UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

LE KRIGEAGE COMME MÉTHODE D'APPROXIMATION POUR L'OPTIMISATION

JOCELYN BOURGEOIS
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)
JUIN 2006

© Jocelyn Bourgeois.

Library and Archives Canada

Published Heritage Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et Archives Canada

Direction du Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 978-0-494-19285-6
Our file Notre référence
ISBN: 978-0-494-19285-6

NOTICE:
The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:
L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

LE KRIGEAGE COMME MÉTHODE D'APPROXIMATION POUR L'OPTIMISATION

présenté par: BOURGEOIS Jocelyn

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. REGGIO Marcelo, Ph.D., président

M. TRÉPANIER Jean-Yves, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. GUIBAULT François, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. LAFOREST Marc, Ph.D., membre

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de recherche, le professeur Jean-Yves Trépanier pour m'avoir donné l'opportunité de faire une maîtrise. Je souhaite également le remercier de m'avoir laissé une grande liberté dans mon travail et encouragé dans la direction que j'ai choisie pour cette étude.

Je tiens à remercier mon co-directeur, le professeur François Guibault pour m'avoir permis de travailler sur ce sujet fort intéressant. Je souhaite également le remercier pour avoir apporté une vue plus généraliste sur l'ensemble de mon travail.

Je souhaite remercier notre associé de recherche, Christophe Tribes, pour avoir apporté des perspectives différentes sur mon travail. Je souhaite aussi le remercier pour avoir partagé toute son expertise en matière informatique.

Par ailleurs, je veux aussi remercier mes collègues du laboratoire Luminos. Dans le désordre : Denis pour les nombreuses conversations éloquentes sur nos sujets de recherches, Thomas pour ses connaissances approfondies de la vérification de codes et de maillages, Jonathan pour ses opinions aimables et bien plaçées sur de nombreux sujets et aussi Alexandre pour ses cours d'Histoire du Québec.

Enfin, j'aimerais remercier tous mes amis cyclistes qui m'ont donné l'opportunité d'alterner entre les efforts cérébraux et les efforts musculaires. Je remercie aussi mon amie de cœur, Julie, avec qui ces derniers mois de rédaction ont été choyés par sa présence.

RÉSUMÉ

Ce mémoire traite des méthodologies d'approximations dans le contexte de l'optimisation de simulation numérique des fluides. Alors que les méthodes d'approximations existent depuis longtemps, leur apparition dans le domaine de la mécanique des fluides est récente. Ils approximent les boucles d'analyses dont le temps de calcul est non-négligeable. Toutefois, on remarque que les méthodes empruntées ne sont pas les plus efficaces. On propose alors une nouvelle méthode mieux adaptée aux problèmes de la simulation numérique.

On retrouve au cœur de cette nouvelle méthode le principe de la stabilité des approximations. Ce principe, introduit dans ce mémoire, détermine quand une approximation atteint un niveau de stabilité où elle représente la déviation moyenne toute en filtrant le bruit de la fonction qu'elle approxime.

En plus de concevoir une nouvelle méthode d'approximation, ce mémoire à pour objectif d'élaborer une méthodologie permettant de comparer les fonctions d'approximations les unes au autres de façon non-biaisée. Cette comparaison nous permettra de choisir la fonction la mieux adaptée aux problèmes.

La nouvelle méthode est jumelée avec le krigeage. Ceci nous permet, à l'aide de cas tests, de caractériser la performance du krigeage pour différents scénarios.

ABSTRACT

Approximation methodologies have existed for a long time. Originally used for experimental data, we are now seeing numerical simulations being approximated in order to accelerate the optimization process. These optimizations that use time consuming numerical simulation like those of Navier-Stokes equations benefit greatly from these approximations but, the present methods used were not conceived for such applications. We present in this work a new method of approximation better adapted for the process of optimization via numerical simulations.

The method is based on a principal of stability that we define in this thesis. This principal is an indicator of when an approximation filters the noise and is representative of the function being approximated.

Another objective of this thesis is the elaboration of a methodology that permits the comparison of the performance of approximation functions. This unbiased comparison enlightens the decision of which approximation function to use for the problem at hand. In this thesis, the kriging function is coupled with the new method to give an analysis of its performance. Test cases are used to see how the kriging function behaves for different scenarios.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vi

TABLE DES MATIÈRES vii

LISTE DES FIGURES x

DÉFINITIONS xviii

LISTE DES TABLEAUX xx

LISTE DES ANNEXES xxii

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1

1.1 Les turbines hydrauliques 1

1.2 L'évolution technologique 2

1.3 OPALE : un projet d'Hydro-Québec 3

1.4 Les fonctions et les méthodes d'approximations 4

1.5 Objectif de la recherche 5

1.6 Structure du mémoire 6

CHAPITRE 2 LES MÉTHODES D'APPROXIMATIONS 8

2.1 Problème observés lors de l'application des fonctions d'approximations 8

2.2 Les méthodes d'évaluation des performances de fonctions exactes . . . 15

2.3 En résumé 18

CHAPITRE 3 MÉTHODE DE CARACTÉRISATION GLOBALE 19
3.1 Une alternative à la comparaison : la caractérisation 19
3.2 Concepts de vérification et de validation 20
3.3 Critère de performance et convergence de l'approximation 21
3.4 Calcul de l'erreur 24
3.4.1 Définition 24
3.4.2 Vérification du code 25
3.4.3 Vérification pour chaque cas test 32
3.5 Une approche statistique à la caractérisation 35
3.5.1 Création de base de donnée 35
3.5.2 Présentation des résultats 41
3.6 Création de cas test 43
3.6.1 Création de cas tests analytiques 45
3.7 La méthode de caractérisation 55

CHAPITRE 4 LE KRIGEAGE 56
4.1 Le choix d'une fonction d'approximation 56
4.2 Les origines du krigeage 58
4.3 La théorie du krigeage 60
4.3.1 Rappels sur la méthode des moindres carrés 61
4.3.2 Le krigeage 64
4.4 La modélisation de l'incertitude épistémique 68
4.4.1 Rappels sur les procédés stochastiques et les variables aléatoires 68
4.4.2 Rappels sur la covariance et le covariogramme 69
4.4.3 La matrice R et le vecteur r 72
4.5 Commentaires sur le krigeage 73
4.5.1 Le choix de régression et corrélation 73
4.5.2 Les fonctions de corrélations 74

4.5.3 L'effet pépite 76
4.5.4 L'optimisation 77
4.5.5 Automatisé versus manuel 78
4.6 Variante du krigeage 78
4.7 Caractérisation du krigeage 80

CHAPITRE 5 RÉSULTATS 81
5.1 Stabilité 82
5.1.1 Définition de la mesure de stabilité 82
5.1.2 Détection de la stabilité 84
5.2 Méthode de caractérisation : résumé de la démarche 96
5.3 Caractérisation du krigeage 100
5.3.1 Présentation des résultats 100
5.3.2 Cas test à un degré de liberté 101
5.3.3 Cas tests avec deux degrés de libertés 104
5.3.4 Cas tests à trois degrés de libertés 113
5.4 En résumé 116

CHAPITRE 6 CONCLUSION ET TRAVAUX FUTURS 117
6.1 Précision et travaux futurs pour la méthode de caractérisation 118
6.2 Le krigeage 120
6.3 Conclusion 121

BIBLIOGRAPHIE 123

ANNEXES 127

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Exemple d'optimisation à l'aide d'approximation globale. L'objectif est de trouver le point optimal à l'aide de l'approximation. On voit que la méthode d'approximation aboutit sur le point optimal après quelques itérations. 9

Figure 2.2 Exemple où l'optimum global n'est pas trouvé. Dans un premier temps, l'approximation est initialisée et ensuite l'optimisation est lancée. 12

Figure 2.3 Exemple d'instabilité d'une approximation. Les trois approximations sont contruites avec des ensembles de points ayant la propriété $I_a \subset I_b \subset I_c$. Les courbes en lignes continues sont les fonction exactes et les courbes en lignes tirerées sont les approximations. 12

Figure 2.4 Démonstration d'un choix de points démontrant la faiblesse d'une méthode d'approximation. 17

Figure 3.1 Exemple de convergence d'une fonction d'approximation sur une fonction bruitée. (a) fonction exacte. (b) approximation avec seulement 6 points. (c) approximation ayant atteint une convergence à la représentation lissée de la fonction exacte. La convergence est atteinte avec 11 points. (d) approximation avec 42 points qui converge vers une représentation exacte. 23

Figure 3.2 Courbes analytiques simulant la courbe de la fonction exacte et de la fonction d'approximation. 26

Figure 3.3 Convergence du calcul de l'erreur pour la première solution manufacturée. 29

Figure 3.4 Convergence du calcul de l'erreur pour différents cas de la deuxième solution manufacturée. r est le décalage entre les courbes. $g(x)$ est la fonction d'approximation. $f(x)$ est la fonction exacte. 30

Figure 3.5 Convergence du calcul de l'erreur des cas tests. Δh est la distance entre les points de comparaison. 33

Figure 3.6 Convergence du calcul de l'erreur. Graphiques (a), (c) et (e) représentent la convergence de l'erreur pour trois différentes approximations du même cas test. Le même algorithme et la même discrétisation sont utilisés pour les calculs d'erreurs. Δh est la distance entre les points de comparaison. Les lignes pleines des graphiques (b), (d) et (f) sont les fonctions exactes et les lignes tiretées sont les approximations. 34

Figure 3.7 Exemple de sélection de points par hyper cube latin en deux dimensions. La figure de gauche montre le domaine divisé en 4^2 secteurs. 4 secteurs sont choisis de sorte qu'ils ne partagent pas une colonne ou une rangé avec un autre secteur. Des points sont choisis de façon aléatoire dans chaque secteur. La figure de droite est une autre façon de représenter la sélection des points. L'axe x_1 correspond aux positions des points selon la dimension x_1 de la figure de gauche. De même pour l'axe x_2. 37

Figure 3.8 Exemple d'appauvrissement en deux dimensions. (a) Un quadrillage d'un domaine où la soustraction des points est montrée par les cercles vides. (b) Graphiques montrant l'appauvrissement pour une dimension du problème (a). (c) Un exemple où il y a 80 points au départ et 1 point reste après 79 soustractions. 39

Figure 3.9 Moyennes et écarts-types associés à l'apauvrissement. $n = 80$, $h = 79$. Sur l'abscisse, $j = 1, \ldots, n$, la cardinalité des points dans l'échantillon. Sur l'ordonnée, $i = 1, \ldots, h$, la cardinalité des tirages. Les moyennes et écarts-types idéaux sont représentés par des lignes pleines et tiretées respectivement. 42

Figure 3.10 La convergence de l'appauvrissement. La valeur vérifiée est l'écart-type de la moyenne. 43

Figure 3.11 Exemple de représentation des résultats d'une fonction d'approximation pour un cas test. L'abscisse représente le nombre de points dans les échantillons. Les échantillons ont été répétés 35 fois pour connaître la performance minimum, moyenne, et l'écart-type. 44

Figure 3.12 Les points de contrôles sujets à la manipulation 47

Figure 3.13 Géométrie de l'aube pour différentes coordonnées du point trois. Figure 3.15 est la surface de réponse correspondante. 48

Figure 3.14 Géométrie de l'aube pour différentes coordonnées du point trois avec déplacement du point quatre. Figure 3.16 est la surface de réponse correspondante. 48

Figure 3.15 Surface de réponse obtenue en déplaçant le point trois et en gardant fixe tous les autres points aux positions optimales. Les points sur les surfaces représentent les échecs perçus pendant l'évaluation de la boucle d'analyse. (a) Une vue en coupe démontrant le bruit présent dans la surface de réponse. 49

Figure 3.16 Surface de réponse obtenue en déplaçant le point trois et en gardant fixe tous les autres points aux positions optimales sauf le point quatre. Les points sur les surfaces représentent les échecs percus pendant l'évaluation de la boucle d'analyse. (a) Une vue en coup démontrant le bruit présent dans la surface de réponse. . 50

Figure 3.17 Soustraction de l'erreur pour connaître sa forme. (a) Réponse de la boucle d'analyse en ligne pleine et régression polynomiale en ligne tiretée. (b) Valeur de l'erreur. 51
Figure 3.18 Comparaison de la surface de réponse obtenue de la boucle d'analyse et de l'approximation analytique. 53
Figure 3.19 Cas tests en trois dimensions. (a) cas test aximétrique. (b) cas test quasi-aximétrique. (c) cas test avec deux plans symétriques. 54
Figure 4.1 Points où les ensembles A, B et C sont échantillonnés. 70
Figure 4.2 Covariogramme pour les variables aléatoires A, B et C. 71
Figure 4.3 Covariogramme typique avec régression. 71
Figure 4.4 Comportement des fonctions de corrélations $\mathcal{R}(\theta, h_k)$ pour les valeurs $\theta = 0.5, \quad 1, \quad 2$ avec $0 \leq h \leq 2$. 75
Figure 4.5 Illustration de l'effet pépite. La première rangée montre le cas $A \sim B$ et la deuxième rangée montre le cas $A \ll B$. 77
Figure 5.1 Exemple de sous-ensembles de taille $m - 1 = 3$ pour un échantillon de taille m. L'index i correspond aux équations 5.1 et 5.2. 83
Figure 5.2 Résultats du calcul de l'erreur absolue et de la stabilité pour un cas test avec un dégrée de liberté. (a) L'erreur absolue pour un échantillonnage. (b) Le cas test bruité avec l'approximation en ligne tiretée. (c) La stabilité calculé pour l'échantillonnage de (a). Ici, le nombre de points dans l'échantillon est 80 et on varie k de 79 à 1. (d) La moyenne et l'écart-type de l'erreur absolue pour 35 échantillonnages. 85
Figure 5.3 Évolution de l'approximation au fur et à mesure que des points sont ajoutés. 88
Figure 5.4 Évolution de l'approximation au fur et à mesure que des points sont ajoutés. Continuation de la figure 5.3. 89

Figure 5.5 Résultats du calcul de l'erreur absolue et de la stabilité pour un cas test avec un degré de liberté et sans bruit. 90
Figure 5.6 Résultats du calcul de l'erreur absolue et de la stabilité pour un cas test à deux degrés de libertés. (a) erreur absolue. (b) stabilité. (c) fonction exacte. (d) approximation avec un échantillon de 15 points 91
Figure 5.7 Comparaison des résultats obtenus pour différentes limites du nombre de sous-ensembles par taille. (a) est le résultat moyen, l'écart-type supérieur et l'écart-type inférieur obtenu avec une limite de 50. (b) compare les moyennes pour des résultats obtenus avec les limites de 35, 50 et 70. (c) et (d) compare respectivement les écart-types inférieurs et supérieurs pour les mêmes limites. 95
Figure 5.8 Résultats de la suite de cas tests ayant un degré de liberté et sans bruit. (a) montre le nombre de points nécessaire pour la stabilité en fonction de la complexité. (b) montre l'erreur absolue associée aux approximations dites stables. 102
Figure 5.9 Apparition d'un nouveau plateau pour les cas tests sans bruit. . 103
Figure 5.10 Résultats des cas tests sans bruit et avec bruit. 105
Figure 5.11 Présentation des résultats pour les suites de cas test à 2 degrés de libertés. 107
Figure 5.12 Plateaux présents pour la suite de cas tests axisymétriques. Le graphique (d) ne présente pas de plateau pour des approximations avec moins de 120 points. 108
Figure 5.13 Erreur absolue en fonction du nombre de points dans l'approximation. Résultats de la suite avec cas tests axisymétriques. 109
Figure 5.14 Exemple de l'influence qu'à la corrélation sur toute l'approximation. La régression globale est effectuée sur un plan à valeur constante. 110

Figure 5.15 Comparaison des résultats des cas tests à un degré de liberté aux résultats cas tests à deux degrés de libertés. (A) suite des cas tests à un degré de liberté sans bruit. (B) La racine carrée des résultats de la suite de cas tests avec deux plans de symétries. . 112

Figure 5.16 Variation de l'erreur absolue en fonction de la taille des échantillons pour la suite de cas tests à trois degrés de libertés. 114

Figure 5.17 Comparaison de la stabilité et de l'erreur absolue de deux échantillonnages pour le cas tests de 0.5 Hz. 115

Figure I.1 Le domaine de calcul pour l'étude d'écoulement autour d'une aube avant directrice. 1,2 : condition de type périodique imposée à ces frontières. 3 : aube avant-directrice. 4 : entrée du domaine. 5 : section où la pression de sortie est calculée. 6 : angle d'entrée 130

Figure I.2 Turbulence au bord de fuite de l'aube modélisée avec RNGK-ϵ. 131

Figure I.3 Turbulence au bord de fuite de l'aube modélisée avec Sparlat-Allmaras. 132

Figure I.4 Paramétrisation du maillage de la couche limite. 133

Figure I.5 Convergence du maillage selon les valeurs de la grandeur caractéristique. Ces deux convergences sont les résultats des variations individuelles du nombre de maille dans la couche limite et dans le domaine. À noter: l'abscisse représente le nombre total de mailles dans le domaine de calcul. Si la couche limite semble avoir une plus grande influence sur toute le domaine c'est que les mailles non structurées voisines subissent aussi un raffinement afin que le maillage soit de bonne qualité. 136

Figure I.6 La convergence de la grandeur caractéristique en fonction des résidus. 137

Figure I.7 Convergence du maillage selon les valeurs de la fonction coût. Cette convergence est calculé selon la méthodologie de Roache (1998) 137

Figure II.1 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite sans bruit. 144

Figure II.2 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite avec le bruit d'une ampliture de 0.03. 145

Figure II.3 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite avec le bruit d'une amplitude de 0.015. 146

Figure II.4 Exemples de différents cas tests et d'une approximation pour la suite axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.001476 avec 28 points. (c) Une erreur absolue de 0.006235 avec 52 points. (e) Une erreur absolue de 0.000163 avec 73 points. 147

Figure II.5 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.0491 avec 40 points. (c) Une erreur absolue de 0.0530 avec 77 points. (e) Une erreur absolue de 0.070 avec 94 points. À noter, l'échantillon utilisé pour l'approximation (e) est le seul qui a atteint la convergence pour ce cas test. 148

Figure II.6 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.0022 avec 40 points. (c) Une erreur absolue de 0.00032 avec 72 points. (e) Une erreur absolue de 0.034 avec 39 points. . . . 149

Figure II.7 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.095 avec 45 points. 150

Figure II.8 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.022 avec 18 points. (c) Une erreur absolue de 0.026 avec 20 points. (e) Une erreur absolue de 0.070 avec 22 points. 151

Figure II.9 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.074 avec 22 points. (c) Une erreur absolue de 0.085 avec 33 points. (e) Une erreur absolue de 0.065 avec 47 points. 152

Figure II.10 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.022 avec 18 points. (c) Une erreur absolue de 0.092 avec 57 points. 153

DÉFINITIONS

boucle d'analyse : Une série de programmes permettant de connaître le comportement ou les caractéristiques d'une modélisation quelconque. Cette série de programmes prend en entrée des variables de design et, donne en sortie des valeurs caractéristiques de la modélisation. Une boucle d'analyse serait composée, par exemple, d'un logiciel pour générer le domaine de travail, d'un mailleur pour discrétiser ce domaine de travail, d'un résoluteur pour calculer un comportement physique quelconque et d'un poste processeur pour remanier les résultats du résoluteur et extraire un paramètre de performance pour un design.

fonction exacte : Une fonction quelconque que l'on appelle exacte car elle représente exactement ce que l'approximation doit approximer. La fonction exacte peut être en soit une approximation de la réalité. À titre d'exemple, la fonction exacte peut être une boucle d'analyse ou les résultats de tests expérimentaux.

fonction d'approximation : Une fonction dont le but est d'approximer le comportement ou la forme que prend une autre fonction. En général, ces fonctions n'ont aucune signification physique en soi. Elles permettent de lier mathématiquement des points dans un espace de travail. Il y a toute de même exception à la règle. Par exemple, une approximation peut prendre la forme d'une version simplifiée d'une boucle d'analyse et ainsi, l'approximation retient une signification physique.

cas tests : Fonction exacte utilisée pour tester les fonctions d'approximations.

méthode d'approximation : Une méthodologie qui vise à exploiter les fonctions d'approximations.

dimension : Le nombre de variables dépendantes et indépendantes associées à une fonction.

nombre de degré : Le nombre de variables indépendantes associées à une fonction.

complexité d'une fonction : La complexité est le nombre de points critiques qu'a une fonction. Un point critique peut être un optimum, un point d'inflexion, un point de selle,

etc. La complexité ne tient pas compte du bruit. Elle ne caractérise que la tendance moyenne de la fonction.

exactitude : L'exactitude définit de combien la réponse d'une fonction proche est à la vraie valeur. Celle-ci est souvent quantifiée à l'aide de normes.

précision : La précision définit comment répétable est la réponse d'une fonction. La précision est souvent associée à l'écart-type. Plus celle-ci est petite, plus la précision est bonne.

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1 matrice des coordonnées (x, y) normalisées pour le point 3 . . . 47

Tableau 3.2 Valeurs recueillies de l'erreur pour deux courbes de la figure 3.15 (a). A est l'amplitude. fréq. est la fréquence. absolu est abrégé par abs. et relative est abrégé par rel. 52

Tableau 4.1 Tableau des équations les plus utilisées pour la corrélation. Le paramètre θ est le coefficient de régression. 71

Tableau 5.1 Sous ensembles possibles pour l'échantillon de points 1 à 3. . . 93

Tableau 5.2 Sous ensembles possibles pour les échantillons de points 1 à 3, 1 à 4 et 1 à 5. Les sous-ensembles soulignés sont ceux choisis pour le calcul de la stabilité moyenne. 94

Tableau 5.3 Nombre de sous-ensembles possible pour chaque taille quand $m = 8$. $k = m - 1, \ldots, 1$ 95

Tableau I.1 Résultats obtenu pour les calculs de la vérification. 138

Tableau I.2 Variation de la couche limite. Tableau d'information des maillages. 140

Tableau I.3 Variation de la couche limite. Résultats de l'étude de convergence des maillages. 140

Tableau I.4 Variation du nombre de mailles sur les arrêtes du domaine. Tableau d'information des maillages. 141

Tableau I.5 Variation du nombre de mailles sur les arrêtes du domaine. Résultats de l'étude de convergence des maillages. 141

Tableau I.6 Tableau de l'influence de la convergence. Le maillage cinq a été utilisé pour cette étude. 141

Tableau I.7 Variation du nombre de mailles dans le domaine pour une étude de GCI. Le facteur de multiplication est 1.15. À noter, la géométrie utilisée dans ce cas a la forme dite optimisée. 142

Tableau I.8 Variation du nombre de mailles dans le domaine pour une étude de GCI. Résultats de la convergence des maillages. 142

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I VÉRIFICATION ET VALIDATION DE LA BOUCLE D'ANALYSE DE L'AUBE AVANT-DIRECTRICE 127

ANNEXE II EXEMPLES DE CAS TESTSET D'APPROXIMATIONS . . 143

ANNEXE III LE KRIGEAGE 154

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Les turbines hydrauliques

Les turbines hydrauliques qui alimentent nos villes en électricité sont les grandes descendantes des roues à eau qui ont vues leurs premiers jours plusieurs centaines d'années passées. Les premières turbines couplées à des génératrices ont vu le jour au 19ième siècle. On retrouve maintenant trois principaux types de génératrices exploitées pour produire de l'électricité. Il y a les turbines de type Francis, les turbines de type Kaplan et les turbines de type Pelton. Chacune à été conçue pour exploiter un différent type de réservoir. Les turbines Pelton sont utilisées pour exploiter des réservoirs avec une chute d'eau allant de 200 à 2000 mètres alors que les turbines Francis sont utilisées pour exploiter des réservoirs avec une chute d'eau d'environ 10 à 700 mètres et les turbines Kaplan, pour leur part, sont généralement utilisées pour des chutes d'eau de moins de 30 mètres. De ces trois types de turbines, on retient un objectif commun : convertir le mieux possible l'énergie potentielle de l'eau en énergie mécanique pour les génératrices. Le rendement idéal d'une turbine pour convertir cette énergie est 100% mais comme il est impossible d'avoir un rendement parfait, il y a toujours place à l'amélioration.

L'optimisation joue un rôle important dans la quête d'un meilleur rendement. Les premières optimisations des turbines furent accomplies à l'aide de tests expérimentaux et d'équations empiriques. Pratiques et bien connus, ces outils ne permettaient tout de même pas de compléter les optimisations selon le souhait des ingénieurs, faute de temps d'exécution et de précision.

La venue des méthodes numériques a permis aux ingénieurs de mieux explorer les designs et ce en prenant moins de temps que les méthodes traditionnelles. Alors que la technologie informatique ne cessa de progresser, les ingénieurs se permettaient des études numériques de plus en plus complexes et longues. Cette course est tantôt menée par le développement informatique, tantôt menée par les innovations au niveau des modèles. Mais le désir pour une connaissance plus approfondie du comportement d'une turbine et de son rendement en fonction de toutes ses variables nous assure que l'on atteindra toujours les limites de la technologie informatique. On se retrouve donc avec une optimisation de quelques variables ou sur un domaine limité car si les ingénieurs augmentent trop la complexité, les temps de calculs seraient inacceptables.

Pour accélérer le processus d'optimisation, il est pratique d'approximer le résultats d'analyses numériques par des équations analytiques. Il s'agit alors d'un retour aux méthodes d'approximations car les premières utilisations de celles-ci étaient sous forme d'équations empiriques.

1.2 L'évolution technologique

L'évolution technologique qu'a vécu la turbine se compare à celle de tous grands projets de notre époque. À titre d'exemple, les avions, les trains, les bateaux et les grandes structures civiles sont tous conçus à l'aide de calculs et de modélisations numériques. L'avion qui, à ses débuts, était conçu par des moyens plutôt artisanaux, est maintenant le sujet d'optimisations multidisciplinaires. Une optimisation accomplie à la fois sur la structure, l'aérodynamique, les coûts d'opérations, etc. Pour accélérer le processus d'optimisation d'un problème aussi complexe, les ingénieurs envisagent de plus en plus l'utilisation de fonctions d'approximations.

L'optimisation peut également servir à d'autre fin que la conception. D'ailleurs, elle

peut servir à optimiser des pièces existantes dans le cas où leur envergure favorise la reconstruction au lieu du remplacement. Dans cet optique, un projet visant à modifier les turbines de centrales hydro-électriques du Québec a été proposé.

1.3 OPALE : un projet d'Hydro-Québec

Le projet de recherche OPALE porte sur l'Optimisation des PALES de turbines hydrauliques. Ce projet concrétise une collaboration entre l'École Polytechnique de Montréal et l'IREQ (Institut de Recherche d'Hydro Québec). Le projet vise à faire avancer trois aspects du processus d'optimisation, soit la modélisation géométrique par surface de subdivisions des turbines, l'échange de données numériques et les méthodes d'optimisations. Ce projet a été créé précisément pour améliorer la performance des turbines existantes. Cette amélioration de performance est le sujet d'un projet plus vaste dans lequel s'inscrit le projet OPALE, soit le projet MATH. Celui-ci est réalisée en trois étapes. La première consiste à mesurer la géométrie des composantes de la turbine (distributeur, roue, aspirateur) et à les représenter par un modèle numérique. La deuxième partie a pour but d'optimiser la modélisation de la géométrie pour améliorer la performance théorique de la turbine. La troisième partie consiste à reconstruire la turbine selon les dimensions du modèle optimisé. Le projet OPALE vise à améliorer certains aspects de la deuxième étape du projet MATH.

L'optimisation est accomplie avec une boucle d'analyse. On retrouve dans cette boucle, un modèle représentant la géométrie de la turbine, un mailleur discrétisant le domaine de l'écoulement de l'eau (soit l'espace qui se trouvent entre les pales et les parois de la turbine), un résoluteur pouvant calculer les caractéristiques de l'écoulement de l'eau et un post-processeur chargé d'interpréter les caractéristiques de l'écoulement pour calculer l'efficacité de la turbine. On a donc pour, une itération dans la boucle d'analyse, la suite des évènements ci-après.

Cette boucle d'analyse, couplée à un optimiseur, permet d'améliorer de façon automatique les caractéristiques géométriques. Toutefois, les calculs effectués dans la boucle d'analyse (tel que la résolution des équations de Navier-Stokes) sont très lourds et nécessitent un temps de calcul énorme. Cette contrainte limite la précision atteignable par calcul. En effet, afin d'avoir des résultats dans un délais raisonnable, on impose soit une limite sur le nombre d'itérations de l'optimisation, soit une limite sur la précision de la modélisation. Or, si on est en quête d'une réponse exacte (au sens d'une modélisation représentant la réalité avec grande précision et offrant la solution la plus optimale), on ne peut se permettre de trop limiter la modélisation et l'optimisation. On peut, cependant, approximer la boucle d'analyse pour accélérer l'optimisation. Le temps d'optimisation est dévouée en grande partie à la recherche de la direction du point optimal. Seul les quelques dernières itérations de l'optimisation servent à connaître la valeur exacte du point optimal. Une approximation peut donc être utilisée pour accélérer la localisation du point optimal.

1.4 Les fonctions et les méthodes d'approximations

Ce mémoire fera souvent référence à deux types de fonctions, soit les fonctions exactes et les fonctions d'approximations. Le premier regroupe toutes les fonctions que l'on souhaite approximer tel que les boucles d'analyses et les résultats de tests expérimentaux. Ces fonctions ne sont pas limitées au domaine de la mécanique. Elles peuvent aussi provenir du génie électrique ou même du domaine de la finance. Il ne s'agit donc pas de fonctions qui sont exactes au sens strict du terme mais plutôt des fonctions qui représentent les valeurs exactes que l'on souhaite approximer. Les fonctions d'approximations sont des fonctions qui, contrairement aux fonctions exactes, n'ont aucune signification physique. Elles ne servent qu'à associer des points dans un espace de travail par une relation mathématique.

Il existe plusieurs types de fonctions d'approximations. Il y a, par exemple, les fonctions classiques telles que les approximations paramétriques, les fonctions plus adaptatives comme les fonctions de base radiales où l'on retrouve le krigeage, l'approximation bayesienne et les réseaux neuroneaux. Il y a aussi les fonctions dérivées de la simulation numérique comme les modèles à fidélité variable.

