisation d'une simulation numérique à partir de divers ensembles de paramètres initiaux, montrant ainsi que le modèle développé peut jouer un rôle pratique dans une multitude de cas.

11.2 Limitations de la méthodologie proposée

L'interprétation des matrices de rang 1 de la SVD est ce qui limite le plus son application. À cause de cette lacune, on doit se résoudre à utiliser une approximation de la matrice des états en se basant sur une borne de l'erreur de troncature de la SVD. De plus, ceci rend l'analyse de la variation des valeurs singulières dans le temps plus difficile et plus périlleuse. Bien qu'on réussisse à en extraire de l'information utile, il faut être prudent face à l'interprétation qu'on en fait.

Notre analyse est soutenue par des démonstrations et des approximations faites à l'aide d'éléments bien connus de l'algèbre linéaire. Mais nos observations ont été guidées par le cas particulier du jet turbulent confiné. Or, bien qu'il s'agisse d'un exemple de choix pour amorcer une étude sur la modélisation de la turbulence, on se doit d'étudier d'autres types d'écoulements turbulents afin d'obtenir une mesure plus juste de l'importance des aspects mis de l'avant par notre étude. Ainsi, bien que les résultats obtenus soient importants et utiles, on ne pourra pas avoir un portrait complet de ce qui est possible de faire à l'aide de cette nouvelle approche sans étudier un plus large éventail d'écoulements turbulents qui mettent à l'épreuve la simplicité qu'on retrouve dans l'exemple du jet. On pense entre autre à l'homogénéité de la turbulence, la présence d'obstacles, de couches limites, de points de recollement, aux phénomènes turbulents à basse fréquence, etc.

11.3 Améliorations futures et pistes de recherche

Plusieurs questions sont restées sans réponse et plusieurs avenues ont été identifiées pour approfondir l'étude de la modélisation numérique des écoulements turbulents comme on l'a défini. Parmi celles-ci, on retrouve :

1. Quelle interprétation peut on donner aux matrices de rang 1 d'une NMF de rang k pour qu'elle soit utile dans la modélisation numérique des écoulements turbulents ?
2. Bien qu'une approximation de rang k générée par une décomposition matricielle ne semble pas équivalente à un filtre LES classique, pourrait on simplement retirer les fluctuations résiduelles de la modélisation numérique de l'écoulement sans passer par un modèle de viscosité turbulente ?
3. Avant de se questionner sur la modélisation numérique des écoulements turbulents, il peut être sage de d'abord étudier les écoulements laminaires. On a bien identifié quelques principes simples au sujet des écoulements laminaires, mais on a été forcé de conclure que certains écoulements laminaires étaient suffisamment complexes pour nous empêcher d'utiliser le rang de la matrice des états comme seul critère d'identification. Or, ce portrait semble incomplet et il y a peut-être une façon de relier le rang de la matrice des états à la turbulence d'un écoulement. Par exemple, en procédant à une décomposition par blocs de la matrice des états, on pourrait isoler les régions de l'écoulement qui sont elles représentées par des sous-matrices de rang 1. La taille des blocs ainsi obtenus pourrait être un indicateur de la turbulence de l'écoulement puisque les fluctuations turbulentes se produisent jusqu'aux plus petites échelles ;
4. On a entamé l'étude du taux de transfert de l'énergie via la variation temporelle du spectre des valeurs singulières, mais cette étude reste incomplète. Le lien entre les quantités mises en évidence et la théorie de Kolmogorov ne semble pas hors de portée et pourrait permettre d'améliorer l'expression de la viscosité turbulente ;
5. La validité du modèle de viscosité turbulente reste à être démontrée à l'aide d'une simulation numérique.

RÉFÉRENCES

[1] G. Strang, *Linear Algebra and Learning from Data*, 1er éd. Wellesley-Cambridge Press, 2019.

[2] P. Sagaut, *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*, 3e éd. Springer, 2006.