Il existe aussi plusieurs façons d'utiliser ces fonctions d'approximations. Il s'agit alors de méthode d'approximation. On trouve dans la littérature deux approches aux méthodes pour exploiter les fonctions. On peut soit initialiser l'approximation et ensuite la raffiner au fur et à mesure que l'on optimise ou on peut utiliser une approximation locale qui se déplace dans le domaine pour suivre la direction que prend l'optimiseur.

1.5 Objectif de la recherche

L'objectif de ce mémoire est de développer une méthode d'approximation permettant de caractériser la performance d'une fonction d'approximation pour son utilisation dans un contexte industriel. On souhaite ensuite utiliser cette méthode pour construire une approximation globale localisant les optimums de la fonction exacte. Le contexte industriel qui nous intéresse est l'optimisation accomplie à l'aide de simulations numériques où la fonction exacte est la fonction coût. Un autre objectif qui se combine bien aux deux mentionnés ci-haut est l'idée de faciliter la tâche de l'optimiseur en lui donnant une approximation lisse, soit une approximation qui filtre le bruit numérique présent dans la fonction exacte.

Le premier objectif, soit de caractériser la performance, sera accompli selon des critères qui sont la dimensionalité, le bruit et le nombre de point critiques. La caractérisation d'une fonction d'approximation sera accomplie en comptant le nombre d'évaluation de la fonction exacte nécessaire pour avoir une approximation représentative. Pour ce faire,

on essaie de répondre à deux questions : comment pouvons-nous savoir si et quand une approximation est représentative de la fonction exacte. On répond à ces questions en introduisant la notion de stabilité d'une approximation dans le chapitre 5.

Alors que l'on souhaite développer une méthode qui sera éventuellement généralisée pour toutes fonctions d'approximations, ce mémoire vise à développer la méthode avec le krigeage, une fonction d'approximation souvent utilisée pour l'approximation de simulation numérique des fluides.

1.6 Structure du mémoire

En plus de ce premier chapitre d'introduction, ce mémoire comporte cinq autre chapitres.

Le second chapitre discute des méthodes d'approximations. Une analyse approfondie des méthodes existantes nous amènera à conclure qu'il est préférable de développer une nouvelle méthode d'approximation.

Le troisième chapitre élabore en détail le développement de cette nouvelle méthode. Ce développement explique le choix du type d'erreur que l'on souhaite utiliser. Elle décrit aussi en grand détail la méthode d'échantillonnage utilisée et les cas tests développés pour cette étude.

Le chapitre quatre est dédié à la sélection et à la description d'une fonction d'approximation qui sera soumise à la méthode de caractéristation. On retrouve au début du chapitre une section discutant des fonctions d'approximations existantes et, par la suite, une explication approfondie du krigeage et de ses variantes.

Le chapitre cinq est en deux partie. La première discute de résultats préliminaires qui nous ont permis de développer un critère pour connaître la représentativité de l'approxi-

mation par rapport à la fonction exacte. La deuxième partie discute de la caractérisation du krigeage et de l'efficacité du critère développé dans la première partie.

Le chapitre six conclut sur cette nouvelle méthode d'approximation et discute des travaux ultérieurs envisageables. Il y aussi discussion des travaux ultérieurs envisageables pour le krigeage.

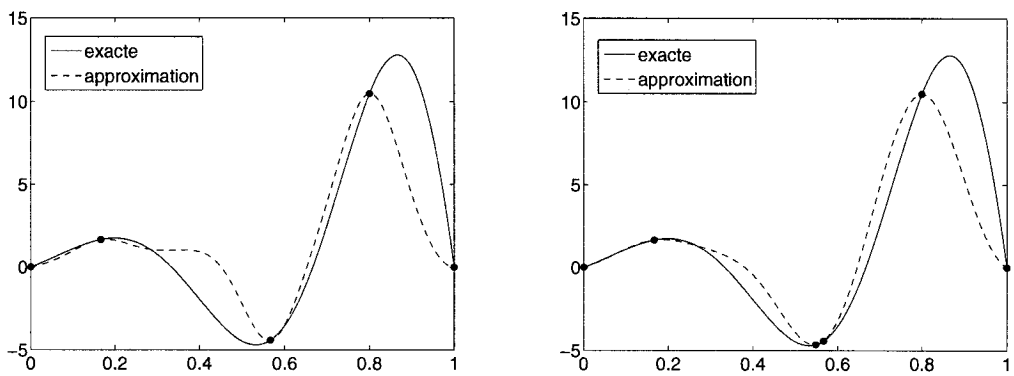
CHAPITRE 2

APPLICATION ET COMPARAISON DES FONCTIONS D'APPROXIMATIONS

2.1 Problème observés lors de l'application des fonctions d'approximations

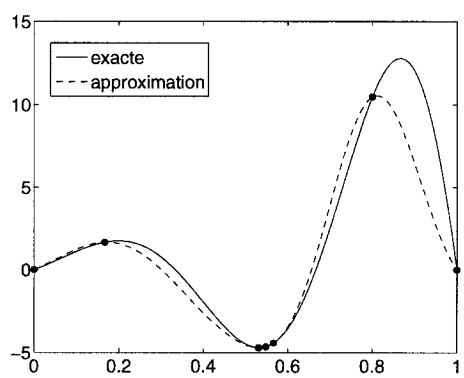
Les méthodes d'approximations s'avèrent très utiles dans le domaine de l'optimisation par le fait qu'elles permettent d'accélérer la recherche de l'optimum en réduisant le nombre d'évaluations de fonctions exactes. Par exemple, les fonctions pour la fonction coût et les contraintes sont remplacées par des fonctions d'approximations beaucoup plus rapides à évaluer. On discerne dans la littérature deux approches pour intégrer les approximations à l'optimisation. La première propose d'utiliser une approximation construite au préalable à l'optimisation et enrichie au fur et à mesure que l'on optimise. La deuxième approche est l'approximation locale ; qui ne regarde que sur une portion du domaine de travail. De ces deux approches, on remarque qu'il y a un trait commun ; ils ont une approche comparative. Ils comparent le résultat obtenu de l'approximation à celui obtenu de la fonction exacte pour en déduire la précision de l'approximation.

La première approche va, en principe, approximer tout le domaine de travail. Elle accomplit ceci en suivant la séquence d'évènements décrites ci-après. On doit, dans un premier temps, initialiser l'approximation. Pour ce faire, on utilise la fonction exacte pour calculer quelques points dans le domaine de travail. Plusieurs méthodologies ont été proposées pour choisir ces points initiaux. Quelques exemples de ces méthodes de sélections sont l'hyper cube latin McKay *et al.* (1979), le *Minimum Point Design* Khuri (1987), le *D-Optimal* Khuri (1987), etc. Une fois initialisée, l'optimisation est lancée sur l'approximation. Une vérification de la précision de l'approximation est faite périodiquement. En général cette vérification est faite quand l'optimum de l'approximation



(a) initialisation

(b) première vérifi cation



(c) deuxième vérifi cation

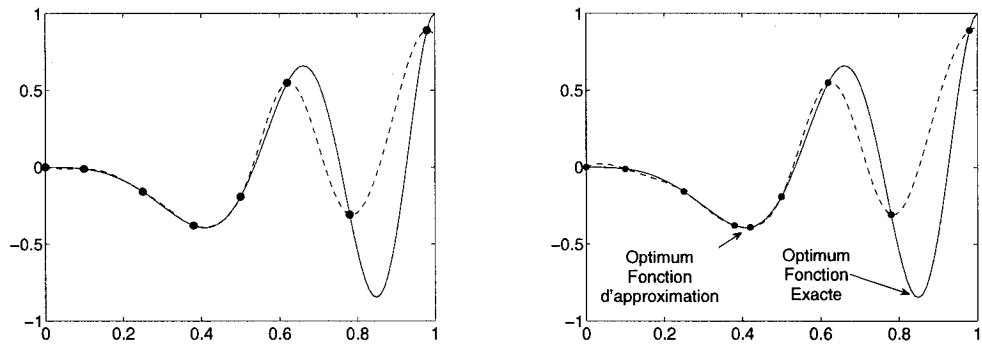
Figure 2.1 Exemple d'optimisation à l'aide d'approximation globale. L'objectif est de trouver le point optimal à l'aide de l'approximation. On voit que la méthode d'approximation aboutit sur le point optimal après quelques itérations.

est trouvé. On compare ainsi cette valeur avec celle de la fonction exacte obtenue pour le même point. La figure 2.1 schématise cette méthodologie. Une revue de la littérature montre que cette méthode est souvent utilisée pour implémenter les fonctions d'approximations dans le processus d'optimisation. À titre d'exemple, Chung et Alonso (2000), Chung et Alonso (January 14–17, 2002) et Koch *et al.* (2002) illustrent comment les méthodes de krigeage et de co-krigeage peuvent être utilisées pendant l'optimisation.

La deuxième approche, fréquemment utilisée dans le contexte d'optimisation, permet d'approximer seulement la région d'intérêt. La région d'intérêt dans ce cas est celle entourant l'optimum que l'on recherche. La première étape de cette approche est de localiser la région d'intérêt dans le domaine de travail et de définir sa taille. On va ensuite construire l'approximation dans cette région à l'aide des mêmes méthodes de sélection que celles énumérées ci-dessus. Une fois construite, on trouve l'optimum de l'approximation et on compare cette valeur avec celle de la fonction exacte obtenue pour le même point. Si les valeurs ne sont pas les mêmes, la région est déplacée, l'approximation est reconstruite, l'optimum de cette nouvelle approximation est trouvé et ainsi de suite. Il est aussi possible de changer la taille de la région en fonction de la confiance que l'on a en l'approximation. Cette confiance découle généralement d'une preuve démontrant que l'approximation tend vers une représentation exacte du voisinage de l'optimum. On retrouve plusieurs exemples de cette méthode dans la littérature. Notamment, Alexandrov *et al.* (2000) qui mettent en œuvre cette méthode sous la dénomination de l'*Approximation Management Framework* (AMF), Giunta (2002) qui utilise la méthodologie de surface de réponse sous la forme de *Surrogate Base Optimization*, Jeon *et al.* (January 14–17, 2002) qui mettent en évidence l'utilité de différentes fonctions d'approximations avec une méthodologie de surface de réponse dont les origines proviennent de la statistique, et Eldred *et al.* (2004) qui démontrent comment des corrections de second ordre peuvent être apportées à une approximation du type basse fidélité.

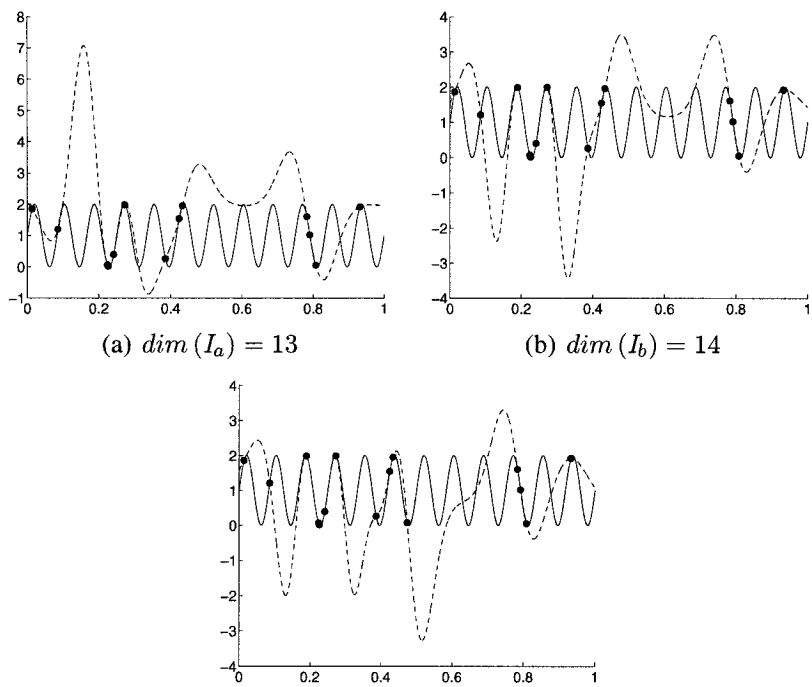
On remarque dans ces deux approches que la recherche de l'optimum dicte comment l'approximation sera construite. Ceci est tout à fait naturel quand l'intérêt est fixé sur la précision de cet optimum. Et de cette recherche de l'optimum découle le critère d'arrêt le plus utilisé pour les deux approches décrites ci-dessus : l'erreur entre les valeurs de la fonction exacte et la fonction d'approximation au point optimum de cette dernière. Alors que ce critère assure la cohérence entre les optimums prédits et les optimums réels, il n'est pas sans défauts. Jones (2001) démontre que, dans le contexte d'une recherche de l'optimum global, ce critère ne peut l'assurer. À titre d'exemple, la figure 2.2 illustre comment un optimum global de la fonction d'approximation est en réalité un optimum local de la fonction exacte. Un tel scénario se réalise lorsque, par exemple, le critère d'arrêt choisi est peu rigoureux et l'échantillonnage est mal conditionné. Un autre exemple où ce type de critère peut faillir est quand l'approximation est instable. La figure 2.3 illustre un tel cas où le nombre de pics et de vallées change à chaque ajout de point. Il faut noter que la fonction exacte a été choisie de façon à exagérer l'instabilité ; il reste que ce scénario peut se produire soit à une petite échelle dans le cas du bruit, soit à une fréquence plus basse pour une fonction comprenant plusieurs minimum locaux relativement proches.

Dans toutes les applications de fonctions d'approximation énumérées ci-dessus, on remarque que l'utilisation du minimum de points dans l'échantillonnage pour trouver l'optimum est primordiale. La première approche assure l'utilisation du plus petit échantillon en raffinant l'approximation pendant l'optimisation, apportant ainsi plus de précision seulement dans les régions d'intérêt. La deuxième approche explore le domaine de travail morceau par morceau, permettant ainsi de limiter le nombre d'évaluations de la fonction exacte nécessaire pour créer l'approximation. Seule une région du domaine de travail est explorée en espérant que le l'optimum global s'y trouve. Quelque soit l'approche utilisée pour approximer le domaine de travail, si elle est développée dans l'optique de minimiser la taille de l'échantillon, on ne sera jamais certain de la



(a) initialisation (b) optimisation

Figure 2.2 Exemple où l'optimum global n'est pas trouvé. Dans un premier temps, l'approximation est initialisée et ensuite l'optimisation est lancée.



(a) $dim\,(I_a) = 13$ (b) $dim\,(I_b) = 14$

(c) $dim\,(I_c) = 15$

Figure 2.3 Exemple d'instabilité d'une approximation. Les trois approximations sont contruites avec des ensembles de points ayant la propriété $I_a \subset I_b \subset I_c$. Les courbes en lignes continues sont les fonction exactes et les courbes en lignes tirerées sont les approximations.

qualité de la représentation. Cette incertitude de l'approximation se révèle importante dans plusieurs cas particuliers. Le cas le plus classique est l'incertitude sur la nature de l'optimum obtenu, à savoir s'il est local ou global. Une deuxième possibilité est que l'optimum trouvé soit sous l'influence de bruit. Une troisième possibilité est le cas de mauvaises approximations telles qu'illustrées sur les figures 2.2 et 2.3.

Il y a aussi des conséquences plus globales quand l'approximation est imbriquée dans la démarche de l'optimisation. En général, on approxime les fonctions coûts. La forme que prennent ces fonctions sont variées et multiples mais, typiquement elles sont une combinaison de variables d'état dont les valeurs proviennent de fonctions exactes comme, par exemple, des boucles d'analyses. Cette combinaison de variables d'état fait que chaque fonction coût est propre à une formulation du problème d'optimisation. Un inconvénient se présente quand on change cette formulation ; l'approximation générée auparavant n'est plus représentative. Il est alors nécessaire d'en générer une nouvelle. Toutefois, cet inconvénient est facilement contourné en approximant chaque variable d'état de la fonction coût au lieu d'approximer la fonction coût elle-même.

Malgré cela, si l'on change la formulation du problème d'optimisation, l'optimum sera déplacé et la précision de l'approximation sera décentrée par rapport au nouvel optimum. Il est donc nécessaire de reconstruire l'approximation ou alors de compléter l'échantillonnage avec de nouveaux points. Or la reconstruction de l'approximation nécessiterait un nombre non négligeable d'évaluations de la fonction exacte et, l'ajout de points à l'échantillonnage peut faire en sorte que la fonction d'approximation soit mal conditionnée.

Toujours dans le contexte de l'optimisation, les études postérieures à l'optimisation, telle que l'étude de la sensibilité de la solution pour différents paramètres, nécessitent souvent un temps long d'exécution et ne peut donner qu'une caractérisation locale. Une façon d'accélérer les études postérieures et, dans le cas de la première approche (apporter une

vue plus globale) serait de substituer les boucles d'analyses par des approximations. Or la précision des approximations construites selon les deux approches décrites ci-haut n'est pas assurée ni localement, ni globalement.

Finalement, un dernier mot sur la construction de l'approximation durant l'optimisation. Le processus d'optimisation se veut automatisé mais il arrive que l'ingénieur intervienne à l'occasion pour voir comment évolue l'optimisation. Si l'ingénieur souhaite, pour une raison quelconque, explorer le domaine de travail, il devra attendre que l'approximation soit remise à jour. Cette attente peut être longue étant donnée que la mise à jour peut nécessiter des réévaluations de la fonction exacte.

Pour éviter les problèmes énumérés ci-dessus, la précision de l'approximation doit être connue pour tout le domaine de travail du problème d'optimisation. On entend par précision d'approximation le degré avec lequel l'approximation représente la tendance moyenne et le bruit. La tendance moyenne est l'allure que prend la fonction dans le domaine de travail quand on néglige le bruit. Cette allure peut être polynomiale, exponentielle, sinusoïdale ou discontinue. Vouloir connaître la précision de l'approximation sur tout le domaine sous-entend qu'une mesure d'une erreur quelconque doit être prise de façon global sur tout le domaine. Cette idée, on le remarque, diverge du principe gouverneur des deux approches décrites au début de ce chapitre. Alors que celles-ci sont axées sur le principe de l'économie, soit minimiser le nombre d'évaluations de la fonction exacte, cette nouvelle approche est plutôt axée sur le principe de la certitude ; connaître de façon certaine l'allure que prend la fonction exacte sur tout le domaine. Avant d'aborder le sujet de la comparaison des méthodes d'approximations, nous allons donner les grandes lignes décrivant comment cette nouvelle approche est formulée.

On propose, dans un premier temps, de découpler l'optimisation de l'approximation et de concentrer le travail sur la précision globale de l'approximation. Ainsi l'échantillonnage n'est pas biaisé par la recherche de l'optimum et, la mesure de la précision est représen-

tative de tout le domaine. Pour connaître cette précision, une étude de la variation de l'erreur en fonction de la taille des échantillons ainsi que des entités dans l'échantillon est nécessaire. La précision que l'on souhaiterait atteindre est fonction des caractéristiques que l'on veut représenter. Par exemple, les tendances moyennes et le bruit. Notamment, une fonction d'approximation peut être construite de façon à bien représenter les tendances moyennes toute filtrant le bruit.

Connaître la précision d'une approximation est assurément plus coûteux que viser directement un optimum mais, une telle connaissance apporte une grande confiance envers les résultats finaux de l'approximation, et de la localisation de l'optimum.

Une fois la phase d'approximation complétée, la phase optimisation pourra alors débuter. Les optimiseurs utilisant une boucle d'analyse quelconque, par exemple, DONLP2 Spellucci (1999) peuvent être utilisés sur l'approximation. Un autre option consiste à utiliser l'optimiseur spécialisé pour certaines fonctions analytiques, étant donné que les approximations sont à la base des fonctions analytiques. On retrouve de tels optimiseurs dans le domaine de l'économie et une description de ceux-ci est donnée par Zlobec (2001).

2.2 Les méthodes d'évaluation des performances de fonctions exactes

L'approche utilisée pour comparer les fonctions d'approximations aux fonctions exactes est généralement de même nature que l'approche utilisée pendant l'application des fonctions d'approximations. Si, par exemple, le but de l'application est d'approximer avec le minimum d'évaluations possible la fonction exacte, alors la performance de la fonction d'approximation sera évaluée dans cette optique. Ceci veut dire que la meilleure fonction d'approximation sera celle capable d'atteindre le critère d'arrêt avec l'échantillonnage le plus petit. Ce critère d'arrêt doit obligatoirement être le même que celui utilisé pendant l'application, notamment dans ce cas, il s'agit de l'erreur entre la fonction exacte et

l'approximation au point optimum de ce dernier.

Le but de cette comparaison entre fonctions d'approximations et fonctions exactes est d'avoir un point de référence par lequel il est possible de comparer la performance des fonctions d'approximations les unes aux autres. Or cette information de la performance, aussi pertinente soit-elle, ne peut être utilisée car on ne connaît pas à priori le type de fonction exacte qui sera approximée. Il est alors impossible de savoir si la taille de l'échantillon est juste et par conséquent, on ne peut savoir si l'approximation n'est pas sujette à l'un des scénarios décrits dans la section précédente.

Si l'on fait abstraction de cette problématique de comparaison, on discerne deux façons de comparer les fonctions d'approximation. La première est une application directe de la méthode d'approximation et la deuxième utilise un échantillonnage déterminé auparavant pour tester un aspect spécifique de la fonction d'approximation.

Dans le cas d'une application directe de la méthode d'approximation, on peut répéter l'approximation pour créer une base de comparaison. La répétition peut être faite en utilisant différents échantillonnages pour un même cas test ou peut être faite avec plusieurs cas tests. L'utilisation du même cas test peut nous renseigner sur la robustesse d'une méthode pour le type de fonction exacte que représente le cas test. L'utilisation de deux ou plusieurs cas tests permet de connaître la polyvalence des méthodes. Quoique la majorité des comparaisons entre l'approximation et la fonction exacte ont été faites au point optimum, certains auteurs font une comparaison à l'aide de plusieurs points (Eldred *et al.* (2004), Alexandrov *et al.* (2000)). Or dans le cas où des boucles d'analyses complexes sont utilisées comme cas test, ce type de comparaison est limité par le temps non-négligeable d'une itération. Ceci limite alors la taille de l'échantillon ainsi que le nombre de points que l'on utilise pour la comparaison.

La deuxième façon de comparer les fonctions d'approximations utilise des équations

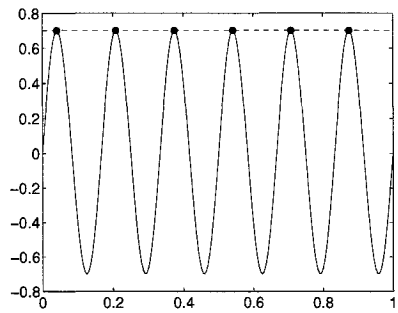


Figure 2.4 Démonstration d'un choix de points démontrant la faiblesse d'une méthode d'approximation.

analytiques comme cas tests. L'utilité de ces fonctions analytiques est qu'il est possible d'exercer un contrôle sur elles et sur l'échantillonnage. Jones (2001) utilise des fonctions analytiques pour connaître les points faibles des méthodes. Les échantillons sont choisis pour donner des résultats tels que la figure 2.2 et figure 2.4. Par ailleurs, Liu et Batill (2000) démontrent le bon fonctionnement d'une méthode à réseau neuronal à l'aide d'un échantillonnage idéal pour le cas test choisi. Cette deuxième façon de comparer permet alors de connaître les points forts et les points faibles des méthodes d'approximations. Il reste cependant bien cerner comment la méthode d'approximation peut exploiter ces points forts et faibles durant son application.

Ces deux approches à la comparaison utilisent des moyens intéressants. Notamment pour la première approche, l'idée de répéter l'approximation sur un cas test avec différents échantillons et ce, pour plusieurs cas tests, apporte une connaissance plus générale de la performance. La deuxième approche démontre qu'il est utile de connaître la performance des méthodes d'approximations pour des cas extrêmement simples et extrêmement complexes. Ces idées sont incorporées dans le développement de la méthode de comparaison décrite dans le chapitre suivante.

2.3 En résumé

Les méthodes d'approximations de type comparatives ont une approche qui favorise un échantillonnage de très petite taille. Le fait de coupler l'approximation à l'optimisation diminue le temps de calcul. Cependant, le fait de ne pas connaître l'état de l'approximation sème l'incertitude dans les résultats. Il se peut que l'optimum ne soit pas global ou que l'optimum de l'approximation ne représente pas un optimum de la fonction exacte. Ce genre d'échantillonnage qui ne satisfait qu'un objectif, soit la recherche pour l'optimum, ne peut garantir une bonne représentation.

Le principe de comparer l'approximation à la fonction exacte sans pour autant connaître réellement la nature de cette dernière, nous informe peu sur la véritable performance de la fonction d'approximation. Pour être en mesure de bien caractériser cette performance, il est nécessaire de connaître, pour tout le domaine de travail, la valeur que prend la fonction exacte. Il sera alors possible de calculer une erreur absolue de l'approximation et donc connaître le comportement de la fonction d'approximation pour certains scénarios. C'est dans cette optique que l'on propose une nouvelle façon d'évaluer la performance d'une fonction d'approximation.

CHAPITRE 3

MÉTHODE DE CARACTÉRISATION GLOBALE

Le thème de ce chapitre est le développement d'une méthode de caractérisation. On décrit dans une première section, l'idée sous-jacente à cette nouvelle méthode d'approximation. La deuxième section est une brève description de la validation et vérification. La suite de ce chapitre traite du développement de la méthode de caractérisation. Celle-ci est décomposée en quatres parties ; les critères de performances pour les approximations, le calcul de l'erreur, le développement statistique de la caractérisation et la création de cas test. Les trois dernières sections utilisent les principes de validation et vérification définis prochainement. Ces trois sections suivent la même démarche : définition du sujet, vérification des calculs et conclusion de la section.

3.1 Une alternative à la comparaison : la caractérisation

On propose ici une nouvelle façon d'évaluer les fonctions d'approximations. Il ne s'agit pas réellement de faire la comparaison entre les fonctions exactes et d'approximations mais plutôt de caractériser le comportement de ces dernières face à différents types de problèmes. On voudrait, par exemple, savoir comment une certaine fonction filtre le bruit ou quelle taille d'échantillonnage est nécessaire pour obtenir une bonne approximation. Cette caractérisation des fonctions d'approximations doit passer par la caractérisation des fonctions exactes sur tout le domaine de travail du problème d'optimisation. Toutefois, pour être en mesure de bien accomplir cette caractérisation, il est nécessaire de l'accomplir avant même de débuter l'optimisation.

On doit avant tout, définir les caractéristiques des fonctions d'approximations. Une fonc-

tion d'approximation peut être définie par :

- sa capacité à modéliser des fonctions complexes,
- sa capacité à modéliser des fonctions à grand nombre de variables,
- sa capacité à filtrer ou à quantifier le bruit.

Ces caractéristiques découlent directement des caractéristiques définissant les fonctions exactes. Celles-ci sont :

- la complexité d'une fonction(non-linéairité, multiples extrêmums, convexivité),
- la dimensionnalité d'une fonction,
- le bruit présent dans la fonction.

3.2 Concepts de vérification et de validation

Les principes de la vérification et de la validation sont utilisés à plusieurs reprises dans ce travail. On consacre donc une section à une brève description de ces concepts, permettant ainsi une meilleure compréhension des sections qui suivent.

La vérification traite de la résolution des équations mathématiques alors que la validation justifie le type d'équations mathématiques utilisées (d'après Boehm (1981) et Blottner (1990)). Autrement dit, la vérification s'assure que les équations sont bien codées et que les chiffres significatifs sont respectés. La validation s'assure que les modèles mathématiques respectent la physique qu'ils sont censés représenter; soit par exemple les modèles de turbulence, les équations de transports, etc.

La vérification peut être accomplie en observant soit le comportement d'une erreur, soit le comportement d'une grandeur caractéristique. Les équations sont correctement résolue lorsque l'erreur tend vers zéro de façon asymptotique ou lorsque la valeur d'une grandeur caratéristique tend vers une constante. Dans le cas d'une grandeur caractéristique, la résolution des équations est vérifiée si son comportement est asymptotique et tend vers une constante. Pour être en mesure de définir une erreur, le problème doit nécessairement avoir une solution analytique. Dans le cas contraire, une grandeur caractéristique telle que le débit du fluide, le frottement en paroi ou la perte de pression peut être utilisée.

La vérification peut être décomposée en deux parties : la vérification de l'algorithme et la vérification d'une simulation en particulier. L'algorithme doit correctement solutionner les équations du modèle, et ce, pour une suite de cas tests ayant des solutions analytiques représentatives du problème considéré. Il reste ensuite la vérification de cas particuliers, généralement des cas réels, tel que l'écoulement dans une turbine.

La validation ne peut s'appliquer qu'à la modélisation de cas réels car le but est de s'assurer que les équations modélisent bien la réalité. La méthode la plus commune pour la validation est la comparaison des résultats numériques avec des données expérimentales.

3.3 Critère de performance et convergence de l'approximation

Pour être en mesure de quantifier les caractéristiques des fonctions d'approximation, un critère de performance doit être défini. Sachant que l'on s'intéresse à la fois à l'exactitude de l'approximation et à la taille de l'échantillon, l'erreur en fonction de l'échantillonnage semble être un bon critère. L'erreur est acceptable lorsque l'approximation a une certaine stabilité et elle représente adéquatement les caractéristiques de la

fonction exacte que l'on cherche à approximer. La convergence de l'approximation en fonction de la complexité, du bruit et de la dimension sera déterminée avec la convergence de l'erreur. À titre d'exemple, supposons une suite de fonctions sinusoïdales pour lesquelles la fréquence augmente au fur et à mesure que l'on progresse dans la suite. Pour une fonction donnée de la suite, l'approximation va converger vers un état stable en fonction de la taille de l'échantillonnage. Le comportement de cette convergence pour la suite de fonctions permet de quantifier la performance pour un type de complexité donné. De facon analogue, pour étudier la convergence en fonction de la dimension, une suite de fonction où la dimension augmente sera utilisée.

Une possibilité décrite par Roache (1998) pour déterminer le taux de convergence est de calculer l'ordre de convergence une fois la zone asymptotique atteinte. L'inconvénient de cette approche est que, souvent, la zone asymptotique est atteinte que lorsque l'erreur est très petite. Or le but d'approximer n'est pas nécessairement d'avoir une représentation parfaite. La précision recherchée peut être en fait à l'extérieur de la zone asymptotique. Un autre fait important est que les propriétés de filtrage des fonctions d'approximations sont souvent liées au nombre de points dans l'échantillonnage. Par exemple, la figure 3.1 montre comment une approximation par krigeage est capable de converger en deux temps, tout d'abord vers une approximation représentant la tendance moyenne de la fonction exacte et par la suite est capable de converger vers une représentation exacte.

Deux défis doivent être relevés pour être en mesure de savoir quand l'approximation atteint l'une des deux convergences. Le premier est de quantifier l'erreur de l'approximation en fonction du nombre de points échantillonnés sans se référer à la fonction exacte. Le second est d'introduire une norme qui permet de connaître quand l'approximation est convergée. Dans ce qui suit, nous allons tout d'abord décrire les grandes lignes de la méthode de caractérisation et son application pour des cas tests préliminaires. En se basant sur ces expériences nous avons établi une méthodes pour le calcul de l'erreur utilisant une norme qui sera présentée au chapitre 5.

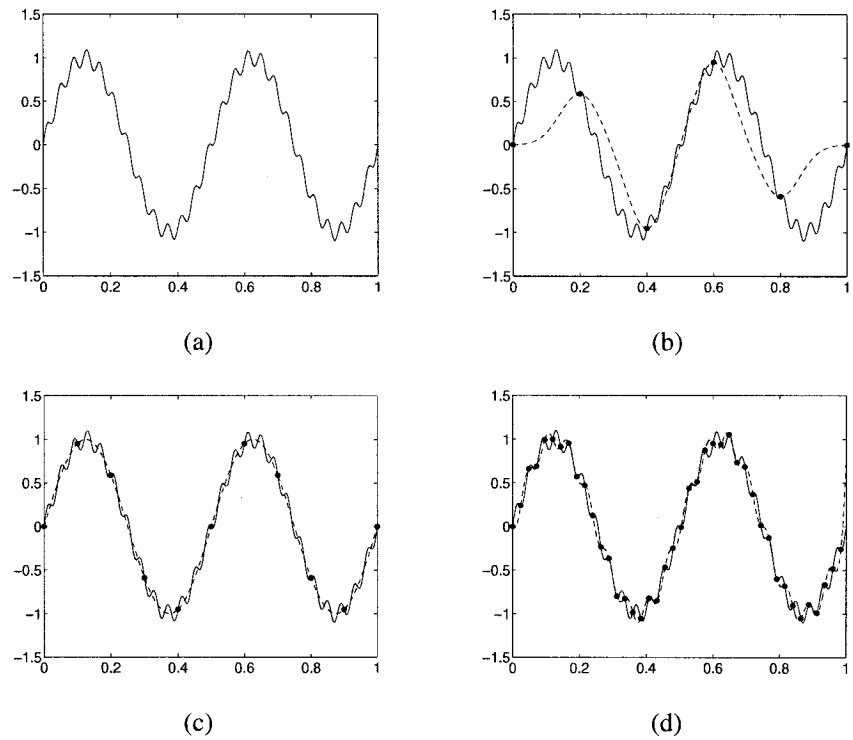


Figure 3.1 Exemple de convergence d'une fonction d'approximation sur une fonction bruitée. (a) fonction exacte. (b) approximation avec seulement 6 points. (c) approximation ayant atteint une convergence à la représentation lissée de la fonction exacte. La convergence est atteinte avec 11 points. (d) approximation avec 42 points qui converge vers une représentation exacte.

3.4 Calcul de l'erreur

Le calcul d'une erreur, aussi simple soit-elle, nécessite tout de même une démarche méthodique pour garantir un résultat juste et précis. On choisit, dans un premier temps, le type d'erreur qui sera calculée et ensuite on vérifie la précision de l'algorithme dédié au calcul de cette erreur. Cette vérification sera faite avec des solutions manufacturées Roache (1998) et avec les cas tests qui seront utilisées pendant la caractérisation des fonctions d'approximations.

3.4.1 Définition

L'erreur que l'on calcule doit être représentative de l'exactitude sur tout le domaine de travail. On a choisi d'utiliser la distance moyenne calculée par l'intégrale de la distance absolue des fonctions sur tout le domaine de travail. On suppose que les fonctions exactes utilisées pendant la caractérisation seront différentiables au moins une fois. La norme L^1 est utilisée pour calculer l'erreur.

L'erreur moyenne s'écrit :

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \int_V \left| \hat{f}(x) - f(x) \right| dv \tag{3.1}$$

où V est le volume, $\hat{f}(x)$ l'approximation et $f(x)$ la fonction exacte. Sous forme discrète, l'intégrale s'écrit :

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n} \left| \hat{f}(x_i) - f(x_i) \right| \Delta v_i \tag{3.2}$$

où n est le nombre d'éléments dans la discrétisation. Avec une discrétisation uniforme,

on peut utiliser la méthode du point milieu pour retrouver :

$$
\begin{aligned}
V &= \prod_{j=1}^{D} x_{j_u} - x_{j_l} \\
\Delta v &= \prod_{j=1}^{D} \Delta x_j \\
\Delta x_j &= \frac{x_{j_u} - x_{j_l}}{n}
\end{aligned}
$$

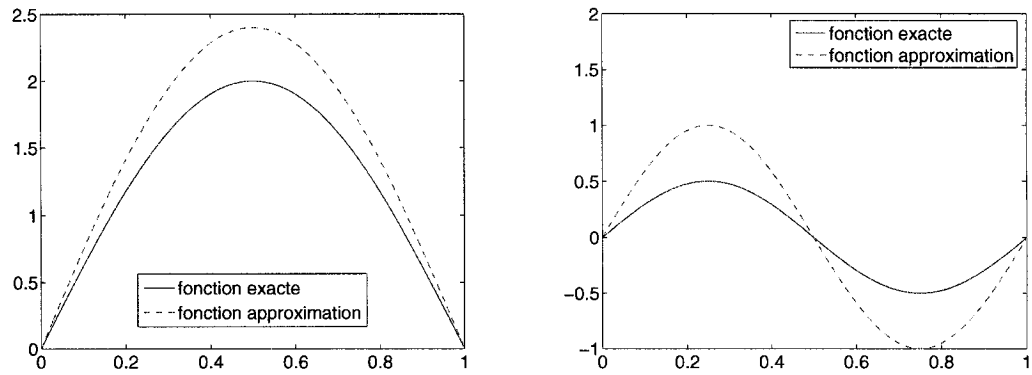
où x_{j_u} et x_{j_l} sont respectivement les limites supérieures et inférieures de x_j et D est la dimension du problème. Ceux-ci permet de réécrire l'équation 3.2 sous la forme suivante

$$\bar{E} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \hat{f}(x_i) - f(x_i) \right| \tag{3.3}$$

Notons que dorénavant, le mot erreur sous-entendra l'erreur moyenne entre la fonction exacte et la fonction d'approximation, telle que décrit ci-dessus.

3.4.2 Vérification du code

Une vérification du calcul de l'erreur est accomplie à l'aide de la méthode des solutions manufacturées, proposée par Roache (1998). Cette méthode consiste à créer un problème adapté à notre algorithme et qui a une solution analytique. Dans ce cas-ci, on choisit des fonctions analytiques pour la fonction exacte et la fonction d'approximation tel qu'illustré sur la figure 3.2. La solution manufacturée est l'intégrale analytique de l'erreur entre ces deux courbes. Deux solutions manufacturées sont utilisées dans cette vérification : la première est le cas le plus simple où les courbes s'intersectent seulement aux extrémités ; la seconde correspond au cas où il y a intersection ailleurs qu'aux ex-



(a) (b)

Figure 3.2 Courbes analytiques simulant la courbe de la fonction exacte et de la fonction d'approximation.

trémités. On limite la vérification à des cas en deux dimensions. Ceci est justifiable car la dimension D du problème n'intervient pas dans l'équation 3.3.

Première solution manufacturée

La solution exacte et la solution approximée sont des sinus bornés entre $[0\ ,\pi]$ avec différentes amplitudes comme l'illustre la figure 3.2(a). Les équations des deux courbes sont :

$$\begin{aligned} a(x) &= A\sin(\pi x) \\ b(x) &= B\sin(\pi x) \end{aligned}$$

avec $0 \leq x \leq 1$. On impose $A > 0$ et $B > 0$ pour avoir la solution la plus simple possible. L'équation analytique du calcul de l'erreur est

$$\bar{E} = \int_0^1 |a(x) - b(x)|\, dx \tag{3.4}$$

Sachant que $a(x) \neq b(x), x \in]0\ ,1[$, on obtient :

$$\bar{E} = \left| \int_0^1 a(x) - b(x) dx \right| \tag{3.5}$$

$$= \frac{2\,|A - B|}{\pi} \tag{3.6}$$

Deuxième solution manufacturée

Les fonctions des deux courbes sont des sinus tels qu'auparavant mais il est maintenant possible d'avoir croisement des courbes ailleurs qu'aux extrémités (voir figure 3.2(b)).

Les équations pour cette deuxième solution sont :

$$\begin{aligned} a(x) &= A \sin(2\pi x) \\ b(x) &= B \sin(2\pi x + r) \end{aligned}$$

$x \in [0\ ,1]$. Le paramètre r sert à décaler les équations. Pour être en mesure d'évaluer

l'intégrale de l'équation 3.4, il est nécessaire de la décomposer en plusieurs parties.

$$
\begin{aligned}
\bar{E}_1 &= \frac{1}{x_1}\left|\int_0^{x_1} a(x) - b(x)dx\right| \\
\bar{E}_2 &= \frac{1}{x_2 - x_1}\left|\int_{x_1}^{x_2} a(x) - b(x)dx\right| \\
\bar{E}_3 &= \frac{1}{1 - x_2}\left|\int_{x_2}^{1} a(x) - b(x)dx\right|
\end{aligned}
$$

où x_1 et x_2 sont les points où $a(x_1) = b(x_1)$ et $a(x_2) = b(x_2)$. Dans le cas particulier $r = 0$, la première intégrale est annulée car $x_1 = 0$. L'erreur moyenne de l'ensemble est calculée par une moyenne pondérée sur les sous-ensembles $[0\ , x_1]$,$[x_1\ , x_2]$ et $[x_2,\ 1]$.

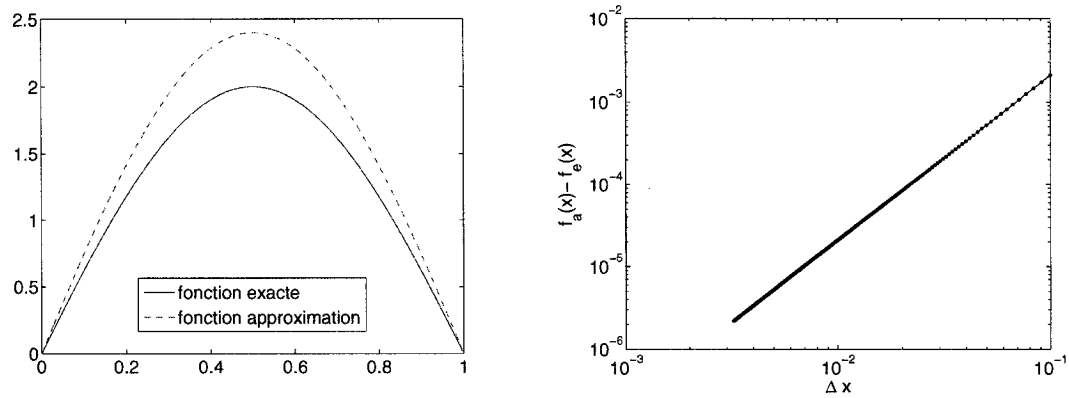
$$\bar{E} = x_1\bar{E}_1 + (x_2 - x_1)\,\bar{E}_2 + (1 - x_2)\,\bar{E}_3 \tag{3.7}$$

La solution manufacturée pour les $\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{E}_3$ est

$$
\begin{aligned}
\bar{E}_1 &= \frac{1}{2\pi x_1}\left[-B\left(\cos(2\pi x_1 + r) - \cos(r)\right) + A\left(\cos(2\pi x_1) - 1\right)\right] \\
\bar{E}_2 &= \frac{1}{2\pi(x_2 - x_1)}\left[B\left(\cos(2\pi x_2 + r) - \cos(2\pi x_1 + r)\right) - A\left(\cos(2\pi x_2) - \cos(2\pi x_1)\right)\right] \\
\bar{E}_3 &= \frac{1}{2\pi(1 - x_2)}\left[-B\left(\cos(4\pi + r) - \cos(2\pi x_2 + r)\right) + A\left(\cos(4\pi) - \cos(2\pi x_2)\right)\right]
\end{aligned}
$$

Résultats de la vérification

Notons avant tous que l'ordre théorique de la convergence est 2. La figure 3.3 démontre que le calcul numérique de l'erreur converge bien vers la première solution manufacturée. Sa convergence est d'ordre 2.0 et elle n'est pas bruitée. On peut donc conclure



(a) courbes analytiques

(b) convergence du calcul

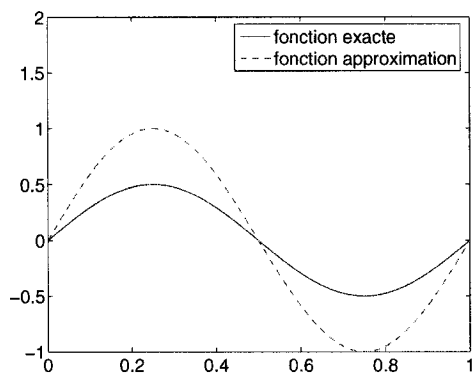
Figure 3.3 Convergence du calcul de l'erreur pour la première solution manufacturée.

que l'algorithme est capable de correctement calculer l'erreur du scénario le plus simple.

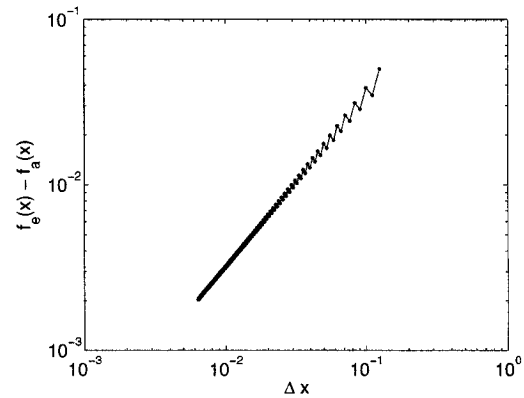
Les résultats de la deuxième solution numérique sont plus complexes à interpréter. En effet, on remarque sur la figure 3.4 que la convergence est bruitée. Dans le cas où les sinus ne sont pas déphasés (voir figure 3.4(a) et (b)) il y a une distinction entre les discrétisations paires et impaires. Ce *zigzag* est dû au fait que dans les cas paires, un nœud est placé exactement au croisement des courbes alors que dans le cas impaire, il n'y en a pas. Les cas paires sont donc légèrement plus précis. Cette démarcation en zigzag dégénère au fur et à mesure que l'on décale les courbes (voir figure 3.4(c) et (d)). L'ordre de convergence est en moyenne 1.0.

En conclusion

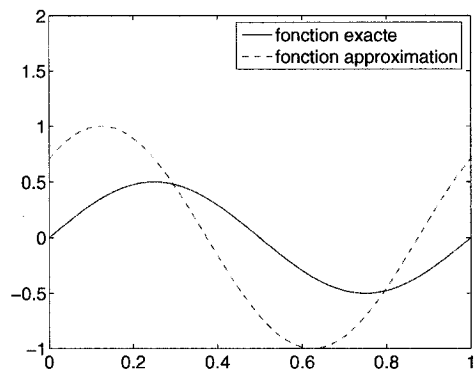
Il a été démontré que l'algorithme de calcul de l'erreur converge quoique, cette convergence ne soit pas toujours lisse. Ceci peut avoir des conséquences quand vient le temps de vérifier la convergence de l'erreur des cas test.



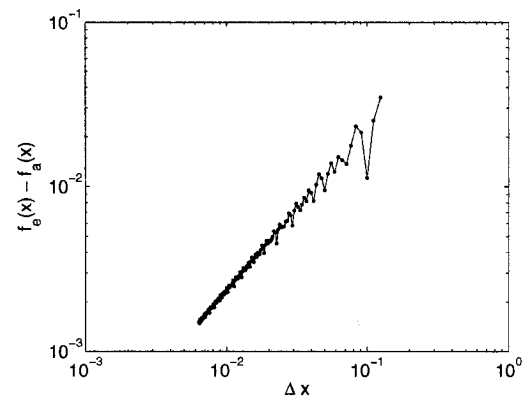
(a) courbes analytiques avec $r = 0°$



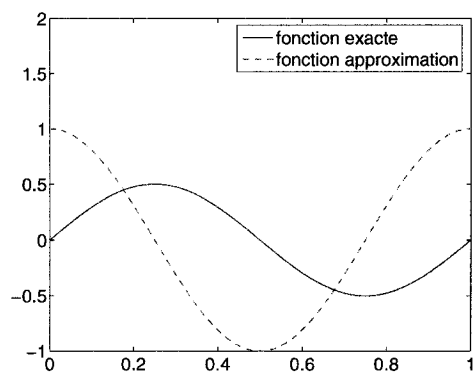
(b) convergence du calcul de l'erreur



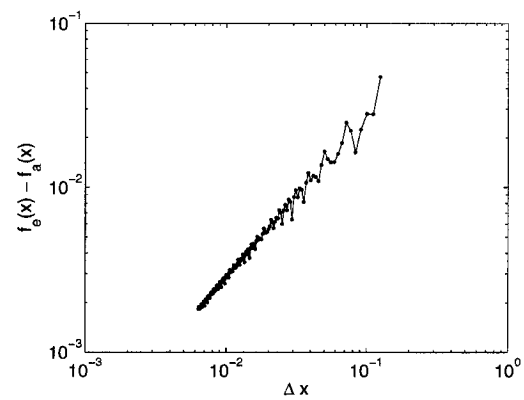
(c) courbes analytiques avec $r = 45°$



(d) convergence du calcul de l'erreur



(e) courbes analytiques avec $r = 90°$



(f) convergence du calcul de l'erreur

Figure 3.4 Convergence du calcul de l'erreur pour différents cas de la deuxième solution manufacturée. r est le décalage entre les courbes. $g(x)$ est la fonction d'approximation. $f(x)$ est la fonction exacte.

Calcul du GCI

Selon Roache (1998), l'incertitude de la valeur caractéristique (l'erreur dans notre cas) est bornée par :

$$E_1\left(1 - GCI_{fine}\right) \leq E_{h=0} \leq \left(1 + GCI_{fine}\right) E_1$$

où $E_{h=0}$ est la valeur caractéristique évaluée pour un interval Δh infiniment petit, soit quand le nombre de points tant vers l'infini. Le GCI pour une discrétisation donnée est défini par :

$$GCI = F_s \frac{|\epsilon|}{r^p - 1} \tag{3.8}$$

où F_s est un facteur de sécurité, r est le ratio entre deux discrétisations, p est l'ordre de convergence de l'erreur et $|\epsilon|$ est une mesure du changement de l'erreur. Pour ne pas biaiser le calcul du GCI, on prend une valeur relative du changement de l'erreur, soit

$$\epsilon = \frac{E_2 - E_1}{E_1}$$

où E_i est l'erreur calculée pour une discrétisation donnée, la discrétisation étant définie par le nombre de points de comparaison. Le facteur de sécurité que l'on impose ici est un terme assurant que les prévisions soit conservatrices. Dans le cas où on utilise trois discrétisations, on à choisi $F_s = 1.25$. Le ratio entre deux discrétions est

$$r = \frac{\Delta h_2}{\Delta h_1}$$

L'ordre de convergence est donné par

$$p = \ln\left(\frac{E_3 - E_2}{E_2 - E_1}\right) / \ln(r)$$

où E_1 est l'erreur calculée avec la plus fine discrétisation, E_3 la plus grossière discrétisation et E_2 celle entre les deux. Deux vérifications doivent être faites pour assurer que la convergence est dans la zone asymptotique. La première est de s'assurer que l'ordre de convergence est borné, entre 0 et 1. La deuxième est de vérifier si le calcul est dans la zone asymptotique avec

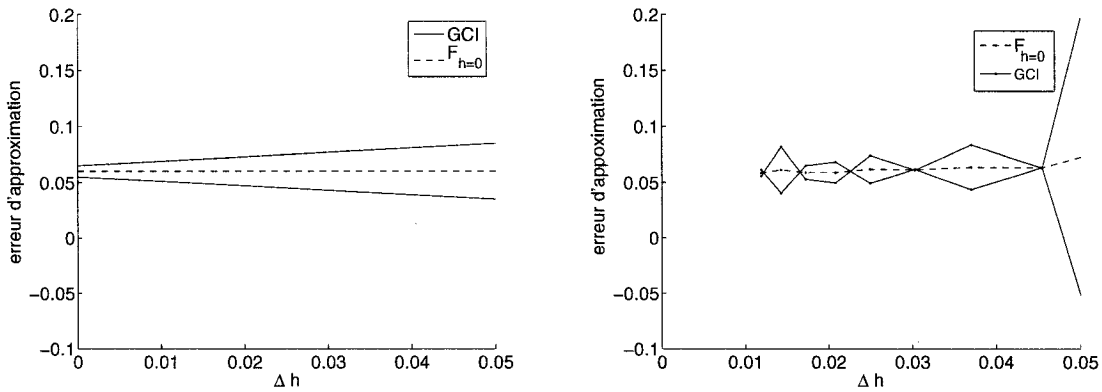
$$GCI_{23} = r^p GCI_{12} \tag{3.9}$$

où GCI_{12} est calculé avec E_1 et E_2 et, GCI_{23} est calculé avec E_2 et E_3.

Ces équations, misent sous forme d'algorithme, déterminent le nombre de points nécessaires pour la comparaison de l'approximation à la fonction exacte.

3.4.3 Vérification pour chaque cas test

La partie précédente vérifie l'exactitude du code pour le calcul de l'erreur entre deux fonctions quelconques. Il reste à vérifier maintenant la précision du calcul de l'erreur pour chaque test. Dans le cas où il n'y a pas assez de points de comparaison, l'erreur engendrée par ce calcul peut influencer l'erreur que l'on cherche à connaître, soit l'erreur moyenne entre la fonction exacte et la fonction d'approximation. L'évolution de cette incertitude par rapport au nombre de points utilisés pour le calcul de l'erreur peut être représentée par un graphique tel que celui de la figure 3.5(a). La valeur précise de l'erreur (la distance moyenne entre les fonctions exacte et d'approximation) se situe entre les deux droites, soit la droite de la valeur de l'erreur calculée par le code et la borne inférieure définie par le GCI. Le GCI (Grid Refinement Index), proposé par Roache (1998), définit en pourcentage les bornes supérieures et inférieures de la valeur exacte de l'erreur. Cette valeur exacte, calculée par extrapolation de Richardson, est la valeur de l'erreur quand on suppose un nombre infini de points de comparaison. La précision



(a) cas idéal (b) cas réel

Figure 3.5 Convergence du calcul de l'erreur des cas tests. Δh est la distance entre les points de comparaison.

de cette extrapolation croit lorsque le nombre de points de comparaison augmente (Δh diminue) et par conséquent, les bornes se resserrent, montrant ainsi la convergence du calcul.

On remarque sur la figure 3.5 que la convergence idéale diffère d'une convergence réelle. Ceci est dû au fait que l'algorithme a une convergence plutôt bruitée. L'effet de ce bruit est mieux illustré à la figure 3.6 où deux cas semblent diverger plutôt que converger. En théorie, le calcul de l'erreur de chaque cas test devrait converger vers une valeur constante au fur et à mesure que l'on ajoute des points de comparaison. D'ailleurs, c'est ce que l'on observe sur la figure 3.6(a). Or vu que la convergence n'est pas lisse, on observe parfois des phénomènes non désirables. Cette effet du bruit est accentué quand l'erreur est grande. On remarque, d'ailleurs, que l'échelle de l'ordonnée est bornée entre $10^{-0.5}$ et $10^{-0.20}$ pour les graphiques (c) et (e) de la figure 3.6. Pour ces deux cas, la convergence ne sera pas atteinte avec un nombre raisonnable de points.

Étant donné que la convergence n'est pas garantie pour chaque calcul de l'erreur, une astuce doit être utilisée pour définir le nombre de points nécessaires pour la comparai-

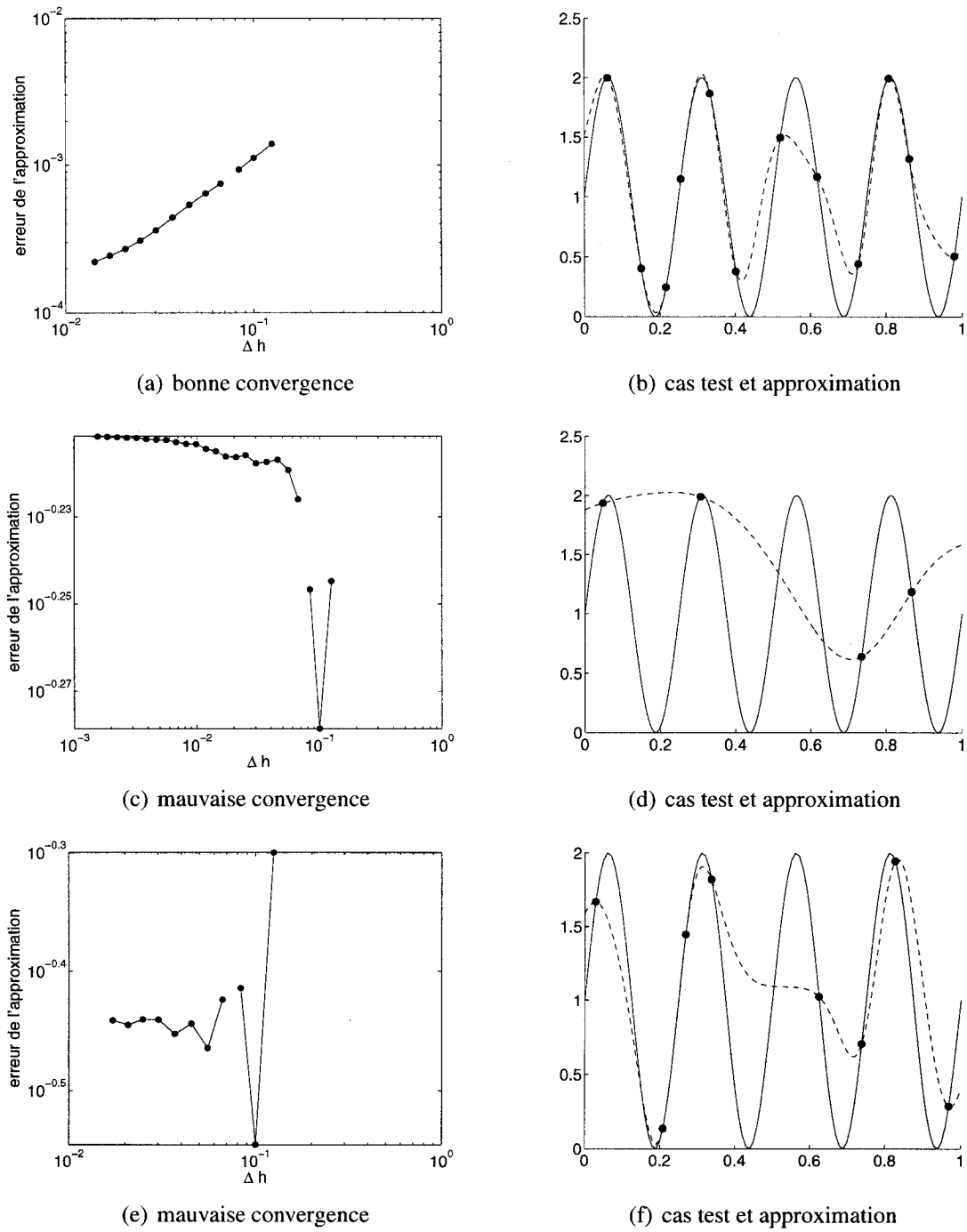


Figure 3.6 Convergence du calcul de l'erreur. Graphiques (a), (c) et (e) représentent la convergence de l'erreur pour trois différentes approximations du même cas test. Le même algorithme et la même discrétisation sont utilisés pour les calculs d'erreurs. Δh est la distance entre les points de comparaison. Les lignes pleines des graphiques (b), (d) et (f) sont les fonctions exactes et les lignes tiretées sont les approximations.

son. Le choix de ce nombre est plutôt conservateur, assurant ainsi que l'incertitude soit bornée. On impose donc un nombre fixe de points de comparaison pour chaque cas test, peut importe la forme que prend l'approximation. Le choix de ce nombre de points est décidé par la convergence nécessitant le plus de points pour atteindre le GCI désiré. Dans le cas où la convergence n'est pas atteinte, tel que c'est le cas des graphiques (c) et (e), une limite supérieure est fixée pour le nombre de points. Cette limite est un compromis entre le temps de calcul et la précision désirée pour le calcul de l'erreur. En se référent aux calculs qui ont convergés, on s'assure qu'en moyenne, la limite est plus grande que le nombre de points utilisés pour atteindre le GCI désiré.

3.5 Une approche statistique à la caractérisation

La performance générale d'une fonction d'approximation est évaluée sur des échantillons dont la taille et la position des points varient. Une vérification des méthodes d'échantillonnages est nécessaire pour assurer qu'il y a indépendance de la réponse par rapport à la taille de l'échantillon.

3.5.1 Création de base de donnée

Il y a deux volets à l'échantillonnage, la taille de l'échantillon et la position des points dans l'échantillon. La performance d'une fonction d'approximation est donc testée en utilisant, pour chaque cas test, une multitude d'échantillons de différentes tailles et, pour chaque taille, une grande variété de positions des points de comparaison. Des propriétées aléatoires sont apportées aux deux volets pour créer des résultats non biaisés.