[3] C. J. Lu, Haoand Rutland, "Structural subgrid-scale modeling for large-eddy simulation : A review," *Acta Mechanica Sinica*, vol. 32, no. 4, p. 567–578, Aug 2016. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1007/s10409-016-0556-4

[4] O. Reynolds, "IV. on the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. (A.)*, vol. 186, p. 123–164, dec 1895. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1098/rsta.1895.0004

[5] F. G. Schmitt, "About boussinesq's turbulent viscosity hypothesis : historical remarks and a direct evaluation of its validity," *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 335, no. 9, p. 617–627, 2007, joseph Boussinesq, a Scientist of bygone days and present times. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631072107001386

[6] O. Darrigol, "Joseph boussinesq's legacy in fluid mechanics," *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 345, no. 7, p. 427–445, 2017, a century of fluid mechanics : 1870–1970. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631072117300840

[7] B. Chaouat, "The state of the art of hybrid RANS/LES modeling for the simulation of turbulent flows," *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 99, no. 2, p. 279–327, jul 2017. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1007/S10494-017-9828-8

[8] G. F. Rosetti et G. Vaz, "On the numerical simulations of captive, driven and freely moving cylinder," *Journal of Fluids and Structures*, vol. 74, p. 492–519, oct 2017. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1016/j.jfluidstructs.2017.06.013

[9] P.-A. Bois, "Joseph boussinesq (1842–1929) : a pioneer of mechanical modelling at the end of the 19th century," *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 335, no. 9, p. 479–495, 2007, joseph Boussinesq, a Scientist of bygone days and present times. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631072107001350

[10] J. Smagorinsky, "General circulation experiments with the primitive equations : I. the basic experiment," *Monthly Weather Review*, vol. 91, no. 3, p. 99 – 164, mar 1963. [En ligne]. Disponible : https://journals.ametsoc.org/view/journals/mwre/91/3/1520-0493_1963_091_0099_gcewtp_2_3_co_2.xml

[11] J. W. Deardorff, “A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 41, n°. 2, p. 453–480, apr 1970. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1017/S0022112070000691

[12] U. Schumann, “Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli,” *Journal of Computational Physics*, vol. 18, n°. 4, p. 376–404, 1975. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999175900935

[13] L. C. Berselli, “Analysis of a large eddy simulation model based on anisotropic filtering,” *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, vol. 386, n°. 1, p. 149–170, feb 2012. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2011.07.044

[14] J. Taghinia, M. M. Rahman, T. Siikonen et R. K. Agarwal, “One-equation sub-grid scale model with variable eddy-viscosity coefficient,” *Computers & Fluids*, vol. 107, p. 155–164, jan 2015. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.10.014

[15] S. Khani et M. L. Waite, “Large eddy simulations of stratified turbulence : the dynamic smagorinsky model,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 773, p. 327–344, may 2015. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1017/jfm.2015.249

[16] L. Bisconti, “On the convergence of an approximate deconvolution model to the 3d mean boussinesq equations,” *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, vol. 38, n°. 7, p. 1437–1450, may 2014. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1002/mma.3160

[17] F. X. Trias, D. Folch, A. Gorobets et A. Oliva, “Building proper invariants for eddy-viscosity subgrid-scale models,” *Physics of Fluids*, vol. 27, n°. 6, p. 065103, jun 2015. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.4921817

[18] J. Waters et D. B. Carrington, “A parallel large eddy simulation in a finite element projection method for all flow regimes,” *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, vol. 70, n°. 2, p. 117–131, jul 2016. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1080/10407782.2016.1173453

[19] J. Jimenez et R. D. Moser, “Large-eddy simulations : Where are we and what can we expect ?” *AIAA Journal*, vol. 38, n°. 4, p. 605–612, 2000. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.2514/2.1031

[20] F. Nicoud, H. B. Toda, O. Cabrit, S. Bose et J. Lee, “Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations,” *Physics of Fluids*, vol. 23, n°. 8, p. 085106, aug 2011. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.3623274

[21] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin et W. H. Cabot, “A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model,” *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, vol. 3, n°. 7, p. 1760–1765, jul 1991. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.857955

[22] A. Scotti, C. Meneveau et D. K. Lilly, “Generalized smagorinsky model for anisotropic grids,” *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, vol. 5, n°. 9, p. 2306–2308, sep 1993. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.858537

[23] M. Germano, “Differential filters for the large eddy numerical simulation of turbulent flows,” *Physics of Fluids*, vol. 29, n°. 6, p. 1755, 1986. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.865649

[24] L. C. Berselli et D. Catania, “On the boussinesq equations with anisotropic filter in a vertical pipe,” *Dynamics of Partial Differential Equations*, vol. 12, n°. 2, p. 177–192, 2015.