Échantillonnage à taille fixe

Dans l'optique de bien représenter tout le domaine de travail de la fonction exacte, la sélection des points de l'échantillon ne doit pas être centrée autour d'un optimum et doit être capable d'apporter de l'information pertinente à la fonction d'approximation. Il existe plusieurs méthodes de sélection pour créer un échantillon. Citons, entre autres, les méthodes D-Optimal (Khuri (1987)), G-efficient (Khuri (1987)), hyper cube latin (McKay *et al.* (1979)), Orthogonal array (Khuri (1987)). La majorité de ces méthodes sont conçues pour que l'échantillonnage ait un conditionnement particulier pour un type de fonction d'approximation. À titre d'exemple, les méthodes telles que D-Optimal, créent des échantillons qui permettent de discerner quelles variables de la fonction exacte sont sensibles. Or, pour être en mesure d'utiliser un échantillonnage pareil, il est nécessaire de connaître a priori le type de régression qui approxime bien la tendance moyenne, ou alors d'imposer une régression quelconque. Un échantillonnage D-optimal conçu pour une régression linéaire, par exemple, aurait la propriété $E[x_i] = 0, i = 1, \ldots, n$ et aurait des points maximisant $\sigma_i, i = 1, \ldots, n$ où n est la dimension. Or cette information sur la tendance moyenne n'est pas connue dans notre cas et on ne souhaite pas imposer une régression. Une méthode de sélection qui adhère à nos critères est l'hyper cube latin. Celle-ci prend pour acquis qu'aucune information n'est connue a priori. Il favorise une répartition plus uniforme sur tout le domaine. La démarche de l'hyper cube latin est la suivante. Le domaine est divisé en k^n secteurs, k étant le nombre de points que l'on veut dans l'échantillonnage. k secteurs sont choisis de façon à ce qu'il n'y ait aucun chevauchement. Un point est ensuite choisi par secteur de façon aléatoire. Une explication plus détaillée se trouve dans McKay *et al.* (1979) et la figure 3.7 illustre un exemple en deux dimensions.

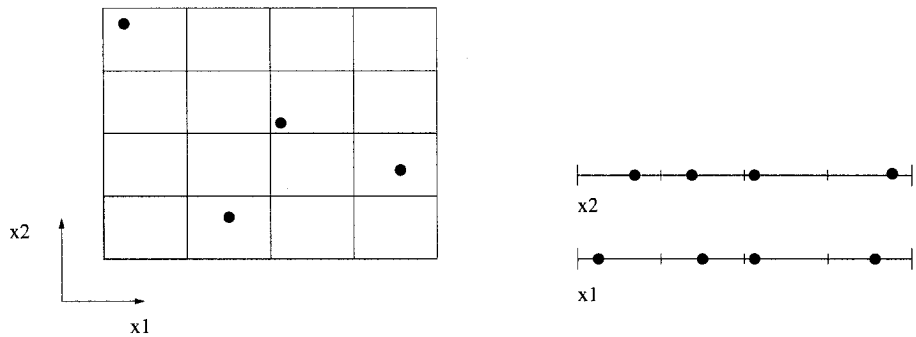


Figure 3.7 Exemple de sélection de points par hyper cube latin en deux dimensions. La figure de gauche montre le domaine divisé en 4^2 secteurs. 4 secteurs sont choisis de sorte qu'ils ne partagent pas une colonne ou une rangé avec un autre secteur. Des points sont choisis de façon aléatoire dans chaque secteur. La figure de droite est une autre façon de représenter la sélection des points. L'axe x_1 correspond aux positions des points selon la dimension x_1 de la figure de gauche. De même pour l'axe x_2.

Échantillonnage à taille variable

L'utilisation de la méthode de l'hyper cube latin assure une répartition non biaisée des points pour un échantillon de taille fixe. Une méthode à taille variable doit être capable d'ajouter ou d'enlever des points de l'échantillon sans trop affecter la répartition globale. On discerne trois approches : soit créer, pour chaque taille désirée, un nouvel échantillon dont les points de celui-ci ne sont pas nécessairement partagés par les tailles inférieures et supérieures, soit ajouter de façon stratégique un point dans l'échantillon, soit enlever de façon stratégique un point de l'échantillon.

La première approche assure que les échantillons ne seront pas biaisés. Bien que cette aspect soit très attrayante, le fait de ne pas avoir la possibilité de partager les mêmes points avec les échantillons de tailles supérieures et inférieures est un inconvénient. La création d'un échantillon dans le contexte d'une application industrielle peut s'avérer très coûteux. Et dans le cas ou l'on veut augmenter la taille de l'échantillon, l'approche décrite ici nécessiterait la création d'un nouvel échantillon!

L'idée de commencer avec un petit échantillon de base et de l'augmenter de nouveaux points au fur et à mesure que l'on veut augmenter la taille est très attrayante. Ici, les échantillons de tailles inférieures sont des sous-ensembles des tailles supérieures. Or l'application de ce principe n'est pas simple. Si on souhaite suivre le principe de l'hyper cube latin, il serait nécessaire de re-diviser le domaine en secteurs de tailles égales tout en tenant compte des points existants. Une tâche difficile, voir impossible dans certaines circonstances.

Le principe de l'appauvrissement d'un échantillon partage les mêmes caractéristiques intéressantes que l'augmentation mais est plus facilement implémenté. En ayant au départ un échantillon de grande taille, correspondant à la taille souhaitée, on soustrait des points jusqu'à ce que l'on atteigne la taille voulue. La figure 3.8 montre quelques exemples d'appauvrissement. Cette soustraction doit être accomplie de façon à assurer que l'échantillon soit toujours non biaisé. Pour ce faire, le choix du point à enlever est fait à l'aide d'une fonction aléatoire.

Pour assurer que le tirage du point que l'on souhaite soustraire soit bien aléatoire, on examine l'écart entre des valeurs moyennes associées à chaque point de l'échantillon. On part avec un échantillon de taille n et de cette échantillon, on soustrait un point par itération à l'aide d'un tirage aléatoire. On note à quel itération chaque point est soustrait. On itère jusqu'à ce que la taille de l'échantillon soit de un. Cette démarche est répétée à plusieurs reprises, donnant ainsi la possibilité de calculer une moyenne pour chaque point de l'échantillon. Cette moyenne représente l'itération auquel le point est soustrait. Avec un échantillon de 80 points, on se retrouve avec 80 moyennes. Dans un appauvrissement idéal (ou les tirages seraient indépendant), les 80 moyennes auraient la même valeur, soit 40. Or ceci n'est pas notre cas et on doit donc surveiller l'écart entre les moyennes. Celle-ci diminue quand le nombre de hyper cube latin croit. Il s'agira alors de choisir le nombre d'hyper cube latin permettant d'avoir une représentation se rapprochant du cas idéal.

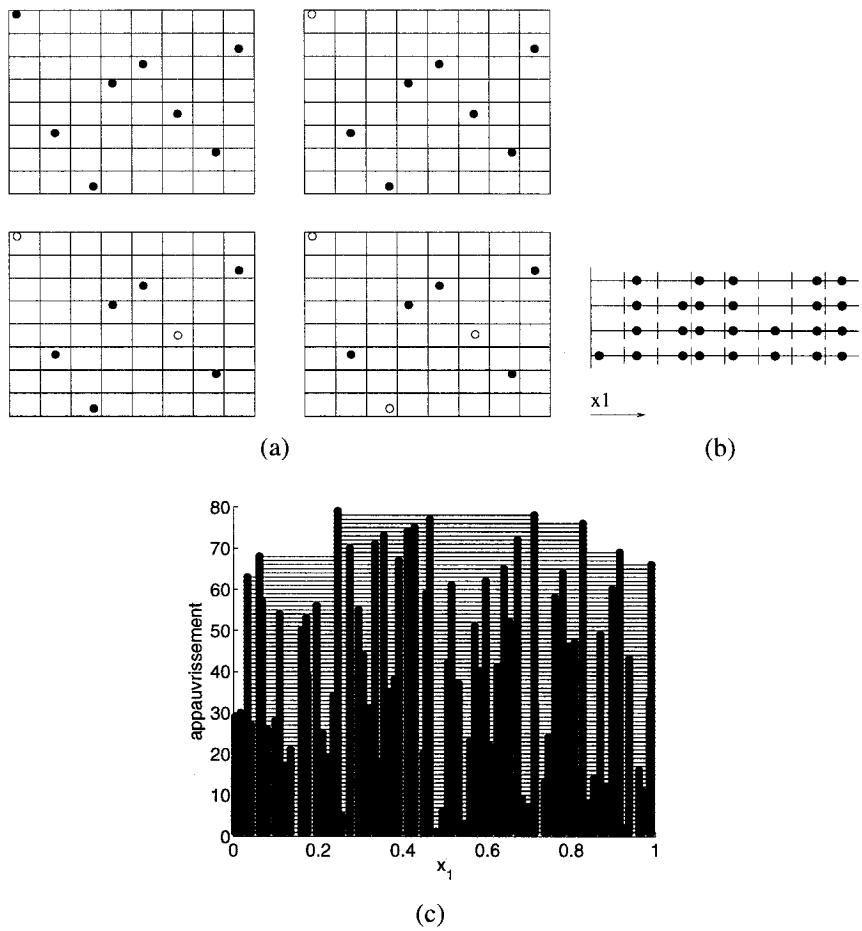


Figure 3.8 Exemple d'appauvrissement en deux dimensions. (a) Un quadrillage d'un domaine où la soustraction des points est montrée par les cercles vides. (b) Graphiques montrant l'appauvrissement pour une dimension du problème (a). (c) Un exemple où il y a 80 points au départ et 1 point reste après 79 soustractions.

On doit définir, dans un premier temps, la probabilité de soustraire un point. S'il y a n points dans un échantillon et que l'on fait un tirage pour connaître le point que l'on veut soustraire, alors la probabilité que le point x soit tiré est $p(x \text{ est soustrait})$. En supposant que le tirage n'est pas biaisé, la probabilité est $p(x \text{ soustrait}) = \frac{1}{n}$. Le tirage est alors équiprobable pour tous points dans l'échantillon. S'il y a plus d'un tirage effectué sur l'échantillon et que les tirages sont indépendants, la probabilité que x soit soustrait est au i-ème tirage est $p(x \text{ soustrait au i-ème tirage}) = \frac{1}{n}$. Dans ce cas, la probabilité que $p(x \text{ soustrait})$ soit soustrait est :

$$p(x \text{ soustrait}) = \sum_{i=1}^{h} p(x \text{ soustrait au i-ème tirage}) \tag{3.10}$$

où h est le nombre de tirages effectués. De l'équation 3.10, on peut connaître à quel tirage, en moyenne, est soustrait x :

$$\mu_x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{h} i \tag{3.11}$$

L'écart-type associé à l'appauvrissement est

$$\sigma_x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{h} (i - \mu_x)^2 \tag{3.12}$$

L'indépendance des tirages simplifie grandement le calcul de la moyenne et de l'écart-type, mais les tirages ne sont en fait pas indépendants. Pour avoir l'indépendance de ces tirages il faut remettre x dans l'échantillon avant de faire le prochain tirage. Or le but de l'appauvrissement est de diminuer la taille de l'échantillon !

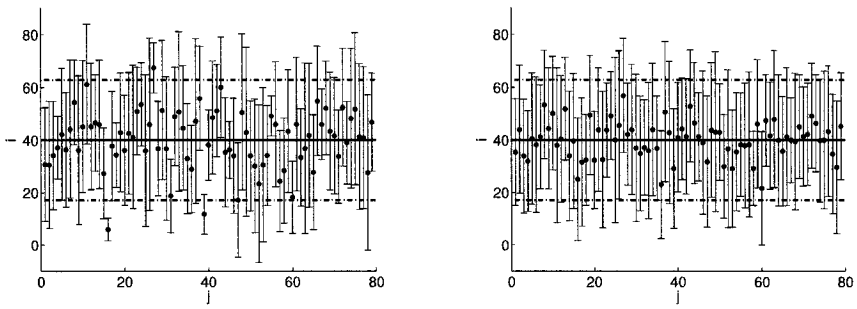
Ceci étant dit, il est tout de même possible de comparer la moyenne et l'écart-type de tirages idéaux à ceux de tirages réels. Pour ce faire, plusieurs hyper cubes latins sont créés et soumis à un appauvrissement. On peut alors calculer à quel tirage, en moyenne,

est soustrait chaque point de l'échantillon et aussi quel est l'écart-type. La figure 3.9 montre les moyennes et les écart-types des points pour un nombre variable d'hyper cubes latins. On remarque dans cette figure que les écarts-types et les moyennes réelles se rapprochent des valeurs idéales avec l'augmentation du nombre d'hyper cubes. Cette tendance est représentée par la figure 3.10 à la fois sur un graphique à échelle normale et sur un graphique à échelle logarithmique. On observe dans cette figure l'écart-type de la moyenne de tous les points en fonction du nombre d'hyper cubes utilisés, soit $\sigma_\mu(n)$, où n est le nombre d'hyper cubes. On remarque sur le graphique (b) que la convergence est constante et on note sur le graphique (a) que le changement devient minime aux environs de 35 hyper cubes.

On peut donc conclure que pour avoir des résultats avoisinant l'appauvrissement idéal d'un échantillon, il est nécessaire d'effectuer au moins 35 répétitions.

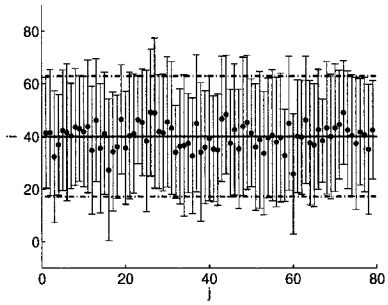
3.5.2 Présentation des résultats

L'information provenant de l'approche statistique décrite ci-dessus nécessite une représentation graphique cohérente. Rappelons que, pour un cas test, on connaît l'erreur de l'approximation en fonction de la taille de l'échantillon et de la position des points dans l'échantillon. Rappelons aussi que cette information est reproduite 35 fois en imposant une sélection aléatoire pour avoir une connaissance plus générale de la performance. On s'intéresse principalement à l'erreur associée à l'approximation en fonction de la taille de l'échantillon et ce, pour un échantillon typique. Un échantillon typique est un échantillon qui n'accentue ni les points forts ni les points faibles d'une fonction d'approximation. Le graphique de la figure 3.11 est un exemple de la performance d'un cas test. Alors que la taille de l'échantillon est mise en évidence sur le graphique de la figure 3.11, la position des points joue un rôle plus subtil. C'est grâce aux multiples échantillons ayant chacun un positionnement différent des points que l'on peut associer une

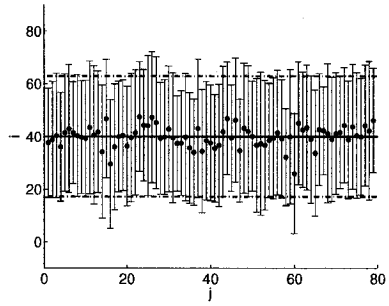


(a) 5 hyper cubes

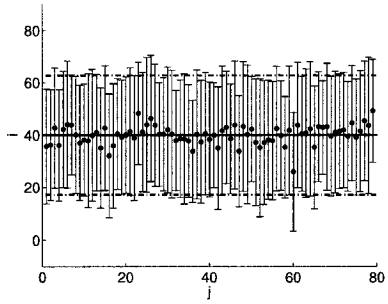
(b) 10 hyper cubes



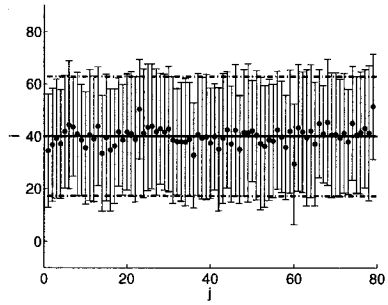
(c) 20 hyper cubes



(d) 30 hyper cubes

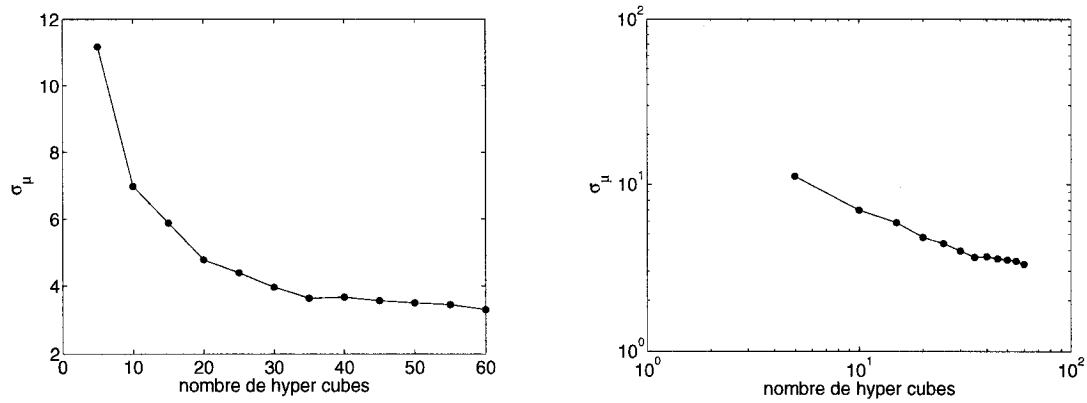


(e) 40 hyper cubes



(f) 50 hyper cubes

Figure 3.9 Moyennes et écarts-types associés à l'apauvrissement. $n = 80$, $h = 79$. Sur l'abscisse, $j = 1, \ldots, n$, la cardinalité des points dans l'échantillon. Sur l'ordonnée, $i = 1, \ldots, h$, la cardinalité des tirages. Les moyennes et écarts-types idéaux sont représentés par des lignes pleines et tiretées respectivement.



(a) (b)

Figure 3.10 La convergence de l'appauvrissement. La valeur vérifiée est l'écart-type de la moyenne.

erreur moyenne, un écart-type et une erreur maximale pour chaque taille d'échantillon.

3.6 Création de cas test

Dans le contexte de cette étude, le type de fonction que l'on rencontre est le résultat d'une boucle d'analyse CFD. Les cas tests doivent être représentatifs des fonctions réelles. Par ailleurs, on souhaite découpler les effets de complexité de la fonction des effets de dimension pour mieux quantifier la performance des fonctions d'approximations.

Il y a deux façons de créer des cas tests : soit utiliser des fonctions réelles pour différents points de fonctionnement, soit utiliser des fonctions analytiques avec des paramètres variables. L'avantage d'utiliser des fonctions réelles est qu'il n'est pas nécessaire de se soucier de la vraisemblance entre les cas tests et les fonctions. Un des désavantages est qu'il est souvent difficile de modifier le cas test pour étudier une condition en particulier. Par exemple, il est difficile d'éliminer le bruit d'une boucle d'analyse pour connaître la performance d'une approximation avec et sans bruit. Un autre grand désavantage est le

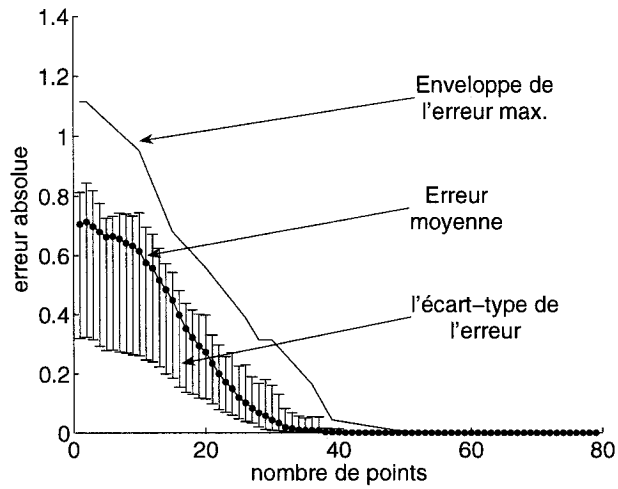


Figure 3.11 Exemple de représentation des résultats d'une fonction d'approximation pour un cas test. L'abscisse représente le nombre de points dans les échantillons. Les échantillons ont été répétés 35 fois pour connaître la performance minimum, moyenne, et l'écart-type.

temps requis pour évaluer le cas test. Dans le cas d'une boucle d'analyse, une évaluation peut prendre plusieurs minutes ou même plusieurs heures.

Dans le cas des fonctions analytiques, les avantages et les désavantages sont inversés par rapport aux fonction réelles. Les fonctions analytiques que nous utiliserons comme cas tests sont rapides à évaluer et il est facile de les modifier pour étudier des conditions particulières. Toutefois, il est nécessaire d'assurer la vraisemblance entre les fonctions analytiques et les fonctions réelles que l'on souhaite approximer.

Dans notre cas, les fonctions proviennent d'une boucle d'analyse CFD d'une aube avant-directrice de turbine Francis. Nous avons mis en place cette boucle d'analyse et nous avons effectué sa vérification. À partir de la réponse de cette boucle d'analyse, nous avons développé des fonctions analytiques représentatives.

Dans un premier temps, on analyse les surfaces de réponses de la boucle d'analyse pour

ensuite les approximer avec des fonctions analytiques. Une étape, qui à du être complétée au préalable à la création des cas tests, est la vérification de la boucle d'analyse que l'on retrouve dans l'annexe I.

3.6.1 Création de cas tests analytiques

Le choix du type de fonction analytique utilisé pour représenter la réponse d'une boucle d'analyse se fait par essai – erreur. Toutefois, quelques critères doivent être respectés pour assurer une certaine flexibilité des cas tests. Entre autres, l'ajout et la suppression du bruit doit se faire facilement. La complexité doit être variable et l'ajout de dimension aux cas tests doit être évident.

Une question se pose à cette étape : Comment pouvons-nous justifier l'utilisation de cette seule boucle d'analyse pour créer des cas tests représentant l'ensemble de toutes les boucles d'analyses en CFD? Cette induction par inférence, comme toutes autres, pose le problème de la généralisation d'une théorie créée à partir de cas particuliers. La justification de cette généralisation doit se faire par le biais des prémisses. Reformuler la question rend ces prémisses plus évidents : De combien diffèrent les surfaces de réponses d'une boucle d'analyse à une autre? La similitude que l'on recherche est principalement celle de la continuité et du bruit. On propose alors quelques prémisses assurant une certaine similitude entre les réponses de différentes boucles d'analyse. Or avant de proposer ces prémisses, deux suppositions doivent être explicitées. On suppose que les réponses des boucles d'analyses représentent généralement une valeur globale de la modélisation, soit la différence de pression entre l'entrée et la sortie par exemple. On suppose aussi que le régime est turbulent pleinement développé. La première prémisse propose que toutes les réponses de boucles d'analyse représentant une valeur globale et dont le régime est turbulent pleinement développée auront la même continuité. La deuxième prémisse propose que le bruit peut être dissocié de la réponse.

Les cas tests développés ci-après seront, sous les deux prémisses énumérées, représentatifs d'une certaine classe de réponses de boucles d'analyses.

Étude de la réponse de la boucle d'analyse

L'aube modélisée en deux dimensions dans la boucle d'analyse (voir l'annexe I) est soumise à un écoulement turbulent en régime stationnaire. La partie que l'on souhaite optimiser est le bord d'attaque de l'aube. La NURBS définissant la géométrie de l'aube est fixée pour l'intrados, l'extrados et le bord de fuite. Les cinq points de contrôle définissant le bord d'attaque peuvent varier dans les deux dimensions, soit X et Y. Il est aussi possible de varier leurs poids W. La boucle d'analyse a donc 15 degrés de liberté et retourne la différence de pression entre l'amont et l'aval de l'aube.

La forme du bord d'attaque de l'aube est manipulée en déplaçant les cinq points de contrôle de la NURBS. Notons que pour faciliter la visualisation, seulement deux degrés de libertés sont choisis pour créer les surfaces, notamment le déplacement en X et en Y du troisième point. Ceci permet de représenter la surface de réponse en $3D$. La figure 3.12 montre la position des points de contrôle. Les coordonnées sont manipulées de sorte que le point se retrouve à l'extérieur de l'ensemble des solutions réalisables. Cet ensemble est défini par la contrainte du rayon de courbure du bord d'attaque et la longueur de corde de l'aube. Le bord d'attaque ne doit pas avoir un rayon plus petit qu'un certain minimum et la longueur de corde ne doit pas dépasser un certain maximum. Les bornes des points de contrôle ont été choisies de sorte que la NURBS ne créé pas de boucle. Ces limites sont définies par les valeurs aux coins du tableau 3.1. Les figures 3.13 et 3.14 montrent la géométrie de l'aube pour les valeurs limites du tableau. Deux surfaces de réponses sont créées pour deux positions du point quatre. Les géométries de l'aube résultant de ce déplacement ne diffèrent pas énormément afin de modéliser des formes qui ne sont pas trop irréalistes.

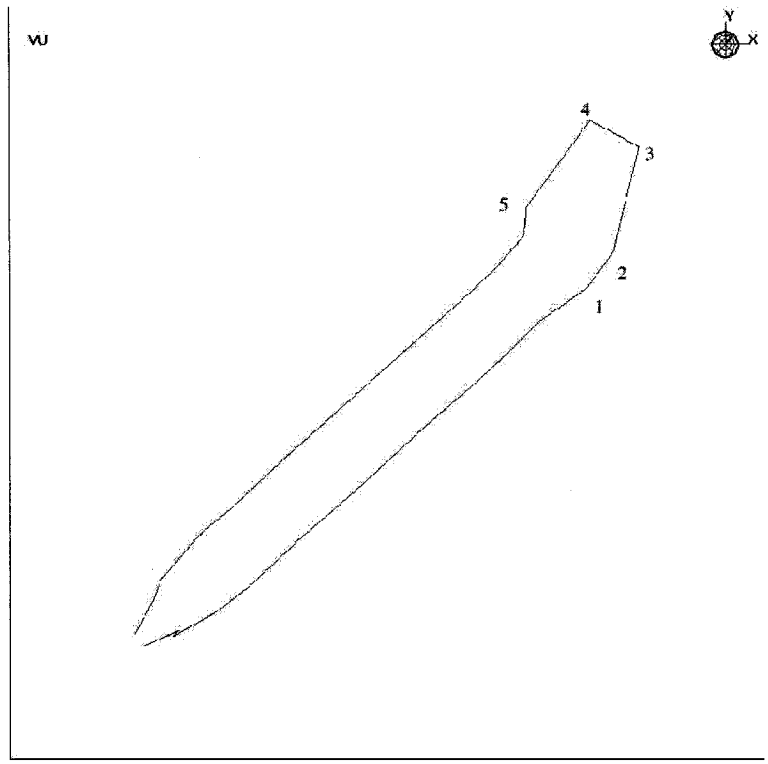
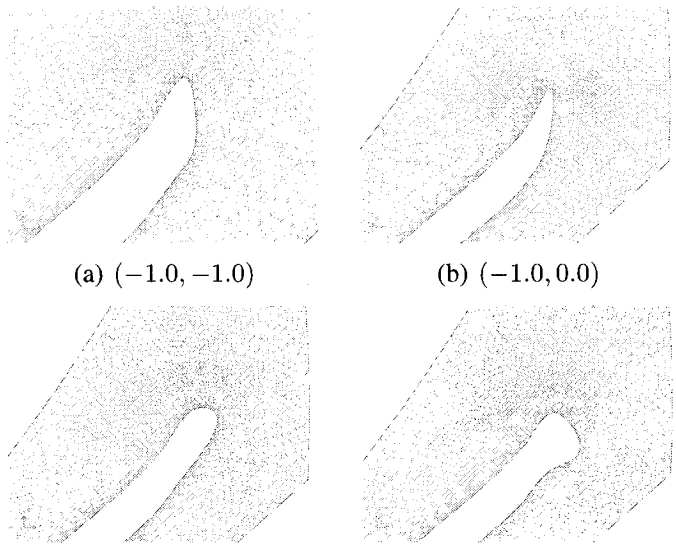


Figure 3.12 Les points de contrôles sujets à la manipulation

Tableau 3.1 matrice des coordonnées (x, y) normalisées pour le point 3

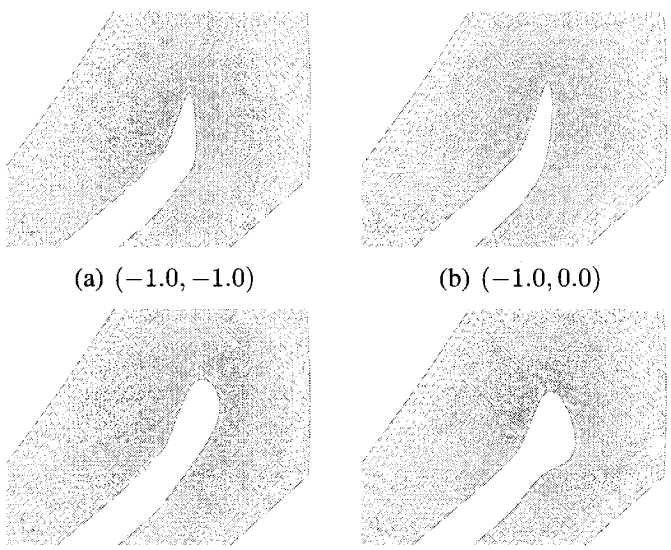
$(-1.0, -1.0)$	$(-1.0, -0.9)$	$\dots$	$(-1.0, -0.1)$	$(-1.0, 0.0)$
$(-0.9, -1.0)$	$(-0.9, -0.9)$	$\dots$	$(-0.9, -0.1)$	$(-0.9, 0.0)$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$
$(0.9, -1.0)$	$(0.9, -0.9)$	$\dots$	$(0.9, -0.1)$	$(0.9, 0.0)$
$(1.0, -1.0)$	$(1.0, -0.9)$	$\dots$	$(1.0, -0.1)$	$(1.0, 0.0)$



(a) $(-1.0, -1.0)$ (b) $(-1.0, 0.0)$

(c) $(1.0, 0.0)$ (d) $(1.0, -1.0)$

Figure 3.13 Géométrie de l'aube pour différentes coordonnées du point trois. Figure 3.15 est la surface de réponse correspondante.



(a) $(-1.0, -1.0)$ (b) $(-1.0, 0.0)$

(c) $(1.0, 0.0)$ (d) $(1.0, -1.0)$

Figure 3.14 Géométrie de l'aube pour différentes coordonnées du point trois avec déplacement du point quatre. Figure 3.16 est la surface de réponse correspondante.

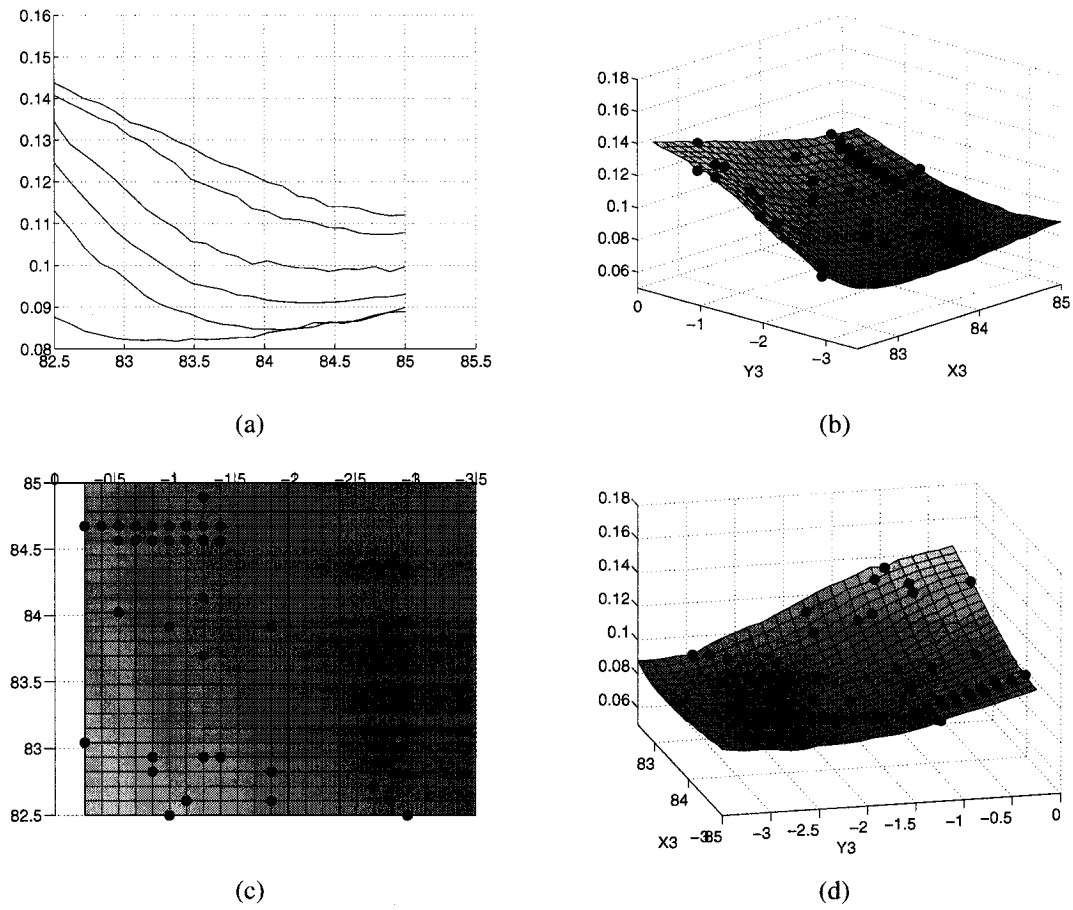


Figure 3.15 Surface de réponse obtenue en déplaçant le point trois et en gardant fixe tous les autres points aux positions optimales. Les points sur les surfaces représentent les échecs perçus pendant l'évaluation de la boucle d'analyse. (a) Une vue en coupe démontrant le bruit présent dans la surface de réponse.

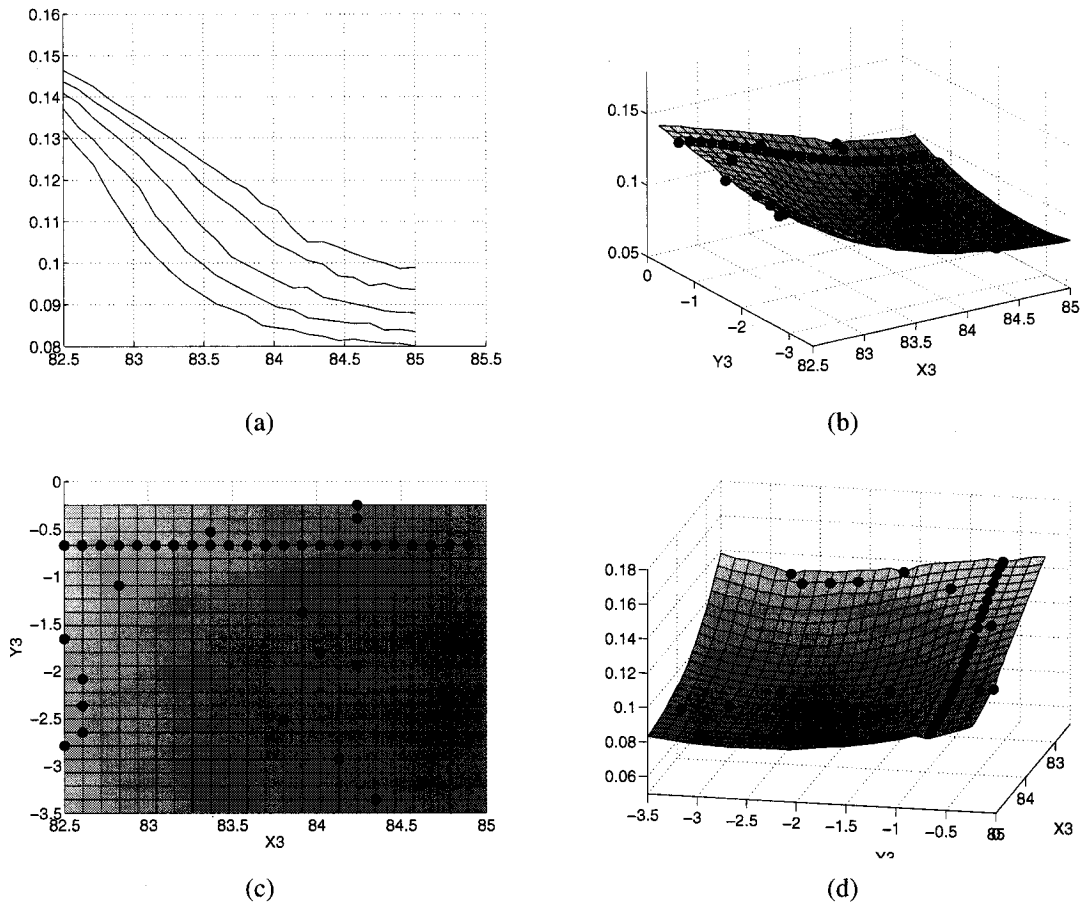
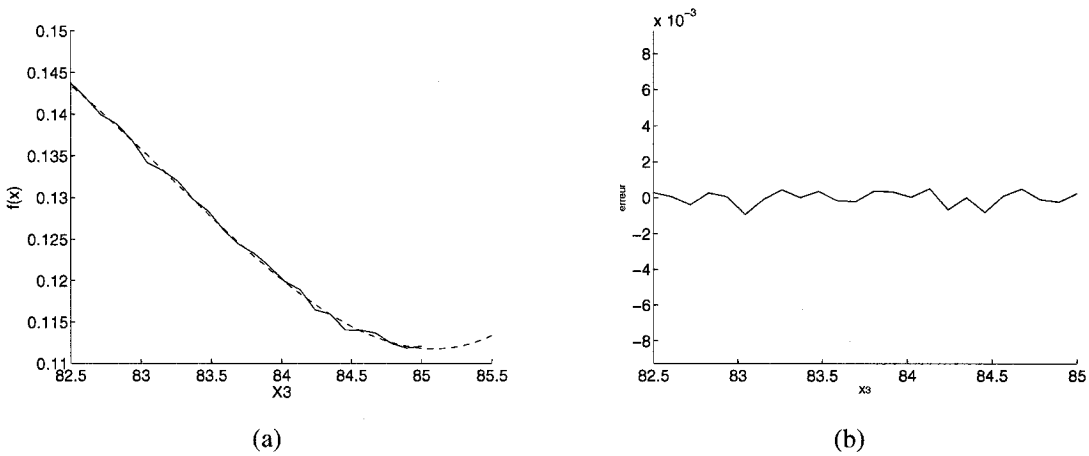


Figure 3.16 Surface de réponse obtenue en déplaçant le point trois et en gardant fixe tous les autres points aux positions optimales sauf le point quatre. Les points sur les surfaces représentent les échecs percus pendant l'évaluation de la boucle d'analyse. (a) Une vue en coup démontrant le bruit présent dans la surface de réponse.

Les cas tests

Quelques observations peuvent être faites au sujet des deux surfaces de réponse (voir figures 3.15 et 3.16). On remarque dans les deux cas que la continuité semble être au moins d'ordre 2. Il semble aussi que le bruit présent dans les réponses puisse être dissocié de la tendance moyenne, permettant ainsi de modéliser la surface de réponse par l'équation $y(x) = f(x) + \epsilon$. La figure 3.17 montre comment il est possible de dissocier le bruit de la tendance moyenne et le tableau 3.2 montre les valeurs caractéristiques du bruit de deux courbes. Finalement on remarque que la différence entre les deux surfaces de réponse des figures 3.15 et 3.16 est minime, ce qui est souhaitable.



(a) (b)

Figure 3.17 Soustraction de l'erreur pour connaître sa forme. (a) Réponse de la boucle d'analyse en ligne pleine et régression polynomiale en ligne tiretée. (b) Valeur de l'erreur.

La figure 3.18 montre une approximation analytique de la première surface de réponse.

Tableau 3.2 Valeurs recueillies de l'erreur pour deux courbes de la figure 3.15 (a). A est l'amplitude. fréq. est la fréquence. absolu est abrégé par abs. et relative est abrégé par rel.

courbe	$E[\epsilon]$	$E[\sigma]$	A abs.	A rel.	fréq. abs.	fréq. rel.
1	-1.57^{-12}	2.48^{-4}	5.72^{-4}	0.017	2.7	22.5
2	1.003^{-12}	3.91^{-4}	7.16^{-4}	0.022	3.2	26.7

Cette approximation analytique est créée à l'aide de fonctions sinusoïdales :

$$\begin{aligned} y &= A\cos(2\pi f r) + c \\ r &= \sqrt{\left(\frac{y}{b_y}b_x\right)^2 + \left(\frac{x}{b_x}b_y\right)^2} \end{aligned}$$

où f est la fréquence, A est l'amplitude, c est une constante et r est le rayon. L'utilisation d'une fonction sinusoïdale permet de modifier la complexité des cas tests en changeant la fréquence f.

La suite de cas tests en deux dimensions varie selon la fréquence, l'amplitude étant constante. Trois suites sont créées : une sans bruit et deux avec bruit. Le bruit est ajouté par l'addition d'une fonction sinusoïdale ayant une fréquence 25 fois celle du cas test et une amplitude soit 0.015 fois l'amplitude du cas test, soit de 0.03 fois l'amplitude du cas test.

En trois dimensions, la surface de réponse à une allure quasi-axisymétrique. On peut donc représenter la réponse par un produit de fonctions sinusoïdales associeés à chaque dimension :

$$y = A\sin(\pi x1)\cos(\pi x_2 + d) \tag{3.13}$$

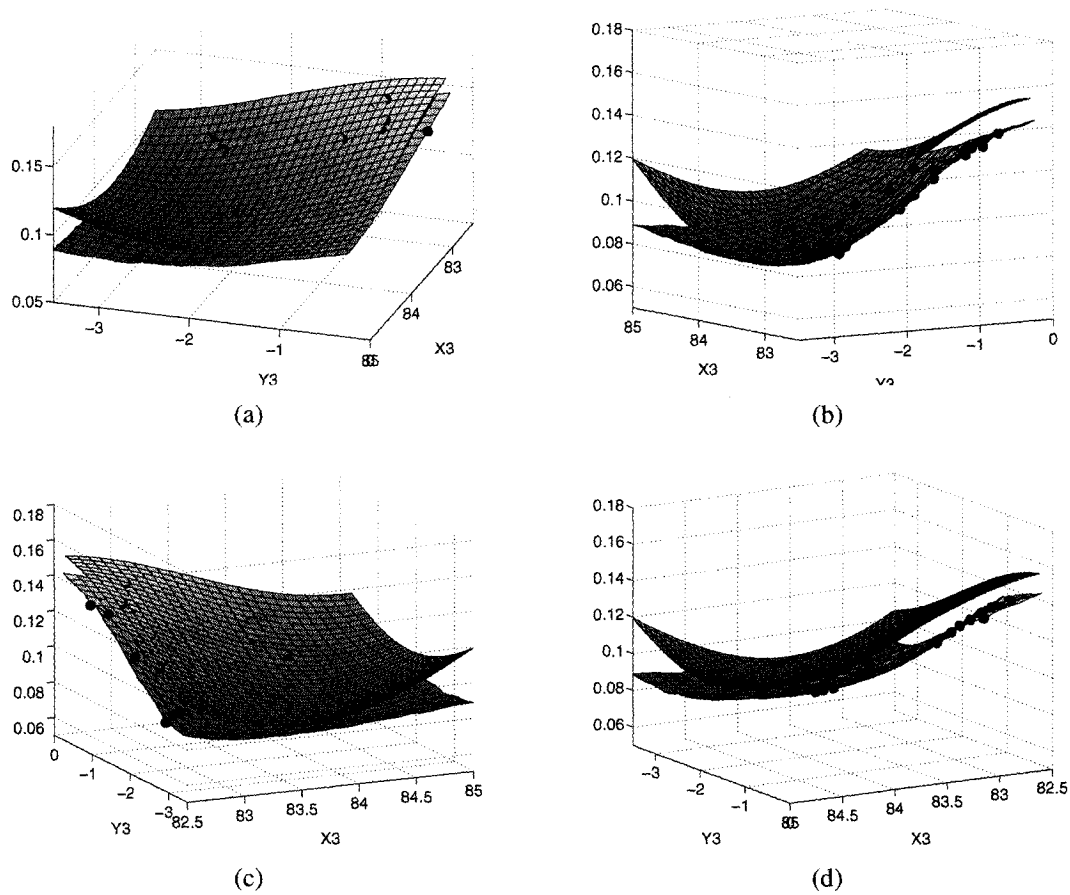


Figure 3.18 Comparaison de la surface de réponse obtenue de la boucle d'analyse et de l'approximation analytique.

où A est l'amplitude et d un décalage entre les fonctions. Il y a donc trois suites de cas tests en trois dimensions : une quasi-axisymétrique, une axisymétrique et une qui a deux plans de symmétries. Aucun bruit est ajouté à ces fonctions. Les figures 3.19 compare les cas tests ayant tous une fréquence de 1.5.

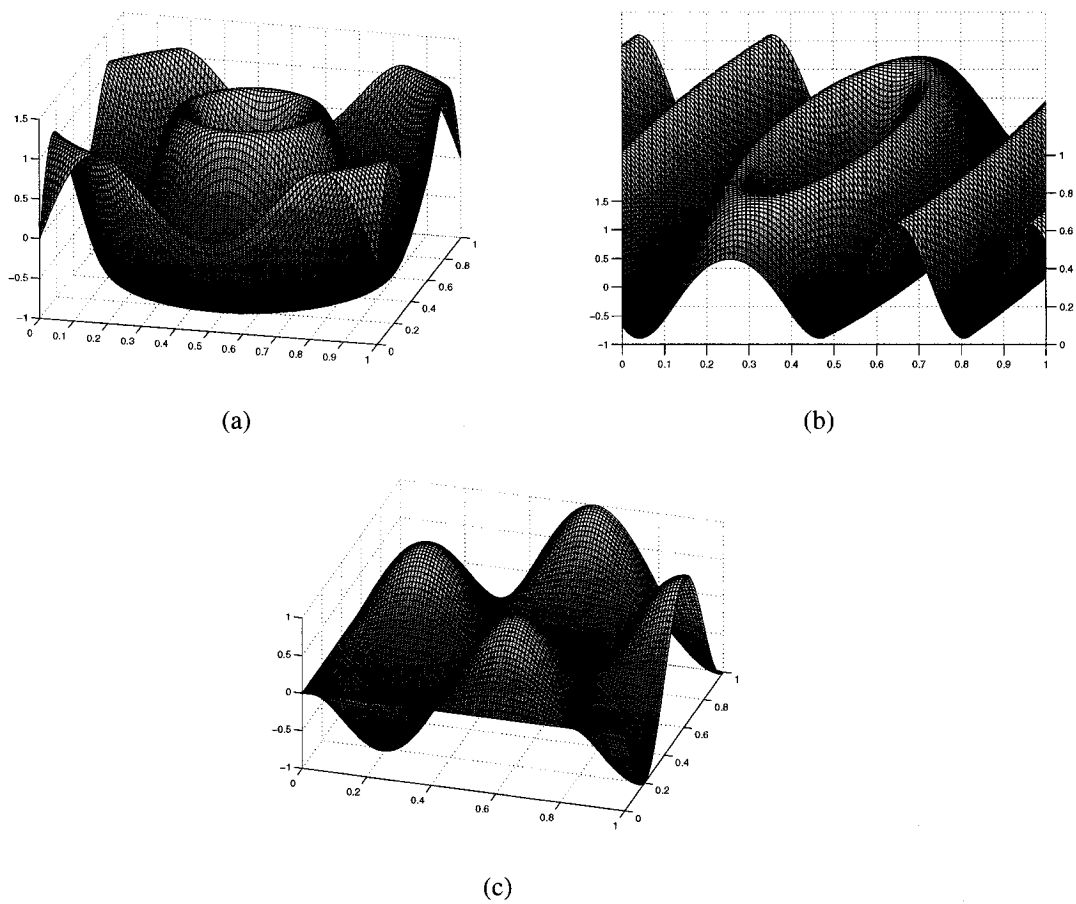


Figure 3.19 Cas tests en trois dimensions. (a) cas test aximétrique. (b) cas test quasi-aximétrique. (c) cas test avec deux plans symétriques.

Les suites de cas tests créées ici serviront à tester les fonctions d'approximations. Ils permettront de caractériser la performance de la fonction selon la complexité (la fréquence associé au sinus des cas tests). Ils permettront aussi de connaître l'influence du bruit sur cette performance. Les suites de cas tests en trois dimensions serviront à caractériser

la performance selon différente complexité. Alors qu'il serait intéressant de connaître l'influence du bruit pour des cas en trois dimensions, on se restreint à des cas tests lisses pour limiter le temps consacré au calcul.

3.7 La méthode de caractérisation

On a maintenant tout ce qu'il faut pour commencer la caractérisation d'une fonction d'approximation : les cas tests nous permettent d'étudier quelques aspects précis des fonctions ; l'échantillonnage nous donne une approche statistique non-biaisée ; le calcul de l'erreur nous permet de quantifier la performance de la fonction d'approximation. Telle que décrit au début de ce chapitre, une étude préliminaire sera entamée. Cette étude nous permettra de proposer une méthode servant à quantifier l'erreur sans faire référence à la fonction exacte. Elle nous permettra aussi de proposer une norme adaptée pour la mesure de convergence.

L'étape suivante est la sélection d'une fonction d'approximation que l'on souhaite caractériser. Le choix de cette fonction est influencé par la tendance que prend le domaine de l'optimisation multidisciplinaire en aéronautique. On retrouve dans le chapitre 4 une description approfondie de la fonction d'approximation que l'on a choisi.

CHAPITRE 4

LE KRIGEAGE

Dans ce chapitre, on introduit le krigreage. Il s'agit de la fonction d'approximation choisie à être caractérisée par la méthode développée dans le Chapitre 3. La première section discute des fonctions existantes, de leurs avantages et désavantages. La deuxième et troisième section explique l'origine et la théorie du krigeage. La section quatre explique comment celui traite l'erreur epistémique. La section cinq et six note les commentaires sur le krigeage et décrit ses variantes. La section sept décrit comment la caractérisation du krigeage sera accomplie.

4.1 Le choix d'une fonction d'approximation

Plusieurs types de fonctions d'approximations ont été introduites au Chapitre 1, notamment les régressions polynomiales, le krigeage et l'approximation baïsienne, les réseaux neuronaux et modèles à basse fidélités sont les plus connues dans le domaine de la simulation numérique. De ces fonctions, on discerne deux groupes : les fonctions paramétriques et les fonctions non-paramétriques. En théorie, une approximation paramétrée suppose que la forme que prend la fonction exacte est connue alors qu'une approximation non-paramétrée suppose que la fonction exacte peut prendre une forme arbitraire. À titre d'exemple, les régressions polynomiales, qui sont des approximations paramétrées, supposent que la fonction exacte prend la forme d'un polynôme, typiquement la forme quadratique. Les régressions polynomiales sont souvents utilisées avec des méthodes d'approximations locales telles que RSM (Response Surface Model). Le krigeage, l'approximation baïsienne et les réseaux neuronaux sont des exemples de fonc-

tions non-paramétriques.

Les modèles à basse fidélité sont généralement considérés comme une classe à part. Un modèle à basse fidélité est une représentation simplifiée de la fonction exacte. Si celle-ci est une boucle d'analyse en CFD modélisant un écoulement avec les équations de Navier-Stokes, il est possible de concevoir un modèle simplifié soit en utilisant un maillage grossier, soit en utilisant les équations d'Euler, soit en limitant la précision/convergence des calculs. Le premier cas est un modèle à basse résolution, le deuxième est un modèle à physique simplifiée et le troisième est un modèle à basse précision (d'après Alexandrov et Lewis (2000)). Vu la nature de ce type de d'approximation, il est difficile de généraliser sa performance. Chaque approximation est un cas particulier préparé précisément pour une fonction exacte. Pour cette raison, on ne s'intéressera pas au modèle à basse fidélité dans cette maîtrise. Un dernier mot sur ce type d'approximation ; ceux-ci peuvent être utilisées conjointement avec les autre types de fonctions d'approximations. Pour qu'un modèle simplifié interpole les points d'échantillons on peut apporter une correction sous la forme d'une interpolation de l'erreur entre la fonction exacte et le modèle à basse fidélité. Cette interpolation est souvent réalisée par une fonction d'approximation paramétrique ou non-paramétrique. Au final, la fonction exacte est approximée par le modèle à basse fidélité qui est lui même corrigé par une interpolation de l'erreur.

Parmi les avantages des fonctions d'approximations non-paramétriques, on retrouve la flexibilité. Elle peuvent être utilisées pour des approximations locales aussi bien que globales et elles sont capables d'approximer des fonctions exactes de la même nature que ceux des simulations numériques en fluides. Pour ces raisons, elle sont souvent combinées aux simulations numériques. Nous avons donc utilisé ce type de fonctions dans notre étude.

Chaque fonction d'approximation non-paramétrique a ses avantages et ses inconvénients.

Dans notre cas, le krigeage a été choisi parce qu'il présente une possibilité d'analyser la fonction exacte via la matrice de coefficients de régression et la matrice de corrélation. On remarque aussi dans la littérature que, parmi les fonctions d'approximations, le krigeage semble être souvent utilisé pour l'approximation de simulations numériques. On peut citer par exemple Srivastava *et al.* (January 14–17, 2002) qui utilisent le krigeage avec une méthode de «Surrogate Based Optimization» pour approximer des problèmes de grandes envergures tel que la conception d'un avion commercial supersonique. Jeon *et al.* (January 14–17, 2002) utilisent le krigeage avec la méthodologie de surface de réponse (provenant du domaine de la statistique) pour accélérer le processus d'optimisation de problèmes multidisciplinaires. Koch *et al.* (2002) utilisent aussi le kirgeage pour accélérer l'optimisation de problèmes multidisciplinaires. Chung et Alonso (January 14–17, 2002) utilisent une version plus générale du krigeage, soit le co-krigeage, pour incorporer l'information des gradients provenant de problèmes à grandes dimensions. Ces mêmes auteurs, Chung et Alonso (2000), développent aussi une méthode pour le krigeage qui utilise des fonctions de mérites pour choisir le prochain point dans l'échantillon.

4.2 Les origines du krigeage

Le krigeage a ses origines dans la géostatistique. Le nom krigeage ou *kriging* en anglais vient de Daniel G. Krige, un géostatisticien Sud Africain. Il développa en 1950 une méthode permettant de connaître la distribution de minerai à partir d'un échantillonnage. Krige conçut alors une méthode qui diffère fondamentalement de l'approche classique. L'approche classique suppose que la distribution du minerai est aléatoire et peut-être représentée par une fonction de distribution probabiliste. Au contraire, Krige suppose que la distribution du minerai est une fonction déterministe. Sa méthode tient compte des caractéristiques spatiales des échantillons, permettant ainsi d'élaborer une appro-

ximation plus précise de la fonction déterministe sous-jacente. Il y a toute de même un aspect probabiliste dans le krigeage : le covariogramme. Le covariogramme et la covariance, tels qu'utilisés par Krige, font référence à un aspect probabiliste qui, tel que précisé par Matheron (1965), n'existe pas dans les problèmes déterministes.

L'incertitude que l'on retrouve dans la géostatistique ou dans la CFD diffère de celle que l'on retrouve dans les problèmes de procédés industriels. Il y a d'ailleurs deux types d'incertitudes (voir notamment Oberkampf et Helton (2004)); l'incertitude aléatoire et l'incertitude épistémique. La première incertitude est liée à la nature aléatoire de certaines variables du problème. À titre d'exemple, on retrouve ce genre d'incertitude dans les évaluations de l'entretien d'équipements et aussi dans la fabrication de produit manufacturés. Cette incertitude ne peut être éliminée. Il est seulement possible de la caractériser en multipliant le nombre d'épreuves et en la modélisant avec les théories classiques de la probabilité. L'incertitude épistémique quant à elle est liée au manque d'information et/ou à la subjectivité de celle ci. Il est possible de la minimiser en élargissant nos connaissances du problème. Par exemple, les fonctions d'approximations sont entachées d'une incertitude epistémique qui peut éventuellement être réduite en multipliant le nombre de points dans l'échantillon.

Cependant, Batill *et al.* (2000), Oberkampf *et al.* (2002) et Oberkampf et Helton (2004) insistent sur le fait que l'incertitude épistémique ne peut être parfaitement modélisée par une approche probabiliste. Notons qu'une approche probabiliste suppose que l'incertitude peut être modélisée, par exemple, par une distribution de probabilité gaussienne. Une inférence de cette ordre sur la nature de l'incertitude peut engendrer une erreur non négligeable. Matheron (1989) explique pour sa part qu'une telle supposition va belle et bien à l'encontre de la logique. Par contre, il note que, même si l'aspect probabiliste présenté dans le krigeage risque d'introduire une erreur dans l'approximation, le krigeage nous apporte tout de même une meilleure connaissance de la fonction sous-jacente.

Matheron explique en détail le principe du krigeage et la nouvelle façon d'analyser les chantiers géologiques dans son livre *La théorie des variables régionalisées et ses applications*. On retrouve dans les définitions des variables régionalisées, une similitude entre les problèmes abordés par la géostatistique et ceux abordés par la simulation numérique. Sacks *et al.* (1989) furent parmi les premiers à noter cette similitude dans leur article *Design and Analysis of Computer Experiments*. Les avantages à utiliser une méthode d'approximation basée sur le krigeage sont multiples. Il y a en fait une multitude d'articles démontrant l'application du krigeage aux simulations numériques d'écoulement de fluide et en design multidisciplinaire (e.g, Koch *et al.* (2002), Srivastava *et al.* (January 14–17, 2002), Chung et Alonso (January 14–17, 2002), Chung et Alonso (2000)).

4.3 La théorie du krigeage

Dans ce qui suit, nous allons présenter succinctement la théorie du krigeage. On va commencer tout d'abord par quelques rappels sur les méthodes des moindres carrés et des variables aléatoires. Le développement mathématique va nous amener à questionner comment le lien entre la modélisation probabiliste de l'incertitude épistémique est accompli. Par la suite on va énumérer les variantes de la méthode du krigeage utilisée dans la simulation numérique. La boite à outil DACE (Design and Analysis of Computer Experiments) développée par Lophaven *et al.* (2002) est utilisée pour tester les méthodes de krigeage.

Le krigeage est à la base une méthode des moindres carrés. On y retrouve les mêmes éléments tels que la matrice de covariance et la fonction d'interpolation polynomiale. Elle diffère de la méthode des moindres carrés par le fait qu'elle approxime l'erreur en plus d'approximer la tendance moyenne.

Notons ici que le terme dimension sous-entend la dimension de la fonction exacte. Si

par exemple une fonction exacte a deux variables indépendantes, alors la dimension du problème est deux. Les variables dépendantes sont exclues pour simplifier la notation du développement.

4.3.1 Rappels sur la méthode des moindres carrés

La méthode des moindres carrés ordinaire permet d'approximer une série de points sous la forme suivante :

$$\hat{y}(x) \approx f(x)\beta \tag{4.1}$$

$f(x)$ est un vecteur rangée de termes polynomiaux et β un vecteur colonne de coefficients de régression. Notons d'ailleurs que la valeur exacte s'écrit sous la forme

$$y(x) = f(x)\beta + z(x) \tag{4.2}$$

$y(x)$ est la valeur au point x et $z(x)$ l'erreur associée à l'approximation. La dimension du vecteur f est définie par p, le nombre de degrés de liberté de l'approximation. Dans le cas des moindres carrés ordinaires, $p = n+1$, n étant la dimension de la fonction exacte. Les points de l'échantillonnage sont alors approximés par un hyperplan. Pour être en mesure d'utiliser l'équation 4.1, on doit supposer que la moyenne est indépendante de l'erreur ou, inversement, que l'erreur est indépendante de la moyenne. Pour simplifier les calculs, on suppose aussi que la variance de l'erreur est constante et indépendante de x. Ces deux suppositions s'expriment sous la forme des équations 4.3 et 4.4 respectivement:

$$E\left[z(x)\right] = 0 \tag{4.3}$$

$$E\left[z(x)^2\right] = \sigma^2 \tag{4.4}$$

Ces suppositions portent aussi le nom de conditions de stationnarité.