[25] P. Moin et J. Kim, “Numerical investigation of turbulent channel flow,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 118, p. 341–377, 1982.

[26] P. P. Sullivan, J. C. McWilliams et C.-H. Moeng, “A subgrid-scale model for large-eddy simulation of planetary boundary-layer flows,” *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 71, n°. 3, p. 247–276, nov 1994. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1007/bf00713741

[27] N. Franck et F. Ducros, “Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor,” *Flow Turbulence and Combustion*, vol. 62, p. 183–200, 09 1999.

[28] D. K. Lilly, “A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method,” *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, vol. 4, n°. 3, p. 633–635, 1992. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.858280

[29] A. W. Vreman, “An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow : Algebraic theory and applications,” *Physics of Fluids*, vol. 16, n°. 10, p. 3670–3681, 09 2004. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.1785131

[30] H. B. Toda, K. Truffin et F. Nicoud, “Is the dynamic procedure appropriate for all sgs models ?” dans *V European Conference on Computational Fluid Dynamics*, J. C. F. Pereira et A. Sequeira, édit., Lisbon, Portugal, jun 2010.

[31] R. Verstappen, “When does eddy viscosity damp subfilter scales sufficiently ?” *Journal of Scientific Computing*, vol. 49, n°. 1, p. 94–110, jun 2011. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1007/s10915-011-9504-4

[32] W. Rozema, H. J. Bae, P. Moin et R. Verstappen, “Minimum-dissipation models for large-eddy simulation,” *Physics of Fluids*, vol. 27, n°. 8, p. 085107, aug 2015. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.4928700

[33] F. X. Trias, A. Gorobets, M. H. Silvis, R. W. C. P. Verstappen et A. Oliva, “A new subgrid characteristic length for turbulence simulations on anisotropic grids,” *Physics of Fluids*, vol. 29, n°. 11, p. 115109, nov 2017. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/1.5012546

[34] M. V. Salvetti, B. Geurts, J. Meyers et P. Sagaut, édit., *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations II*. Springer Netherlands, 2011. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1007/978-94-007-0231-8

[35] J. Meyers, B. J. Geurts et P. Sagaut, édit., *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations*. Springer Netherlands, 2008. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8578-9

[36] S. E. Ahmed, S. Pawar, O. San, A. Rasheed, T. Iliescu et B. R. Noack, "On closures for reduced order models — a spectrum of first-principle to machine-learned avenues," 2021. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/2106.14954

[37] K. Duraisamy, "Perspectives on machine learning-augmented reynolds-averaged and large eddy simulation models of turbulence," 2020. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/2009.10675

[38] Y. Wang, Z. Yuan, C. Xie et J. Wang, "Artificial neural network-based spatial gradient models for large-eddy simulation of turbulence," *AIP Advances*, vol. 11, n°. 5, p. 055216, may 2021. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1063/5.0053590

[39] F. Sarghini, G. de Felice et S. Santini, "Neural networks based subgrid scale modeling in large eddy simulations," *Computers & Fluids*, vol. 32, n°. 1, p. 97–108, 2003. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793001000986

[40] J. Ling, A. Kurzawski et J. Templeton, "Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 807, p. 155–166, 2016.

[41] E. Yeung, S. Kundu et N. Hodas, "Learning deep neural network representations for koopman operators of nonlinear dynamical systems," 2017. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/1708.06850

[42] G. D. Portwood, B. T. Nadiga, J. A. Saenz et D. Livescu, "Interpreting neural network models of residual scalar flux," 2020. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/2004.07207

[43] R. Stoffer, C. M. van Leeuwen, D. Podareanu, V. Codreanu, M. A. Veerman, M. Janssens, O. K. Hartogensis et C. C. van Heerwaarden, "Development of a large-eddy simulation subgrid model based on artificial neural networks : a case study of turbulent channel flow," *Geoscientific Model Development*, vol. 14, n°. 6, p. 3769–3788, jun 2021. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.5194/gmd-14-3769-2021