L'objectif de la méthode est de trouver les valeurs des coefficients β qui minimisent l'erreur z. L'équation 4.2 est réécrite sous la forme $z = y(x) - f(x)\beta$. Avec un échantillonnage de m points, on a :

$$Z = Y - F\beta \tag{4.5}$$

où Y est un vecteur de dimension m des réponses, F une matrice $m \times u$ où $u = n(p+1)$ et Z un vecteur de dimension m des erreurs. L'erreur au carré est

$$\begin{aligned} Z^T Z &= (Y - F\beta)^T (Y - F\beta) \\ &= Y^T Y - Y^T F\beta - (F\beta)^T Y + (F\beta)^T F\beta \\ &= Y^T Y - 2\beta^T F^T Y + \beta^T F^T F\beta \end{aligned}$$

Afin de minimiser l'erreur, on cherche β tel que la dérivée du carré de l'erreur est égale à zéro :

$$\frac{dZ^T Z}{d\beta} = -2F^T Y + 2F^T F\beta = 0$$

C'est-à-dire :

$$\beta = \left[F^T F\right]^{-1} F^T Y$$

Dans le cas où la supposition $E\left[z(x)\right] = 0$ est valide mais la supposition $E\left[z(x)^2\right] = \sigma^2$ ne l'est pas, c'est-à-dire que l'amplitude de l'erreur varie en fonction de x, une normalisation doit être apportée au système d'équations. Il s'agit alors de la méthode des moindres carrées généralisée. La nouvelle supposition est $E\left[z(x)^2\right] = \sigma^2 r(x)$, où $r(x)$ est la corrélation entre le point x et tout le domaine. Avec un échantillon de taille m, on

peut réécrire la supposition sous la forme $Z^T Z = \sigma^2 R$, où R est la matrice carrée de corrélation des points de l'échantillonnage. Notons que si R est une matrice identité, on retrouve le cas des moindres carrées ordinaires. Dans le cas où R est une matrice diagonale, la variance change selon x mais il n'y a pas de corrélation. R est par définition non-singulière et définie positive car σR est la covariance de l'erreur. Il existe donc une matrice K qui a la propriété $K^T K = KK = R$. Cette matrice nous permet de faire un changement de variable

$$V = K^{-1}Y \qquad Q = K^{-1}F \qquad G = K^{-1}Z$$

Le nouveau système d'équation est $V = Q\beta + G$. Cette nouvelle erreur respecte maintenant les suppositions des moindre carrés ordinaires, soit $E[G] = 0$ et $G^T G = \sigma^2 I$. La preuve détaillée de ces observations est donnée par Myers *et al.* (2002). Il est maintenant possible de procéder comme auparavant pour trouver les valeurs de β. L'erreur au carré est

$$\begin{aligned} G^T G &= Z^T K^{-1} K^{-1} Z \\ &= (Y - F\beta)^T R^{-1} (Y - F\beta) \\ &= Y^T R^{-1} Y - 2\beta^T F^T R^{-1} Y + \beta^T F^T R^{-1} F\beta \end{aligned} \tag{4.6}$$

En posant la dérivée de cette équation à zéro on obtient

$$\frac{dG^T G}{d\beta} = -2F^T R^{-1} Y + 2F^T R^{-1} F\beta = 0$$

d'où

$$\beta = \left[F^T R^{-1} F\right]^{-1} F^T R^{-1} Y \tag{4.7}$$

Notons que la méthode des moindres carrés est interpolante quand il y a autant de points

échantillonnés qu'il y a de coefficients β; soit quand $m = p$. Notons aussi qu'il est possible d'approximer les points par autre chose qu'un hyperplan. On peut l'approximer par un plan à valeur constante, soit $p = 1$, ou par une forme quadratique, soit $p = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$. On peut aussi l'approximer par d'autres formes que des régressions polynomiales. À titre d'exemple, le modèle linéaire s'écrit :

$$y \approx \beta_o + \beta_1 \sin \frac{2\pi x}{12} + \beta_2 \cos \frac{2\pi x}{12}$$

Notons aussi que de l'équation 4.6 découle la variance du procédé, soit

$$\sigma^2 = \frac{1}{m} (Y - F\beta)^T R^{-1} (Y - F\beta) \tag{4.8}$$

Cette variance correspond à l'estimé du maximum de vraisemblance selon l'approche bayesienne.

4.3.2 Le krigeage

Le krigeage décrit ci-dessous est celui de la régression avec krigeage de l'erreur. Le développement des équations ci-dessous est tiré de Matheron (1970) et Lophaven *et al.* (2002). Notons avant tout que l'on normalise les données pour permettre un meilleur conditionnement de matrice. On a entre autre

$$\begin{aligned} X_{:,j} &= \left(\overline{X}_{:,j} - \mu\left(\overline{X}_{:,j}\right)\right) / \sigma\left(\overline{X}_{:,j}\right), \quad j = 1, \ldots, n \\ Y &= \left(\overline{Y} - \mu\left(\overline{Y}\right)\right) / \sigma\left(\overline{Y}\right) \end{aligned}$$

où X est une matrice $m \times n$ normalisée de l'échantillonnage et par définition $x_j = X_{:,j}$ est un point normalisé dans le domaine de travail. Notons que la nomenclature $X_{:,j}$ veut dire toutes les valeurs dans la colonne j et $X_{j,:}$ veut dire toutes les valeurs dans la rangée j. $\overline{X}$ est la matrice de l'échantillonnage non-normalisée. Dans la section précédente, on a cherché à minimiser l'erreur $z(x)$. Le krigeage diffère de la méthode des moindres carrés généralisée par le fait que l'on n'utilise pas l'erreur comme fonction coût mais plutôt comme partie intégrale de la fonction coût. Il est alors nécessaire de définir une autre erreur, celle qui servira de fonction coût. Dans cette optique, on pose

$$\hat{y}(x) = c^T Y \tag{4.9}$$

où $\hat{y}$ est l'approximation, définie par une combinaison linéaire entre Y, le vecteur colonne de réponses, et $c(x) \in \mathbb{R}^m$. On peut noter que, déjà à ce stade, le krigeage se veut une méthode qui interpole tous les points de l'échantillonnage. Notons que les conditions de stationnarité supposées auparavant, c'est-à-dire $E\left[z(x)\right] = 0$ et $E\left[z(x)^2\right] = \sigma^2$, sont cruciales au développement du krigeage. L'erreur prend la forme

$$\begin{aligned} e &= \hat{y}(x) - y(x) \\ &= c^T Y - y(x) \\ &= c^T \left(F\beta + Z\right) - f(x)\beta + z(x) \\ &= \left(c^T F - f(x)\right)\beta + c^T Z - z(x) \end{aligned}$$

Pour que l'approximation ne soit pas biaisée, on impose que la tendance du polynôme des moindres carrés soit la même que celle de la valeur exacte. Autrement dit,

$$c^T F = f(x) \tag{4.10}$$

L'erreur est maintenant $e = c^T Z - z(x)$. Le carré de l'erreur est donc

$$\begin{aligned} e^T e &= \left[c^T Z - z(x)\right]^T \left[c^T Z - z(x)\right] \\ &= \left(c^T Z\right)^T c^T Z - \left(c^T Z\right)^T z(x) - z(x)^T c^T Z + z(x)^2 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Sachant que $z(x)$ est un scalaire, $z(x) = z(x)^T$, l'équation se simplifie à

$$e^T e = c^T Z Z^T c - 2c^T Z z(x) + z(x)^2$$

Les suppositions données aux équations 4.3 et 4.4 justifient les trois énoncés suivants. Le terme ZZ^T est la matrice de covariance de taille $m \times m$. Le terme $Zz(x)$ est la covariance du point x par rapport à tout le domaine, soit $Zz(x) = \sigma^2 r(x)$. Le terme $z(x)^2$ est la variance au point x, soit $z(x)^2 = \sigma^2$. Les détails de la matrice R et du vecteur $r(x)$ sont donnés dans la section suivante. On réécrit l'équation précédente sous la forme

$$e^T e = \sigma^2 \left(c^T R c - 2c^T r(x) + 1\right)$$

La condition imposée en 4.10 et l'équation ci-dessus sont combinées pour donner le lagrangien :

$$L(c, \lambda) = \sigma^2 \left(c^T R c - 2c^T r(x) + 1\right) - \lambda \left(c^T F - f(x)\right) \tag{4.12}$$

Afin de minimiser l'erreur tout en vérifiant la condition 4.10, on écrit le gradient du lagrangien :

$$\frac{dL(c, \lambda)}{dc} = \sigma^2 \left(2Rc - 2r(x)\right) - \lambda F = 0 \tag{4.13}$$

On a maintenant un système à deux équations, soit 4.13 et 4.10. Les étapes suivantes, que l'on retrouve dans l'annexe III, sont des manipulations d'équations pour avoir au final, l'équation suivante :

$$\hat{y} = f(x)^T\beta + r(x)^T R^{-1}\left(Y - F\beta\right) \tag{4.14}$$

L'équation 4.14 est l'approximation de krigeage pour les points dans le vecteur Y. On peut démontrer en substituant x par x_i, que $\hat{y}$ interpole un point de l'échantillon dont la valeur est connue. Dans ce cas, $r(x_i) = R_{i,:}$ la ième rangée de la matrice R et le produit $R_{i,:}^T R^{-1} = e_i$ est la ième colonne de la matrice identité. On a donc

$$\begin{aligned}\hat{y}(x_i) &= f(x_i)^T\beta + e_i^T\left(Y - F\beta\right)\\ &= f(x_i)^T\beta + y_i - F_{i,:}\beta\\ &= y_i\end{aligned}$$

La variance de krigeage est connue en substituant dans l'équation 4.11 la valeur de $c(x)$ trouvée ci-dessus. On a donc

$$e^T e = \sigma^2\left(1 + \tilde{\lambda}^T F^T R^{-1} F\tilde{\lambda} - r(x)^T R^{-1} r(x)\right)$$

En théorie, tous les termes de l'équation 4.14 sont connus à l'exception de R et de $r(x)$ (β est calculé à l'aide de l'équation 4.7 et σ^2 est approximée par l'équation 4.8) Ces deux informations découlent de la covariance et du covariogramme. La section suivante discute de leurs définitions mathématiques et des complications que peuvent poser celles-ci lorsqu'elles sont appliquées à l'approximation de simulations numériques.

4.4 La modélisation de l'incertitude épistémique

4.4.1 Rappels sur les procédés stochastiques et les variables aléatoires

Notons $S(a)$ un procédé stochastique et A un ensemble de variables aléatoires dans l'espace $\mathbb{R}^d$. On pose $A = \left\{S(a) \in \mathbb{R}^d, \forall a \in \mathbb{R}^n\right\}$ dans le cas continu et $A = \left\{S(a_i) \in \mathbb{R}^d; i = 1 \ldots m\right\}$ dans le cas où a est discret. Un cas particulier de cette notation est quand $d = 1$, c'est-à-dire que $S(a)$ est un scalaire associé au vecteur a. Notons aussi la probabilité $p(a)$ que $S(a)$ soit réalisé. La fonction de probabilité a la propriété de sommation

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(a)da = 1 \qquad\qquad \sum_{i=1}^{\infty} p(a_i) = 1$$

pour le cas continu et discret respectivement. La valeur moyenne (ou l'espérance) que prend A dans le cas continu et discret sont

$$\mu = E\left[A\right] = \int_{-\infty}^{\infty} S(a)p(a)da \qquad\qquad \mu = E\left[A\right] = \sum_{i=1}^{\infty} S(a_i)p(a_i)$$

Dans le contexte du krigeage, le procédé stochastique $S(a)$ est propre à un espace du domaine de travail, typiquement à un point dans l'espace. Les échantillons a associés à $S(a)$ peuvent être prélevés au même endroit mais jamais au même temps. Dans le cas ou le domaine serait, par exemple, de dimension deux, il serait possible de tirer plusieurs échantillons du genre $a(x_1, x_2, t)$ où les valeurs de x_1 et $x_2$seraient fixes et t serait soit l'index des échantillons a ou le temps auquel l'échantillon a est cueilli. Rappelons que dans le cas d'un procédé stochastique, l'incertitude aléatoire prévaut et la valeur que prend $S\left(a(x,t)\right)$ à t_1 n'est pas la même que $S\left(a(x,t)\right)$ à t_2 pour x constant. À titre d'exemple, en océanographie, $S(a)$ peut prendre la forme d'une observation telle que le pourcentage d'un type de poisson. On a alors $a(x,t)$, une portion d'océan prise au temps

t et $S(a)$, la valeur aléatoire que prend le pourcentage de poisson. Il arrive, parfois, que A et $S(a)$ soit confondus de sorte que A soit appelé le procédé stochastique. Cette confusion sera évitée dans la description qui suit. Il se peut tout de même que A soit appelé variable aléatoire au lieu d'ensemble de variables aléatoires.

4.4.2 Rappels sur la covariance et le covariogramme

Quand les conditions de stationnarité faibles sont vérifiées, soit $E[z] = 0$ et $E[z^T z] = \sigma^2$, l'équation de la covariance s'écrit

$$Cov\,[AB] = E\,[(S_A(a) - \mu_A)\,(S_B(b) - \mu_B)] \tag{4.15}$$

Les ensembles A et B sont associés chacun à un point fixe dans l'espace de travail et μ_A, μ_B sont les espérances des ensembles A et B. Ici on fait la distinction entre les procédés stochastiques : celui de la variable aléatoire A n'est pas nécessairement le même que celui de la variable aléatoire B. Dans la condition où $A = B$, on a :

$$\begin{aligned}\sigma_A &= E\,[(S_A(a) - \mu_A)\,(S_A(a) - \mu_A)] \\ &= E\,\left[(S_A(a) - \mu_A)^2\right]\end{aligned}$$

soit la variance de A. La covariance entre deux variables aléatoires peut dépendre de plusieurs facteurs inconnus mais il est possible, quand les conditions de stationnarité sont vérifiées, de faire un lien entre la covariance de deux points et la distance qui les sépare.Le covariogramme est une représentation graphique de la covariance en fonction de la distance. À titre d'exemple, notons les covariances $Cov(AB) = 0.6$, $Cov(AC) = 0.55$ et $Cov(BC) = 0.75$. De la figure 4.1 on s'aperçoit que $\overline{bc} < \overline{ab} < \overline{ac}$. Le covariogramme de ces valeurs est représenté par le graphique de la figure 4.2 où

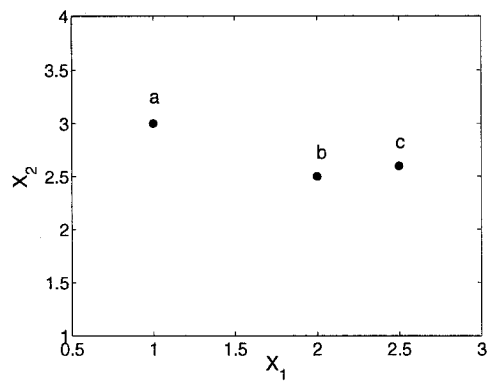


Figure 4.1 Points où les ensembles A, B et C sont échantillonnés.

h est la distance entre les points. Typiquement le covariogramme est représenté par un graphique tel que celui de la figure 4.3. Dans un cas pareil, il est possible d'approximer le covariogramme par une équation analytique. Celle-ci permet de connaître la covariance entre un point inconnu et tous les autres points dans le domaine sans avoir à échantillonner à plusieurs reprises ce point inconnu.

Le covariogramme peut être normalisé pour varier entre zéro et un avec h variant entre zéro et deux. D'ailleurs, la normalisation décrite au début de la section sur le krigeage assure la normalisation du covariogramme. Une régression paramétrique du covariogramme normalisé est appelée la corrélation. Les types de corrélations les plus utilisés sont présentés dans le tableau 4.1. On retrouve plusieurs autres types de fonctions de corrélations dans Lophaven *et al.* (2002).

Notons que si la distance h est euclidienne, il s'agit alors d'un covariogramme isotrope. Si la variation de la covariance dépend de la direction en plus d'être dépendante de la distance h, la covariance est anisotrope. Dans un tel cas, on crée un covariogramme par dimension.

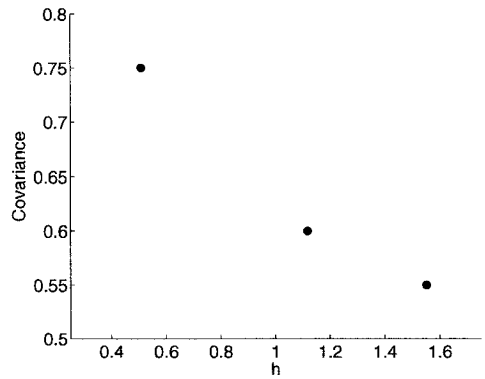


Figure 4.2 Covariogramme pour les variables aléatoires A, B et C.

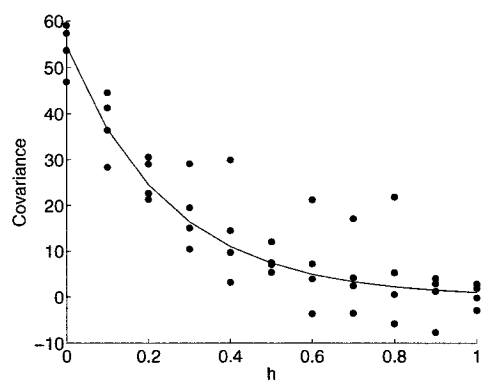


Figure 4.3 Covariogramme typique avec régression.

Tableau 4.1 Tableau des équations les plus utilisées pour la corrélation. Le paramètre θ est le coefficient de régression.

nom	$\mathcal{R}(\theta, h_k)$
exponentielle	$e^{-\theta_k \lvert h_k \rvert}$
exponentielle gaussienne	$e^{\left(-\theta_k \lvert h_k \rvert^{\theta_{n+1}}\right)}, \quad 0 < \theta_{n+1} < 2$
gaussienne	$e^{\left(-\theta_k h_k^2\right)}$
linéaire	$\max\left(0, 1 - \theta \lvert h_k \rvert\right)$

4.4.3 La matrice R et le vecteur r

La matrice de corrélation R et le vecteur de corrélation r peuvent être calculés soit directement avec l'équation de la covariance, soit en utilisant la régression du covariogramme. Pour des raisons qui seront mises en évidence dans le prochain paragraphe, la régression, ou la fonction de corrélation, est utilisée dans le krigeage. La matrice et le vecteur de corrélation sont alors

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \prod_{k=1}^{n} \mathcal{R}(\theta_k X_{ik} X_{jk}), \quad i,j = 1,\ldots,m \\ r(w) &= \prod_{k=1}^{n} \mathcal{R}(\theta_k X_{ik} w_k), \quad i = 1,\ldots,m \end{aligned}$$

où w est le point dont la valeur est inconnue. Cette forme de corrélation tient compte de l'anisotropie que peut avoir les données.

Pour être en mesure de créer le covariogramme et ainsi connaître la fonction de corrélation telle que décrite ci-dessus, il serait nécessaire d'échantillonner les points à de multiple reprises pour connaître la valeur moyenne de la variable aléatoire associée à chaque point. Il serait nécessaire, par exemple, d'échantillonner une dizaine de fois le point a, une dizaine de fois le point b et une dizaine de fois le point c de la figure 4.1. Or cette approche ne s'avère pas pratique quand le nombre de points échantillonnés est grand. Elle s'avère impossible quand la fonction sous-jacente est déterministe : un nombre infini de tirage au même point donnera toujours la même réponse. Dans le cas du krigeage tel que décrit ci-dessus, une solution mathématique se présente. Un deuxième coup-d'œil sur les équations pour R, β et σ démontre qu'elles sont toutes dépendantes

de θ. Sacks *et al.* (1989) proposent le programme

$$\min_{\theta} |R|^{\frac{1}{m}} \sigma^2$$

exprimant ainsi la relation qu'il y a entre les points de l'échantillonnage et les paramètres θ. Le terme $|R|$ est le déterminant de la matrice de corrélation. La solution de ce programme donne une interpolation qui est un compromis entre la solution optimale pour la régression $f(x)\beta$ et la déviation minimale locale requise pour assurer l'interpolation.

4.5 Commentaires sur le krigeage

4.5.1 Le choix de régression et corrélation

Le krigeage, comme plusieurs autres méthodes, est une méthode dite non-paramétrique. Il y a tout de même une notion de paramétrisation dans la régression et la corrélation. Il est nécessaire de supposer que la fonction sous-jacente peut être approximée globalement par une certaine régression et localement par une certaine corrélation. À la limite, le choix d'une régression et d'une corrélation n'influence que la taille de l'échantillonnage requis pour atteindre la précision désirée. Mais ceci va à l'encontre du principe de l'approximation : minimiser le nombre d'évaluations de la fonction exacte.

À moins de connaître a priori la tendance moyenne globale et la tendance moyenne locale de la fonction exacte, il est impossible de justifier le choix d'une type de régression et de corrélation. Le choix peut se faire en supposant le cas le plus simple, ce que semblent faire plusieurs auteurs, ou alors utiliser une approche comparative. Il s'agit de créer plusieurs approximations, chacune utilisant une combinaison unique de régression et de corrélation. La convergence des approximations vers un état stable est observée

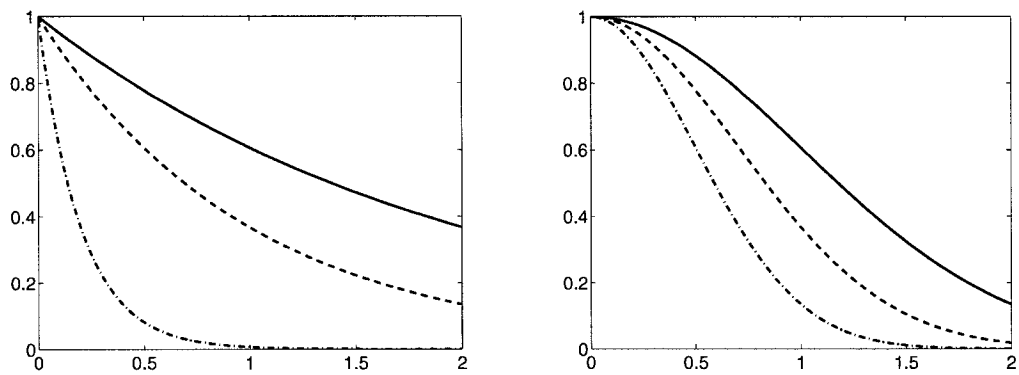
et une approximation est éliminée quand on juge qu'elle nécessiterait un plus grand échantillonnage que les autres.

4.5.2 Les fonctions de corrélations

Il existe une multitude de fonctions de corrélations ayant chacune un comportement unique mais, quelques traits communs peuvent être dicernés. Entre autres, le comportement de la fonction quand la corrélation tend vers un et quand elle tend vers zéro sont deux aspect importants. Ces comportements sont illustrés par la figure 4.4. À des fins d'interprétation, notons qu'il y a un lien direct entre la corrélation et la dérivée de l'erreur calculée par différences finies. Si on interprète la covariance comme la dérivée où le pas de discrétisation est variable, le covariogramme serait alors une représentation de l'amplitude moyenne du gradient en fonction du pas de discrétisation. Rappelons que la covariance représente la variation de l'erreur z : la différence entre l'approximation $f(x)\beta$ et les points de l'échantillon. Dans le cas particulier où $f(x)\beta = constante$, la covariance serait représentative de la dérivée de la fonction exacte. Ce point de vue permet de mieux interpréter la fonction de corrélation.

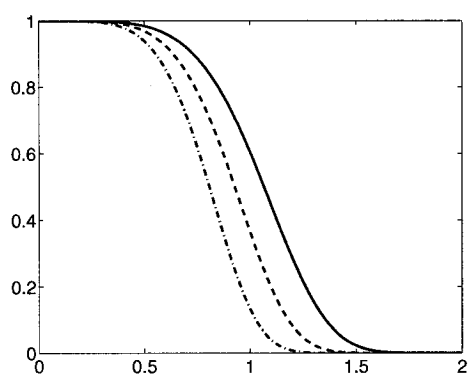
L'analyse des fonctions de corrélations sera limitée aux quatre fonctions présentées dans le tableau 4.1. On observe deux comportements de la fonction de corrélation à l'origine. Soit que la fonction est asymptotique à zéro comme c'est le cas pour le modèle exponentiel et le modèle linéaire, soit qu'elle prend une valeur quasi-constante tel que c'est le cas pour le modèle gaussien et le modèle gaussien-exponentiel. Dans le premier cas, ce comportement signifierait que l'erreur est discontinu. Dans le deuxième cas, l'erreur serait continu.

Il y a deux types de comportement quand $h \longrightarrow 2$, soit que la fonction de corrélation devient asymptotique comme c'est le cas pour les courbes du graphique (c) de la figure

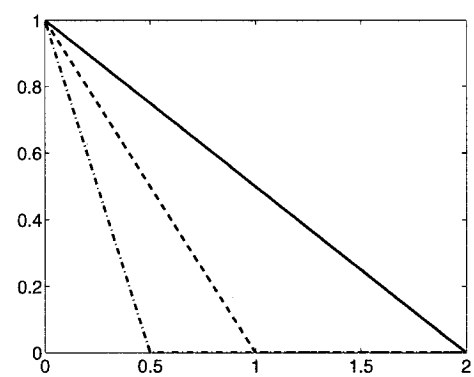


(a) exponentiel

(b) gaussienne



(c) gaussienne exp. $\theta_{n+1} = 5$



(d) linéaire

Figure 4.4 Comportement des fonctions de corrélations $\mathcal{R}(\theta, h_k)$ pour les valeurs $\theta = 0.5, \quad 1, \quad 2$ avec $0 \leq h \leq 2$.

4.4, soit qu'elle ne tend pas vers zéro comme c'est le cas des courbes à lignes tiretées et à lignes pleines des graphiques (a) et (b). Le premier cas signifie que l'erreur a une portée locale. Le deuxième cas signifie que la corrélation a une portée globale : elle prend la place de la régression. Il se peut, dans ce deuxième cas, que la régression globale ne satisfasse pas les conditions de stationnarité : elle n'approximerait pas bien la tendance moyenne de la fonction exacte. Dans le cas où la fonction de corrélation est asymptotique quand $h \longrightarrow 2$, deux scénarios se présentent : soit la transition vers une valeur asymptotique est continue, soit elle ne l'est pas. Dans le cas du modèle linéaire, la transition n'est pas continue. On peut interpréter ceci comme si l'erreur est une fonction périodique à fréquence constante. Dans le cas où la transition est continue, l'erreur est beaucoup plus complexes.

4.5.3 L'effet pépite

Un phénomène souvent discuté dans la littérature de la géostatistique mais qui semble être inconnu dans la modélisation numérique est l'effet pépite. Ce phénomène est lié aux volumes des échantillons et la taille du minerai que l'on observe. Admettant un minérai de taille A et des échantillons de sol de volume B. Quand $A \ll B$, la variation de la concentration du minerai dans l'échantillon en fonction de h sera plutôt continue. Mais quand $A \sim B$, on n'observera pas une variation continue de la concentration. Plus précisément, on observe un comportement aléatoire de la concentration. Il est alors impossible de connaître la corrélation à ce niveau et le covariogramme serait indéfini. Ce problème est solutionné, en théorie, en assurant que le volume B soit bien supérieur à la taille A. Ceci a pour effet d'assurer que la concentration dans l'échantillon soit bien représentative. Ceci a aussi comme effet de limiter la distance h minimale que l'on peut échantillonner car il ne peut y avoir deux échantillons qui partagent le même volume, soit $B_1 \bigcap B_2 = \emptyset$ où B_1 et B_2 sont les volumes de deux échantillons. La figure 4.5 démontre ce à quoi ressemble les échantillons avec effets pépites.

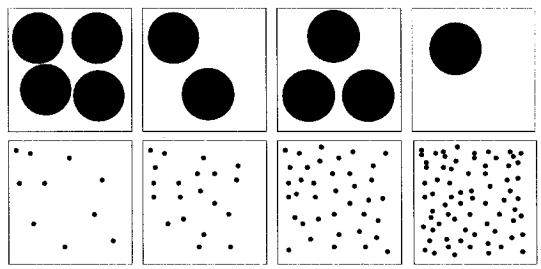


Figure 4.5 Illustration de l'effet pépite. La première rangée montre le cas $A \sim B$ et la deuxième rangée montre le cas $A \ll B$.

Dans le cas de la simulation numérique, on n'échantillonne pas un volume mais plutôt un point. Il se peut tout de même que l'on observe des phénomènes similaires à celui de l'effet pépite. L'échantillonnage par points peut être influencé par le bruit numérique. Selon la logique décrite ci-dessus, il serait nécessaire d'échantillonner plusieurs points dans un volume B pour ensuite utiliser sa valeur moyenne pour le krigeage. Or une approche pareille serait bien trop coûteuse pour une fonction exacte telle qu'une boucle d'analyse. L'alternative est d'imposer une distance minimale à h, assurant ainsi que le bruit, ayant une certaine fréquence, ne crée pas l'effet pépite. Une alternative est de remplacer le covariogramme avec le semivariogramme. Celui-ci représente aussi bien la variation de l'erreur en fonction de h et peut modéliser l'effet pépite. Par-contre, la substitution du covariogramme par le semivariogramme nécessite une modification du développement mathématique. Cette approche n'a pas été utilisée dans ce travail.

4.5.4 L'optimisation

Ce qui fait du krigeage un calcul potentiellement lourd est l'optimisation. En partant de valeurs θ initiales, l'optimisation doit calculer la matrice R, calculer les coefficients β et calculer la valeur scalaire σ. Notons que le calcul de β nécessite l'inversion de la matrice R. Dans le cas où l'on considère l'anisotropie des données, le degré de liberté

de l'optimisation est équivalent au degré de liberté de la fonction exacte. Une étude détaillée du problème d'optimisation est présentée par Lophaven *et al.* (2002). Le krigeage étant un système d'équations analytiques, sa complexité décourage la recherche d'une solution analytique au problème d'optimisation. Lophaven *et al.* (2002) utilisent un optimiseur d'ordre zéro, un *pattern search.* Ils justifient l'utilisation de cette approche par le comportement de la fonction coût observé pour plusieurs scénarios. Ils notent pour des cas 2D (deux variables indépendantes) que la fonction ne semble pas bruitée, qu'elle n'a qu'un point optimum et ne semble pas être sensible, advenant que la matrice R soit bien conditionnée.

4.5.5 Automatisé versus manuel

Le krigeage utilisé en mécanique des fluides ou en optimisation multidisciplinaire est généralement automatisé, comme c'est le cas du krigeage développé ici. Dans d'autres domaines, par contre le krigeage est utilisé de façon plus manuelle. Ils trouvent la régression approximant au mieux l'échantillonnage, ils trouvent la fonction de corrélation approximant au mieux le covariogramme normalisé et ensuite ces deux parties sont utilisées pour faire le krigeage. Cette approche se trouve entre le krigeage simple et le krigeage universel, deux types de krigeage définis dans la section suivante. Elle s'avère particulièrement utile quand il est impossible d'augmenter le nombre d'échantillons.

4.6 Variante du krigeage

Il existe quelques variantes du krigeage que nous présentons succintement dans ce chapitre.

Le krigeage simple prend pour acquis que la tendance moyenne est bien connue. Matheron (1970) donne l'exemple $f(x)\beta = 0$ ou $f(x)\beta = cte$. Dans ce cas, il n'est pas

nécessaire d'imposer la condition donnée par les équations 4.10 et le terme de droite du lagrangien (équation 4.12) est éliminé pour donner une optimisation sans contrainte. Avec cette approche, il est toujours nécessaire d'inverser la matrice de corrélation et une optimisation sur θ doit être accomplie. Elle est aussi plus restrictive car il faut connaître explicitement les coefficients β de la régression. Si la régression n'approxime pas bien la tendance moyenne de la fonction exacte, les conditions de stationnarité ne seront pas respectées et la corrélation ne pourra pas bien représenter l'erreur.

Le krigeage universel est essentiellement identique au développement ci-dessus. Les différences sont de l'ordre de la généralisation des équations.

Le co-krigeage est une généralisation du krigeage. La corrélation définie ci-dessus ne tient compte que de l'influence de la fonction exacte par rapport à elle même. Il s'agit d'auto-corrélation. Par exemple, il peut y avoir dans un champs cultivé une relation entre la concentration de phosphore dans le sol et la densité de la luzerne au temps de la récolte. Une auto-corrélation du phosphore peut être accomplie pour estimer sa distribution dans le sol et de même pour la densité de la luzerne. S'il y a une corrélation entre les deux, il est possible de la connaître avec une corrélation croisée. En incorporant cette nouvelle information dans le krigeage, on peut améliorer la précision de l'approximation, soit celle de la luzerne, par exemple, si on utilise la corrélation de celle-ci par rapport au phosphore. Or pour que cette nouvelle information soit utile, il est nécessaire que l'échantillonnage du phosphore soit plus grand que celui de la luzerne ou qu'ils ne partagent pas les mêmes échantillons. Autrement il n'y aura aucun apport de précision à l'approximation.

Le co-krigeage est justifiable quand la fonction sous-jacente faisant le lien entre les deux fonctions exactes n'est pas connue ou très compliquée. Une relation compliquée entre deux problèmes est, par exemple, le dimensionnement d'une aile pour l'aérodynamique et le dimensionnement pour l'aéro-élasticité.

4.7 Caractérisation du krigeage

Il a été montré dans la section de la modélisation de l'incertitude qu'il est possible de choisir une régression et une corrélation quelconque. Il a été suggéré aussi, dans les commentaires, comment cette sélection peut être accomplie. Étant donné que le but ici est de connaître le comportement du krigeage pour différents scénarios, seule une combinaison de régression/corrélation sera utilisée pour tous les scénarios. La combinaison testée est celle que l'on retrouve le plus dans la littérature, soit une régression d'ordre zéro et une corrélation gaussienne.

Maintenant que le choix d'un fonction d'approximation est faite, on procède à sa caractérisation dans le chapitre suivant.

CHAPITRE 5

RÉSULTATS

Au début du chapitre 2, on a introduit le principe que l'approximation converge vers la fonction exacte. Nous avons aussi dit que nous souhaitons connaître cette convergence. Ce que l'on propose plutôt de faire ici est de déterminer le nombre de points nécessaire pour que l'approximation soit stable. À prime-à-bord, cette observation de la stabilité n'assure pas la convergence car on ne compare plus l'approximation à la fonction exacte mais plutôt à elle même. Ceci dit, on démontre tout au long de ce chapitre qu'il y a une grande corrélation entre une approximation stable et une approximation qui a convergée.

Rappelons que l'on souhaite caractériser le krigeage en utilisant des cas tests en un, deux et trois degrés de libertés conçus à l'aide de fonctions sinusoïdales. Plusieurs approximations seront faites avec des échantillonnages dont la taille des échantillons et la position des points variront.

Dans la première section, on définit ce que l'on entend par la stabilité. On décrit comment la détection de stabilité est appliquée aux cas tests à un degré de liberté et au cas tests à plus d'un degré de liberté. On termine cette section avec un exemple de détection de stabilité. Cette idée de stabilité provient d'une étude préliminaire faite sur quelques cas tests avec un et deux degrés de libertés.

La deuxième section décrit les résultats de la caractérisation du krigeage pour un, deux et trois degrés de liberté. Il y a tout au long de cette deuxième section des observations et des commentaires sur la méthode de caractérisation. Ceux-ci servent à expliquer, en partie, les résultats obtenus de la méthode de caractérisation.

Le chapitre est ensuite bouclé par un résumé des résultats du krigeage dans lequel on décrit ses points forts et ses points faibles.

5.1 Stabilité

5.1.1 Définition de la mesure de stabilité

Une approximation peut être décrite par ses points critiques, soit ses maximums, ses minimums, ses points d'inflexions, ses points de selle, etc. l'approximation est stable lorsque la position des points critiques approximés ne change pas significativement en fonction de l'échantillon. L'ajout ou la soustraction d'un point dans l'échantillon affectera la stabilité si un point critique est déplacé ou mute. Par exemple, l'ajout d'un point pourrait perturber l'approximation en déplaçant un maximum ou encore en le mutant en un minimum. Notons que la mutation d'un point critique bien que peu fréquente, est possible comme on la vue précédement sur la figure 3.1.

On peut mesurer la stabilité en comparant l'approximation à elle même au fur et à mesure que l'on échantillonne. La différence entre l'approximation de l'échantillon de taille $m-1$ et l'approximation de l'échantillon de taille m est appelée α, la stabilité. On peut écrire :

$$\bar{\alpha}_m = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} |\hat{y}_m - \hat{y}_{m-1,i}| \tag{5.1}$$

la moyenne de la stabilité pour m échantillons de taille $m-1$, avec $\hat{y}_{m-1,i}$ l'approximation $\hat{y}$ créée à partir du i-ème sous-ensemble de taille $m-1$. La figure 5.1 illustre les sous-ensembles d'un échantillon de taille $m = 4$. Généraliser l'équation 5.1 pour tous sous-

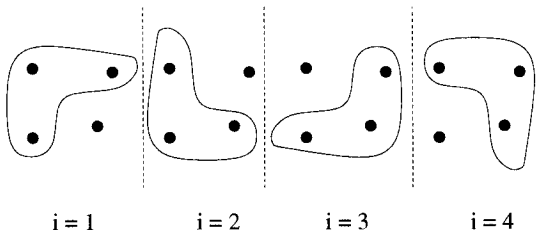


Figure 5.1 Exemple de sous-ensembles de taille $m - 1 = 3$ pour un échantillon de taille m. L'index i correspond aux équations 5.1 et 5.2.

ensembles plus petits que m donne :

$$\bar{\alpha}_{m,m-k} = \frac{1}{\binom{m}{k}} \sum_{i=1}^{\binom{m}{k}} |\hat{y}_m - \hat{y}_{m-k,i}| \tag{5.2}$$

la moyenne de la stabilité de l'approximation pour les sous-ensembles de taille $m - k$ où k est le nombre de points soustraits de l'échantillon m. Le terme $\binom{m}{k}$ est l'équation binomiale. Notons que la suite $\bar{\alpha}_{m,m-k}, k = m - 1, \ldots, 1$ décrit comment évolue la moyenne de la stabilité. Si celle-ci tend asymptotiquement vers zéro, l'approximation est stable.

Il est aussi possible d'associer un écart-type à la stabilité. L'équation de la variance est

$$\begin{aligned}\sigma^2_{m,m-k} =& E\left\langle (\alpha_{m,m-k} - \bar{\alpha}_{m,m-k})^2 \right\rangle \\ =& \frac{1}{\binom{m}{k}} \sum_{i=1}^{\binom{m}{k}} (\alpha_{m,m-k,i} - \bar{\alpha}_{m,m-k})^2\end{aligned}$$

où $\alpha_{m,m-k,i} = |\hat{y}_m - \hat{y}_{m-k,i}|$. Cette variance est asymétrique. La variance associée à l'écart supérieur à la moyenne peut prendre n'importe quelle valeur car elle n'est pas bornée mais, la variance associée à l'écart inférieur à la moyenne est bornée par zéro car la stabilité est définie comme une valeur absolue. On a donc respectivement σ_S et σ_I pour la variance supérieure et la variance inférieure. Les stabilités satisfaisant $\alpha_{m,m-k,i} \geq \bar{\alpha}_{m,m-k}$ sont utilisées pour le calcul de σ_S et par défaut, tous les autres

satisfaisant $\alpha_{m,m-k,i} \leq \bar{\alpha}_{m,m-k}$ sont utilisées pour le calcul de σ_I.

Notons que la stabilité ne dépend strictement que de l'approximation. Elle n'a pas recours à la fonction exacte. Ce qui veut aussi dire qu'une approximation stable n'est pas nécessairement une approximation représentative de la fonction exacte. Il se peut qu'elle ait atteint une stabilité tout en divergeant de la fonction exacte.

5.1.2 Détection de la stabilité

Selon la définition de la stabilité, il est possible de déterminer si l'approximation est stable en observant la suite $\bar{\alpha}_{m,m-k}, k = m-1, \ldots, 1$. Mais pour être en mesure de dire qu'une approximation est stable, il est nécessaire de trouver un critère d'arrêt. Le critère choisi ci-dessous est un premier essai. Il se peut que ce critère soit trop sévère ou trop simple.

Détection pour cas test avec un degré de liberté

Dans un premier temps, on peut supposer l'hypothèse qu'une approximation stable aura une erreur absolue stable. L'erreur absolue ici est la distance moyenne entre la fonction exacte et l'approximation, tel qu'énoncé dans le chapitre 2. La stabilité de l'erreur absolue peut être mise en évidence en fonction du nombre de points dans l'échantillon tel qu'illustré par le graphique (a) de la figure 5.2. Ces graphiques sont les résultats des cas tests avec un degré de liberté. On remarque sur le graphique (a) qu'il y a une relative confiance de l'erreur entre 5 et 29 points. On remarque aussi que ce plateau ne correspond pas à une erreur absolue de zéro. Ceci s'explique par le fait que la fonction exacte est bruitée (voir figure 5.2(b)) et l'approximation filtre ce bruit. Passé ce plateau, l'erreur absolue augmente énormement pour redescendre avant d'atteindre un deuxième plateau. Celui-ci est situé entre 40 et 80 points , et correspond pratiquement à une erreur

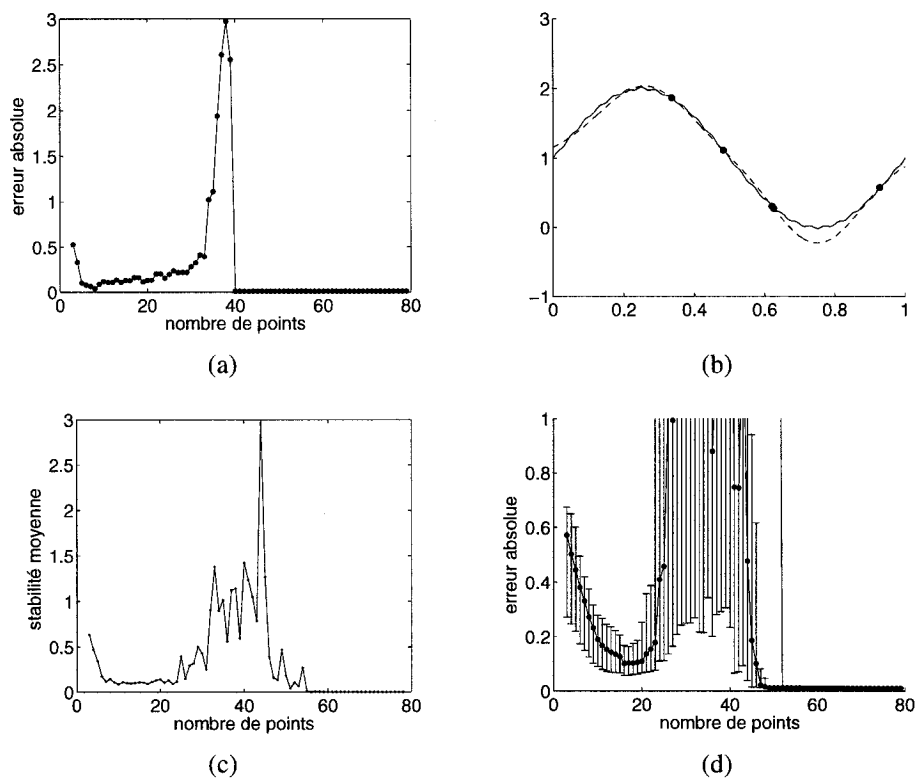


Figure 5.2 Résultats du calcul de l'erreur absolue et de la stabilité pour un cas test avec un dégrée de liberté. (a) L'erreur absolue pour un échantillonnage. (b) Le cas test bruité avec l'approximation en ligne tiretée. (c) La stabilité calculé pour l'échantillonnage de (a). Ici, le nombre de points dans l'échantillon est 80 et on varie k de 79 à 1. (d) La moyenne et l'écart-type de l'erreur absolue pour 35 échantillonnages.

absolue de zéro. Ce qui signifie que le bruit et la tendance moyenne sont approximés. On explique l'augmentation de l'erreur absolue par la nature du krigeage. Les fonctions de corrélations qui apportent une correction locale sont des fonctions de base. Celles-ci ont une zone d'influence sur l'approximation et la taille de cette zone est liée au nombre de point dans l'échantillon. Plus il y a de points, plus il y a de fonctions de base et plus petite est leur zone d'influence. Il arrive un moment où la taille de la zone est de la même ordre de grandeur que la fréquence du bruit et c'est à ce moment que les fonctions de corrélations donnent aux corrections locales des amplitudes démesurées. Cette effet est illustré par les figures 5.3 et 5.4

Le graphique (c) de la figure 5.2 présente la mesure de stabilité en fonction du nombre de points dans l'échantillon, soit la suite $\bar{\alpha}_{m,m-k}, k = m-1, \ldots, 1$. On observe sur ce graphique un plateau entre 5 et 25 points et un autre entre 55 et 80 points. Ces deux plateaux ont les mêmes dimensions et ont à peu près le même positionnement que ceux de l'erreur absolue. Cette similitude entre l'erreur absolue et la stabilité démontre qu'il y a corrélation. On remarque aussi que la stabilité indique la zone de transition entre les deux plateaux, soit la région où les zones d'influences des fonctions de corrélations sont de même ordre de grandeur que la fréquence du bruit.

L'exemple donné ci-dessus traite d'un cas particulier où on observe une approximation pour un cas test donné mais, ce premier plateau est toujours observé pour les approximations que nous avons menées. Le graphique (d) de la figure 5.2 représente l'erreur moyenne de 35 approximations en fonctions du nombre de points dans l'échantillon. On voit qu'en moyenne le plateau est présent et bien démarqué.

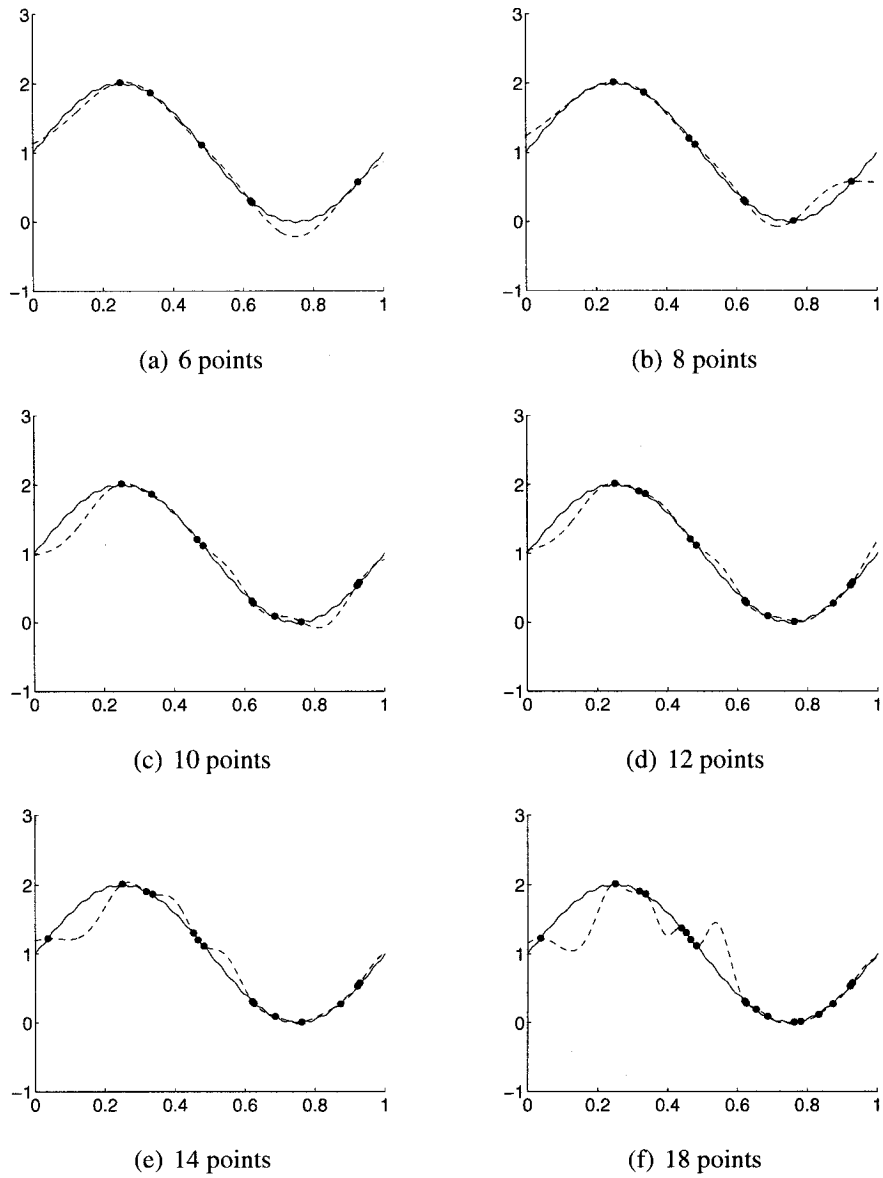
L'objectif du critère d'arrêt est de détecter le premier plateau sur le graphique (c) de la figure 5.2. On remarque que la variation de stabilité d'un point i à un point $i+1$ est de l'ordre de 0.01. Cette variation est observée pour plusieurs suites de stabilité des différents cas tests ayant un degré de liberté. Les graphiques de la figure 5.3 illustrent

comment varie l'approximation quand elle a atteint le premier plateau et au-dela. On observe une dégradation de l'approximation avec l'augmentation du nombre de point. À priori, cette dégradation peut être attribué aux effets de bruits ou à un mauvais échantillonnage sur le krigeage. Toutefois, dans le cas où il n'y a pas de bruit, il n'y a qu'un plateau. Les graphiques (a) et (d) de la figure 5.5 présentent ce scénario. Le premier plateau du graphique (a) de la figure 5.2 n'est pas nécessairement à valeur constante. L'erreur augmente de façon linéaire. La stabilité, par contre, ne capte pas cet effet. Le premier plateau du graphique (c) de la figure 5.2 est à valeur constante. Ayant noté cette dégradation de l'approximation à mesure que l'on progresse sur le plateau, on se contente toute de même d'un critère assez simple pour ce premier essai. On propose alors d'utiliser comme critère d'arrêt, une variation minimum de 0.01 de la stabilité.

Détection pour cas test avec plus d'un degré de liberté

Le critère doit être légèrement modifié pour les cas tests de plus de un degré de liberté. Nous avons noté lors des différents essais que la stabilité ne semble pas évoluer de la même façon pour les cas tests à un degré de liberté que ceux à deux degrés de liberté. On remarque que la stabilité peut varier de l'ordre de 10^{-2} sans avoir atteint un plateau et les approximations qui en résultent ne sont pas très représentatives des fonctions exactes. On a aussi observé sur certains cas tests qu'il peut y avoir deux plateaux même si la fonction exacte n'est pas bruitée. À titre d'exemple, le graphique (a) de la figure 5.6 a un plateau entre 11 et 27 pour un cas test simple. Il se peut, dans ce cas, que l'approximation soit assez stable et précise au premier plateau. Or l'existence de ce premier plateau n'est pas garantie. D'ailleurs on voit sur le graphique (e) de la figure 5.6 que généralement le plateau n'existe pas.

Le critère de stabilité énoncé pour le cas test a une dimension ne semble pas pouvoir être utilisé pour le cas test à deux dimension. On propose alors d'élever à la puissance d le



(a) 6 points (b) 8 points

(c) 10 points (d) 12 points

(e) 14 points (f) 18 points

Figure 5.3 Évolution de l'approximation au fur et à mesure que des points sont ajoutés.

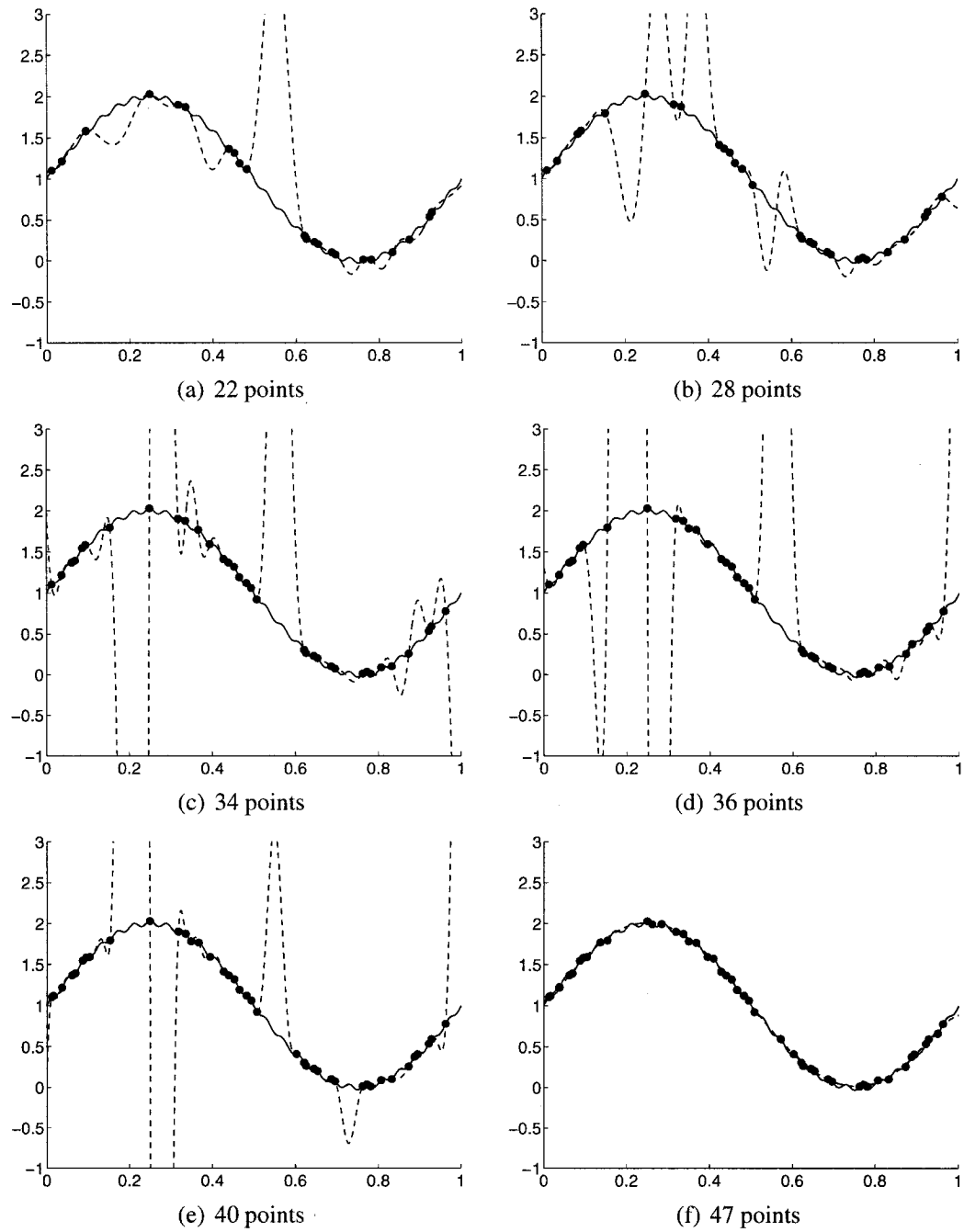


Figure 5.4 Évolution de l'approximation au fur et à mesure que des points sont ajoutés. Continuation de la figure 5.3.

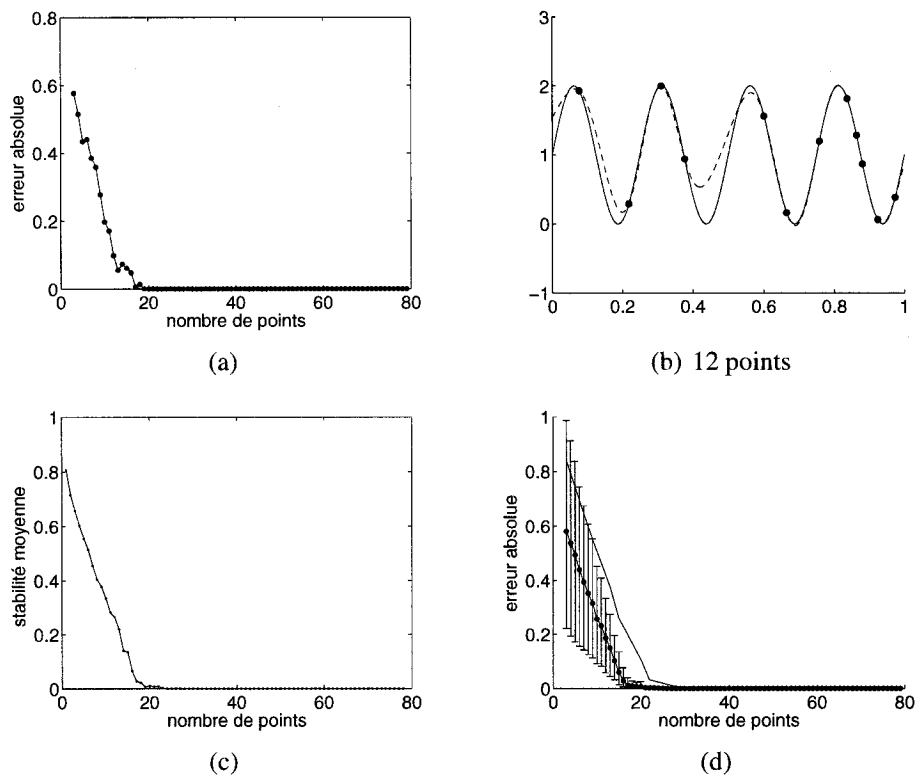


Figure 5.5 Résultats du calcul de l'erreur absolue et de la stabilité pour un cas test avec un degré de liberté et sans bruit.

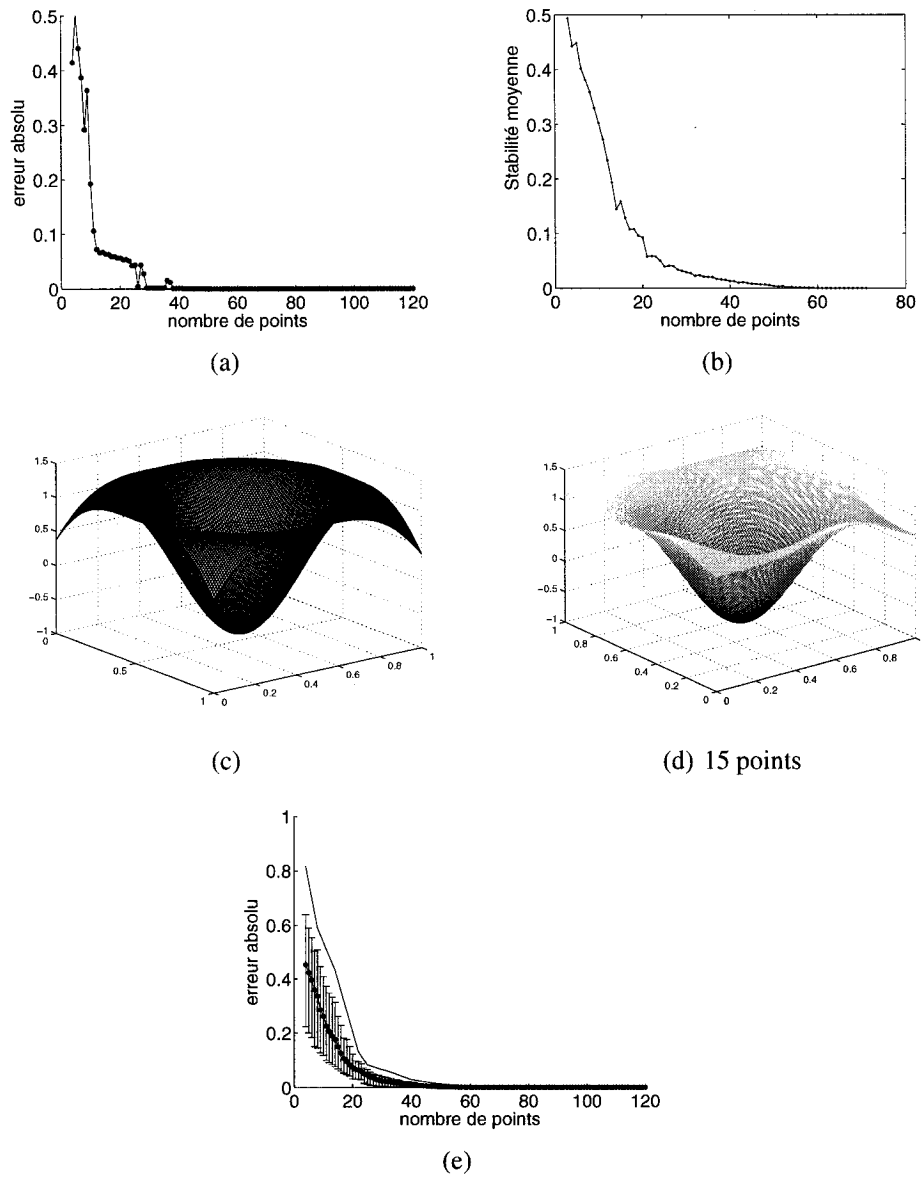


Figure 5.6 Résultats du calcul de l'erreur absolue et de la stabilité pour un cas test à deux degrés de libertés. (a) erreur absolue. (b) stabilité. (c) fonction exacte. (d) approximation avec un échantillon de 15 points .

critère d'arrêt pour avoir comme critère :

$$\Delta\bar{\alpha}_{m,m-k,m-k+1} \leq 0.01^d \tag{5.3}$$

où d dans ce cas représente le nombre de degré de liberté de la fonction exacte.