[44] J. Sirignano, J. F. MacArt et J. B. Freund, "DPM : A deep learning PDE augmentation method with application to large-eddy simulation," *Journal of Computational Physics*, vol. 423, p. 109811, dec 2020. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109811

[45] K. Taira, M. S. Hemati, S. L. Brunton, Y. Sun, K. Duraisamy, S. Bagheri, S. T. M. Dawson et C.-A. Yeh, “Modal analysis of fluid flows : Applications and outlook,” *AIAA Journal*, vol. 58, n°. 3, p. 998–1022, mar 2020. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.2514/1.j058462

[46] B. R. Noack, M. Schlegel, B. Ahlborn, G. Mutschke, M. Morzyński, P. Comte et G. Tadmor, “A finite-time thermodynamics of unsteady fluid flows,” *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, vol. 33, n°. 2, jan 2008. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1515/jnetdy.2008.006

[47] Z. Wang, I. Akhtar, J. Borggaard et T. Iliescu, “Proper orthogonal decomposition closure models for turbulent flows : A numerical comparison,” 2011. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/1106.3585

[48] J. Osth, B. R. Noack, S. Krajnovic, D. Barros et J. Boree, “On the need for a nonlinear subscale turbulence term in pod models as exemplified for a high reynolds number flow over an ahmed body,” 2013. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/1310.6285

[49] M. M. Rezaei, M. Behzad, H. Haddadpour et H. Moradi, “Aeroelastic analysis of a rotating wind turbine blade using a geometrically exact formulation,” *Nonlinear Dynamics*, vol. 89, n°. 4, p. 2367–2392, jun 2017. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1007/s11071-017-3591-1

[50] V. Shinde, E. Longatte, F. Baj, Y. Hoarau et M. Braza, “Galerkin-free model reduction for fluid-structure interaction using proper orthogonal decomposition,” *Journal of Computational Physics*, vol. 396, p. 579–595, aug 2019. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999119304826

[51] C. Mou, E. Merzari, O. San et T. Iliescu, “A numerical investigation of the lengthscale in the mixing-length reduced order model of the turbulent channel flow,” 2021. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/2108.02254

[52] J. N. Kutz, X. Fu et S. L. Brunton, “Multi-resolution dynamic mode decomposition,” 2015. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/1506.00564

[53] T. C. Corke, “Digital image filtering in visualized boundary layers,” *AIAA Journal*, vol. 22, n°. 8, p. 1124–1131, aug 1984. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.2514/3.8747

[54] R. M. Everson et L. Sirovich, “Karhunen–loève procedure for gappy data,” *Journal of The Optical Society of America A-optics Image Science and Vision*, vol. 12, p. 1657–1664, aug 1995.

[55] C. Fevotte et J. Idier, “Algorithms for nonnegative matrix factorization with the beta-divergence,” 2010. [En ligne]. Disponible : https://arxiv.org/abs/1010.1763

[56] S. L. Brunton et J. N. Kutz, *Data-Driven Science and Engineering*. Cambridge University Press, jan 2019. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1017/9781108380690

[57] N. Gillis, *Nonnegative Matrix Factorization*. Society for Industrial and Applied Mathematics, jan 2020. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1137/1.9781611976410

[58] B. J. Pelliccia, "Three-dimensional imaging of turbulent flows : Optical tomography with proper orthogonal decomposition," *ProQuest Dissertations and Theses Global*, 1999.

[59] G. I. Taylor, "Statistical theory of turbulence," dans *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, vol. 151, n°. 873, 1935, p. 421–444. [En ligne]. Disponible : https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1935.0158

[60] ——, "Statistical theory of turbulence ii," dans *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, vol. 151, n°. 873, 1935, p. 444–454. [En ligne]. Disponible : https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1935.0159

[61] ——, "Statistical theory of turbulence iii distribution of dissipation of energy in a pipe over its cross-section," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, vol. 151, n°. 873, p. 455–464, 1935. [En ligne]. Disponible : https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1935.0160

[62] ——, "Statistical theory of turbulence iv diffusion in a turbulent air stream," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, vol. 151, n°. 873, p. 465–478, 1935. [En ligne]. Disponible : https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1935.0161

[63] S. D. Brian, "Dissipation of energy in the locally isotropic turbulence," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences*, vol. 434, n°. 1890, p. 15–17, jul 1991. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1098/rspa.1991.0076

[64] G. Berkooz, P. Holmes et J. L. Lumley, "The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows," *Annual review of fluid mechanics*, vol. 25, n°. 1, p. 539–575, 1993.

[65] A. Roshko, "Structure of turbulent shear flows : A new look," *AIAA Journal*, vol. 14, n°. 10, p. 1349–1357, 1976. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.2514/3.61477

[66] N. Aubry, P. Holmes, J. L. Lumley et E. Stone, "The dynamics of coherent structures in the wall region of a turbulent boundary layer," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 192, p. 115–173, 1988.

[67] M. Sokolov, A. Hussain, S. Kleis et Z. Husain, "A 'turbulent spot' in an axisymmetric free shear layer - 1." *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 98, n°. pt 1, p. 65 – 95, 1980.

[68] A. Hussain, "Role of coherent structures in turbulent shear flows." dans *Proceedings - Indian Academy of Sciences, (Series) : Engineering Sciences*, vol. 4, n°. pt 2, Bangalore, India, 1981, p. 129 – 175.

[69] L. Sirovich, "Turbulence and the dynamics of coherent structures. i. coherent structures," *Quarterly of Applied Mathematics*, vol. 45, p. 561–571, 10 1987.

[70] ——, “Turbulence and the dynamics of coherent structures part ii : Symmetries and transformations,” *Quarterly of Applied Mathematics*, vol. XLV, p. 573–82, 10 1987.

[71] ——, “Turbulence and the dynamics of coherent structures. iii. dynamics and scaling,” *Quarterly of Applied Mathematics*, vol. 45, p. 583–590, 10 1987.

[72] V. Shinde, “Proper orthogonal decomposition assisted subfilter-scale model of turbulence for large eddy simulation,” *Phys. Rev. Fluids*, vol. 5, p. 014605, Jan 2020. [En ligne]. Disponible : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevFluids.5.014605

[73] M. Breuer, G. D. Nayer, M. Münsch, T. Gallinger et R. Wüchner, “Fluid–structure interaction using a partitioned semi-implicit predictor–corrector coupling scheme for the application of large-eddy simulation,” *Journal of Fluids and Structures*, vol. 29, p. 107–130, feb 2012. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1016/j.jfluidstructs.2011.09.003

[74] R. Rivard, “Simulation des grandes échelles appliquée à la modélisation des écoulements turbulents à surface libre,” Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, 2012.

[75] B. Vreman, B. Geurts et H. Kuerten, “Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 339, p. 357 – 390, 1997, dynamic Clark model ;Dynamic eddy viscosity model ;Dynamic mixed model ;Gradient model ;Large eddy simulation (LES) ;Similarity model ;Smagorinsky model ;. [En ligne]. Disponible : http://dx.doi.org/10.1017/S0022112097005429

[76] E. Lamballais, V. Fortuné et S. Laizet, “Straightforward high-order numerical dissipation via the viscous term for direct and large eddy simulation,” *Journal of Computational Physics*, vol. 230, n°. 9, p. 3270–3275, 2011. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999111000659

[77] T. Dairay, E. Lamballais, S. Laizet et J. C. Vassilicos, “Numerical dissipation vs. subgrid-scale modelling for large eddy simulation,” *Journal of Computational Physics*, vol. 337, p. 252–274, 2017. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117301298

[78] R. Perrin et E. Lamballais, “Assessment of implicit les modelling for bypass transition of a boundary layer,” *Computers & Fluids*, vol. 251, p. 105728, 2023. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793022003218

[79] F. Brezzi, “On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers,” *Revue française d’automatique, informatique, recherche opérationnelle. Analyse numérique*, vol. 8, n°. 2, p. 129–151, 1974.

[80] J. Vétel, A. Garon, D. Pelletier et M.-I. Farinas, “Asymmetry and transition to turbulence in a smooth axisymmetric constriction,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 607, p. 351–386, jun 2008. [En ligne]. Disponible : https://doi.org/10.1017/s0022112008002188