Précision sur la détection de stabilité

L'un des objectifs de la méthode de caractérisation globale des approximations est de développer des outils qui pourront être appliqués en industrie utilisant un minimum d'évaluation de la fonction exacte. Dans cette optique, l'approximation est initialisée en utilisant deux points de plus que le nombre minimum requis pour résoudre les équations du krigeage. On calcule la stabilité moyenne pour les deux tailles de sous-ensembles. On calcule ensuite la variation entre les sous-ensembles. Si le critère d'arrêt n'est pas atteint, un point est ajouté à l'ensemble et on re-calcule la stabilité moyenne des sous-ensembles. Cette procédure est répétée jusqu'à détection de la stabilité.

Une approximation idéale devrait filtrer le bruit et identifier les points critiques de la fonction qu'elle approxime. C'est à dire, on souhaite obtenir une approximation telle que celle du graphique (b) de la figure 5.3 plutôt que celle du graphique (e). Pour ce faire, on re-vérifie la stabilité des sous-ensembles de taille a jusqu'à la taille m, où a elle le plus petit ensemble permis pour résoudre les équations du krigeage et m est le nombre de point dans l'échantillon. Si la stabilité existe pour un sous-ensemble de taille $b, a \leq b \leq m$, on considère b comme étant la taille d'échantillonnage offrant une stabilité acceptable pour cette approximation.

Le nombre de sous-ensembles possibles pour un échantillon de taille $m+1$ est défini par l'équation binomial, soit $\binom{m+1}{k}$. Cette quantité peut atteindre des chiffres astronomiques quand m est grand. Pour limiter le temps de calcul, seuls 50 sous-ensembles par taille

Tableau 5.1 Sous ensembles possibles pour l'échantillon de points 1 à 3.

pts échantillonnés	sous-ensemble taille 1	sous-ensemble taille 2
1 à 3	1, 2, 3	1 2, 1 3, 2 3

sont testés pour les cas tests à un degré de liberté et 35 sous-ensembles par taille pour tous les autres cas tests ayant plus d'un degré de liberté. Le choix de ces sous-ensembles est accomplie aléatoirement. Le choix du nombre de sousensemble est discuté dans la section 3.5.1.

Pour mieux expliquer comment la détection de stabilité est accomplie, on présente un exemple. Supposons que l'on veut approximer un problème quelconque ayant un degré de liberté. Pour initialiser l'approximation, on échantillonne trois points, De cet échantillon, on peut créer des sous-ensembles de taille un et deux. Ces sous-ensembles sont présentés dans le tableau 5.1. On calcule maintenant la stabilité moyenne associée à chaque taille de sous-ensemble. On a donc pour les sous-ensembles de taille un :

$$\bar{\alpha}_{3,1} = \frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3} |\hat{y}_3 - \hat{y}_{1,i}|$$

Pour le sous-ensemble de taille deux, on a :

$$\bar{\alpha}_{3,2} = \frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3} |\hat{y}_3 - \hat{y}_{2,i}|$$

La variation de la stabilité moyenne est alors $\Delta\bar{\alpha}_{3,1,2} = |\bar{\alpha}_{3,2} - \bar{\alpha}_{3,1}|$. Si $\Delta\bar{\alpha}_{3,1,2} \geq 0.01$, on échantillonne un autre point. Ce nouveau point nous permet d'avoir des sous-ensembles de taille 1 à 3. Il y a maintenant pour quelques tailles de sous-ensembles, plus de trois combinaisons possibles. Si on souhaite limiter le temps de calcul, on sélectionne que trois sous-ensembles par taille. On calcule ensuite les stabilités moyennes

Tableau 5.2 Sous ensembles possibles pour les échantillons de points 1 à 3, 1 à 4 et 1 à 5. Les sous-ensembles soulignés sont ceux choisis pour le calcul de la stabilité moyenne.

pts échantillonnés	sous-ensembles taille 1	sous-ensembles taille 2	sous-ensembles taille 3	sous-ensemble taille 4	critère
1 à 3	1, 2, 3	1 2, 1 3, 2 3	$\longrightarrow$	$\longrightarrow$	$\Delta\bar{\alpha}_{3,1,2} \geq 0.01$
1 à 4	1, 2, 3, 4	1 2, 1 3, 1 4, 2 3, 2 4, 3 4	1 2 3, 1 2 4, 1 3 4, 2 3 4	$\longrightarrow$	$\Delta\bar{\alpha}_{4,1,2} \geq 0.01$ $\Delta\bar{\alpha}_{4,2,3} \geq 0.01$
1 à 5	1, 2, 3, 4, 5	1 2, 1 3, 1 4, 1 5, 2 3, 2 4, 2 5, 3 4, 3 5, 4 5	1 2 3, 1 2 4, 1 2 5, 1 3 4, 1 3 5, 1 4 5, 2 3 4, 2 3 5, 2 4 5, 3 4 5	1 2 3 4, 1 2 3 5, 1 2 4 5, 1 3 4 5, 2 3 4 5	$\Delta\bar{\alpha}_{5,1,2} \geq 0.01$ $\Delta\bar{\alpha}_{5,2,3} \leq 0.01$ $\Delta\bar{\alpha}_{5,3,4} \leq 0.01$

pour connaître la variation. Si les variations $\Delta\bar{\alpha}_{4,1,2}$ et $\Delta\bar{\alpha}_{4,2,3}$ sont supérieures à 0.01, un cinquième point est échantillonné. Le tableau 5.2 résume la démarche pour les échantillonnages de 1 à 3, de 1 à 4 et de 1 à 5. On remarque que la variation de stabilité $\Delta\bar{\alpha}_{5,2,3}$ et $\Delta\bar{\alpha}_{5,3,4}$ pour l'échantillonnage 1 à 5 sont inférieures à 0.01 alors que $\bar{\alpha}_{4,2,3}$ ne l'est pas pour l'échantillonnage 1 à 4. La sélection du cinquième point offre des sous-ensembles plus stables. Pour construire l'approximation finale on choisit donc un échantillon parmi les sous-ensembles de taille 3 plutôt que 5 pour s'assurer d'un meilleur filtrage de bruit.

Le fait de limiter le nombre de sous-ensembles testés à 50 a des conséquences. Prenons par exemple les cas tests à 1 degré de liberté. Dans le cas où $m \leq 7$, tous les sous-ensembles possibles sont testés. Par contre, lorsque $m > 7$, il est possible d'avoir plus d'une cinquantaine de sous-ensembles pour une taille donnée. L'exemple de $m = 8$ telle qu'illustré dans le tableau 5.3 démontre que certaines tailles, notamment ceux de taille cinq, quatre et trois, dépassent la limite de 50. Dans ce cas, on teste 87% des sous-ensembles possibles. Quand une approximation nécessite une vingtaine de points, on ne teste alors que 0.05% de tous les sous-ensembles possibles en posant la limite à 50 car le nombre des ensembles dans ce cas dépasse un million. Pour des raisons de ressources de calculs, on ne peut se permettre de tous les tester. Cependant, il est possible de discerner les grandes tendances dans les résultats même si le nombre de sous-ensembles testés n'est pas statistiquement représentatif. Des calculs ont été accomplis avec une

Tableau 5.3 Nombre de sous-ensembles possible pour chaque taille quand $m = 8$. $k = m-1, \ldots, 1$

$m-k$	1	2	3	4	5	6	7
$\binom{m}{k}$	8	28	56	70	56	28	8

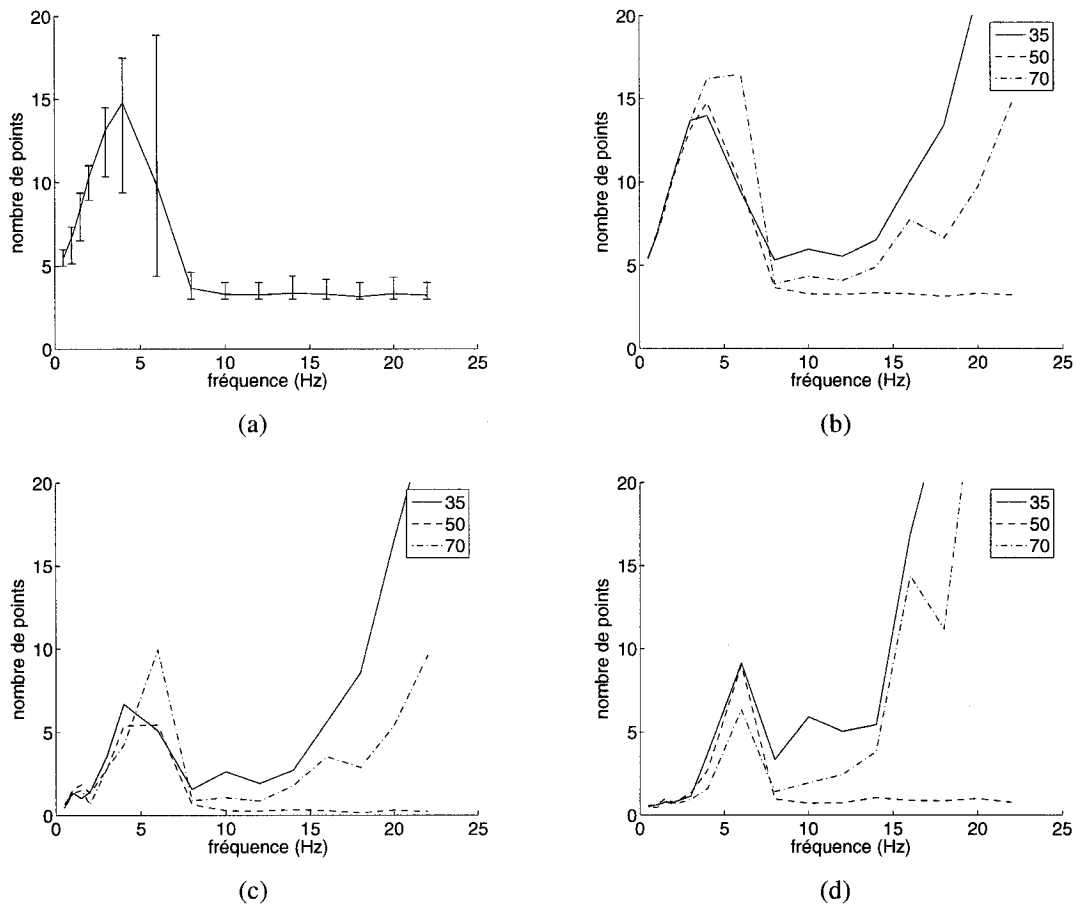


Figure 5.7 Comparaison des résultats obtenus pour différentes limites du nombre de sous-ensembles par taille. (a) est le résultat moyen, l'écart-type supérieur et l'écart-type inférieur obtenu avec une limite de 50. (b) compare les moyennes pour des résultats obtenus avec les limites de 35, 50 et 70. (c) et (d) compare respectivement les écart-types inférieurs et supérieurs pour les mêmes limites.

limite de 35, 50 et 70 sous-ensembles par taille. On observe qu'il y a peu de changement d'une série de résultats à l'autre. Le graphique (a) de la figure 5.7 est une représentation des résultats pour la suite de cas tests à un degré de liberté sans bruit. On retrouve sur ce graphique les valeurs moyennes, les écarts-types inférieures et les écarts-types supérieures pour des tests effectués sur 50 sous-ensembles par taille. Les graphique (b) (c) et (d) présentent respectivement les résultats obtenues pour la moyenne, l'écart-type inférieur et l'écart-type supérieur pour les trois limites de 35, 50 et 70. Notons que les résultats ne seront analysés que sur les segments de zéro à cinq sur l'abscisse. Cette limitation est justifiée plus loin dans la présentation des résultats. On voit sur les graphiques (b), (c) et (d) que les tendances sont les mêmes. D'ailleurs on voit que les pentes des moyennes affichées sur le graphique (b) sont similaires.

On propose alors deux limites du nombre de sous-ensembles par taille. La première, pour les cas tests ayant un degré de liberté : 50 par taille. Ceci permet de compléter plusieurs séries de calculs dans un délais acceptable. Pour les cas tests ayant un degré de liberté supérieur ou égale à deux, on propose de limiter le nombre de sous-ensembles à 35 par taille. Ceci permet de compléter plusieurs séries de calculs dans un délai acceptable.

5.2 Méthode de caractérisation : résumé de la démarche

Vu l'envergure de la méthode, un résumé de la démarche est donnée. La première étape est de créer les échantillons et faire la soustractions des points. La deuxième étape est le calcul de l'erreur absolue. La troisième étape est le calcul de la stabilité.

Création des échantillons :

1 -Initialiser une structure dans laquelle se trouvera les coordonnées des points dans les échantillons et l'ordre dans laquelle ils sont soustaits. Cette structure aura l'information des 35 échantillons par cas tests pour tous les cas tests d'une suite.

2 -Pour le nombre de cas test dans la suite :
3 -Pour le nombre d'échantillon que l'on désire avoir (généralement 35) :
4 -Créer un échantillon de taille maximum (soit 80 points pour les cas tests à 1 degré de liberté et 120 pour les autres).

5 -Pour le nombre de cas test dans la suite :
6 -Pour tous les échantillons :
7 -Pour le nombre de points que l'on souhaite soustraire (généralement tous sauf un) :
8 -Choisir aléatoirement un point dans l'échantillon.
9 -Noter la position et l'ordre dans lequel le point est choisi.
10 -Soustraire ce point de l'échantillon.
11 -Choisir le prochain échantillon.
12 -Repartir de la ligne 7.

Calcul de l'erreur absolue :

```
1 -Pour tous les cas tests dans la suite :
2     -Pour tous les échantillons associés au cas test :
3         -Ajouter des points pour avoir la taille minimum nécessaire.
4         -Pour tous les points soustraits de l'échantillon :
5             -Créer une approximation du cas test à l'aide de l'échantillon.
6             -Discrétiser uniformément l'approximation et le cas test à trois
              reprises (la troisième étant plus raffinée que la deuxième et la
              deuxième étant plus raffinée que la première).
7             -Selon l'équation 3.3, calculer les erreurs avec les trois
              discrétisations.
8             -Boucle sur la précision du calcul de l'erreur :
9                 -Calculer le GCI_12 et GCI_23 selon l'équation 3.8 pour les
                  trois erreurs calculées précédament.
10                -Si la condition 3.9 est satisfaite, on sort de la
                  boucle.
11                -Si la condition 3.9 n'est pas satisfaite et la
                  discrétisation n'a pas atteint la limite imposée :
12                    -Discrétiser uniformément l'approximation et le cas test
                      de façon à ce que cette discrétisation soit plus raffinée
                      que la troisième.
13                    -Calculer l'erreur avec cette nouvelle discrétisation.
14                    -Renuméroter les erreurs de sorte que le 2 devient le 1,
                      le 3 devient le 2 et le nouveau devient le 3.
                      -Repartir de la ligne 9.
15                -Si la discrétisation à atteint la limite imposée, on sort de la
                  boucle
16            -Archiver cette erreur.
17            -Ajouter un point à l'échantillon.
18            -Repartir de la ligne 5.
19        -Choisir le prochain échantillon.
20        -Repartir de la ligne 3.
21    -Choisir le prochain cas test.
22    -Repartir de la ligne 2.
```

Vérification de la stabilité :

1 -Pour tous les cas tests dans la suite

2 -Pour tous les échantillons associés à un cas test.

3 -Ajouter des points pour avoir la taille minimum nécessaire.

4 -Boucle sur le nombre de point dans l'échantillon :

5 -Créer une approximation du cas test à l'aide de l'échantillon :

6 -Pour tous les tailles de sous-ensembles de l'échantillon

7 -Pour tous les sous-ensembles que l'on choisi (environ 35 sous-ensembles) :

8 -Sélectionner aléatoirement les points qui feront le sous-ensemble.

9 -Créer une approximation avec ce sous-ensemble.

10 -Discrétiser uniformément les deux approximations à trois reprises. La troisième étant plus raffinée que la deuxième et la deuxième étant plus raffinée que la première.

11 -Selon l'équation 3.3, calculer les erreurs (mesure de stabilité) de pour les trois discrétisations.

12 -Boucle sur la précision du calcul de l'erreur :

13 -Calculer le GCI_12 et GCI_23 selon l'équation 3.8 pour les trois erreurs calculées précédament.

14 -Si la condition 3.9 est satisfaite, on sort de la boucle.

15 -Si la condition 3.9 n'est pas satisfaite et la discrétisation n'a pas atteint la limite :

16 -Discrétiser uniformément l'approximation et le cas test de façon à ce que cette discrétisation soit plus raffinée que la troisième.

17 -Calculer l'erreur de cette nouvelle discrétisation.

18 -Renuméroter les erreurs de sorte que le 2 devient le 1, le 3 devient le 2 et le nouveau devient le 3.

19 -Repartir de la ligne 13.

20 -Si la discrétisation à atteint la limite imposée, on sort de la boucle.

21 -Archiver cette erreur.

22 -Repartir de la ligne 8.

-Calculer la stabilité moyenne pour cette taille de sous-ensemble selon l'équation 5.2.

```
23                  -Passer à la prochaine taille de sous-ensemble (repartir de
                     la ligne 7)
24              -Calculer la variation de la stabilité moyenne.
25              -Si la variation est plus petite que le critère d'arrêt 5.3, la
                 taille de cette échantillon est déterminé et on poursuit avec le
                 prochain échantillon (on repart de la ligne 2).
26              -Si la variation est plus grand que le critère d'arrêt 5.3, on
                 ajoute un point à l'échantillon et on repart de la ligne 5.
27              -Si la taille maximum de l'échantillon est atteint, sauter au
                 prochain échantillon (on repart de la ligne 2).
```

5.3 Caractérisation du krigeage

Cette section présente la caractérisation du krigeage. On présente dans une première partie le comportement du krigeage pour des cas tests à un degré de liberté. On note les effets du bruit et de la complexité et l'impact qu'ils ont sur la stabilité de l'approximation.

On présente ensuite les résultats des cas tests à deux degrés de libertés. Trois types de cas tests sont utilisés pour évaluer l'adaptivité du krigeage. Ces cas tests qui ne sont pas bruités, représentent des conditions idéales. En plus d'évaluer l'adaptivité, ces séries de cas tests permettent aussi d'évaluer le nombre de points nécessaires pour les approximations en fonction du degré de liberté du problème.

La troisième série de résultats provient de cas tests avec trois degrés de libertés.

5.3.1 Présentation des résultats

Les résultats sont présentés sous deux formes de graphiques. Le premier a en abscisse la fréquence des sinus et en ordonnée le nombre de points nécessaires pour atteindre la stabilité. Le deuxième graphique a en abscisse la fréquence des sinus des cas tests et en ordonnée l'erreur associée au nombre de points nécessaires pour atteindre la stabilité.

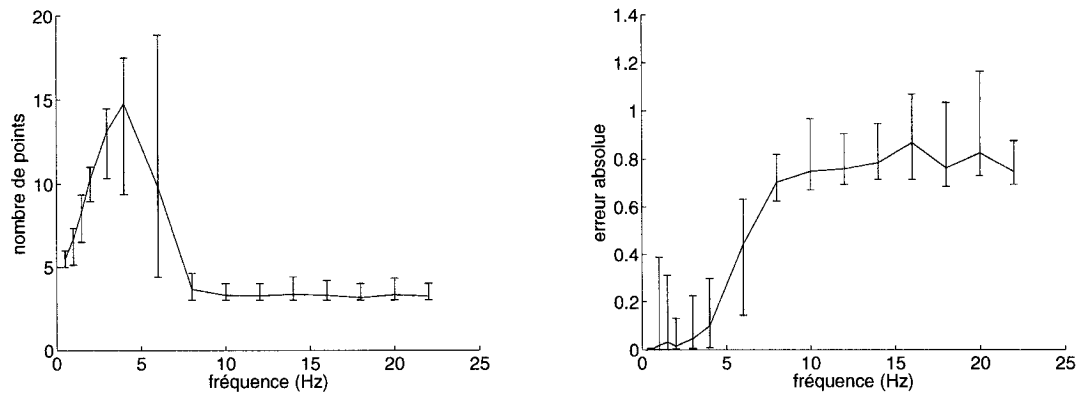
Les deux graphiques présentent à la fois les valeurs moyennes et les écart-types. Les moyennes et les écarts-types proviennent des 35 approximations stables obtenues chaque cas test.

5.3.2 Cas test à un degré de liberté

La suite de cas tests utilisée pour évaluer le krigeage utilise une fonction exacte sinusoïdale. Le domaine de travail est normalisé entre zéro et un et l'amplitude du sinus est un. On retrouve dans la suite dix cas tests ayant chacun une fréquence différente variant entre 0.5 Hz et 22 Hz (ici, le terme Hertz n'est pas pris au sens temporel. Il est employé au sens spatial où 1 Hz est un cycle sur une unité de distance). Le premier cas test représente le cas classique d'une fonction exacte strictement convexe. Les figures II.1 de l'annexe II présentent des approximations dites stables pour différents cas tests.

cas tests sans bruit

Cette première suite offre déjà des observations intéressantes. En portant notre attention sur le graphique (a) de la figure 5.8, on s'aperçoit que le nombre de points nécessaires pour atteindre la stabilité varie linéairement avec la complexité de la fonction exacte pour des cas tests de moins de 5 Hz. Le krigeage ne semble pas être capable de bien approximer les cas tests avec une fréquence supérieure à 5 Hz. D'ailleurs, on observe pour tous cas tests supérieurs à 8 Hz, que le nombre de points nécessaires pour atteindre la stabilité n'est plus dépendant de la complexité. Ce phénomène est attribué à l'apparition d'un deuxième plateau même pour les cas tests sans bruit lorsque la fréquence devient importante. Les figures 5.9(a)-(c) démontrent qu'il y a création d'un plateau au fur et à mesure que la complexité de la fonction exacte augmente. Le fait que le plateau débute à l'origine explique pourquoi le nombre de points nécessaires pour atteindre la stabilité



(a) (b)

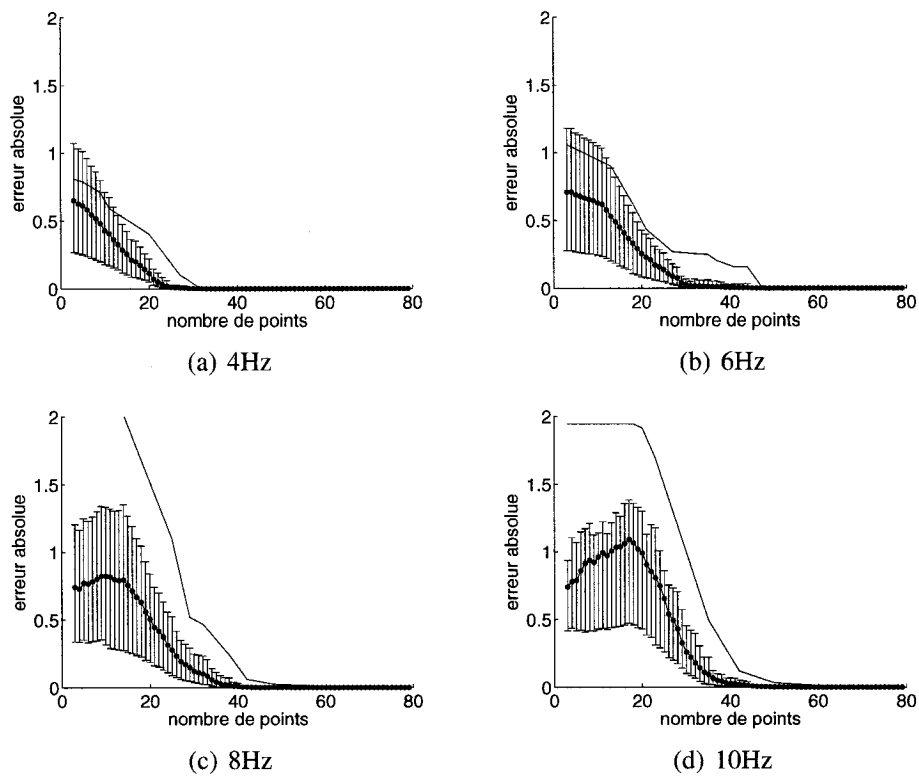
Figure 5.8 Résultats de la suite de cas tests ayant un degré de liberté et sans bruit. (a) montre le nombre de points nécessaire pour la stabilité en fonction de la complexité. (b) montre l'erreur absolue associée aux approximations dites stables.

n'est plus fonction de la complexité. Aussi, on remarque que sur le graphique (d), il s'agit plutôt d'une droite inclinée au lieu d'un plateau. Mais cela est interprété comme un plateau par le critère proposé.

Les observations énumérées ci-dessus concordent avec le graphique (b) de la figure 5.8. Celui-ci montre que l'erreur est relativement petite pour les approximations stables de moins de 5Hz puis il y a une transition vers une plus grande erreur.

Cas tests avec bruit

Il y a deux suites de cas tests avec bruit créées à partir de la suite de cas tests à un degré de liberté. Le bruit ajouté pour la première suite est une fonction sinusoïdale avec une fréquence 25 fois plus élevée que celle de la complexité et une amplitude 0.03 fois celle de la complexité. Le bruit ajouté pour la deuxième suite à la même fréquence mais à une amplitude de 0.015 fois celle de la complexité.



(a) 4Hz (b) 6Hz

(c) 8Hz (d) 10Hz

Figure 5.9 Apparition d'un nouveau plateau pour les cas tests sans bruit.

On peut voir sur les figures 5.10 (a)-(f) qu'un plateau est présent lorsque la complexité est supérieure à 5Hz avec et sans bruit. Toutefois, ce nouveau plateau est créé en amont du plateau démarquant le niveau de stabilité où le bruit est filtré. Ceci trompe la détection de stabilité et il en résulte une approximation qui n'est pas fidèle à la fonction exacte.

En portant notre attention que sur les cas tests inférieurs à 5Hz sur les graphiques (a), (c) et (e) de la figure 5.10, on remarque que la relation entre le nombre de points nécessaire à la stabilité et la fréquence est linéaire. Une régression sur cette partie des graphiques montre que les tendances pour les cas tests sans bruit et avec bruit sont très similaires. On a comme résultats pour la régression, les équations suivantes.

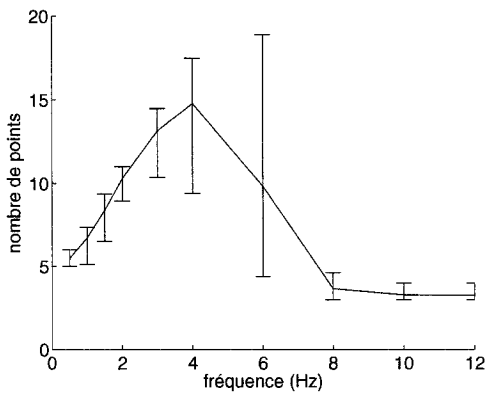
$$\begin{aligned} y_s &= 2.8x + 4.3 \\ y_{b1} &= 1.9x + 4.8 \\ y_{b2} &= 2.2x + 4.9 \end{aligned}$$

où y_s, y_{b1}, y_{b2} sont respectivement les équations pour suites sans bruit, avec bruit d'amplitude 0.03 et avec bruit d'amplitude 0.015.

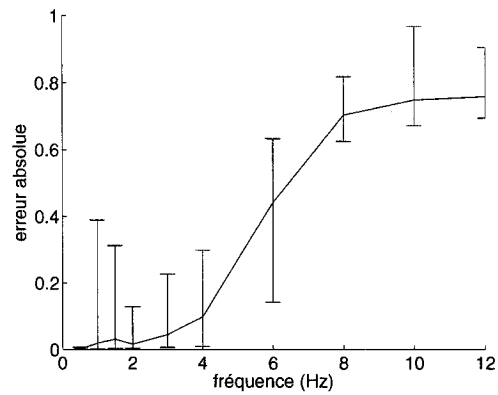
L'effet filtreur du krigeage est bien démontré par les graphiques (d) et (f) de la figure 5.10. Le bruit que néglige le krigeage est illustré par une erreur absolue beaucoup plus élevée pour les fréquences inférieures à 5Hz sur les graphiques (d) et (f) de la figure 5.10 que celle du graphique (b).

5.3.3 Cas tests avec deux degrés de libertés

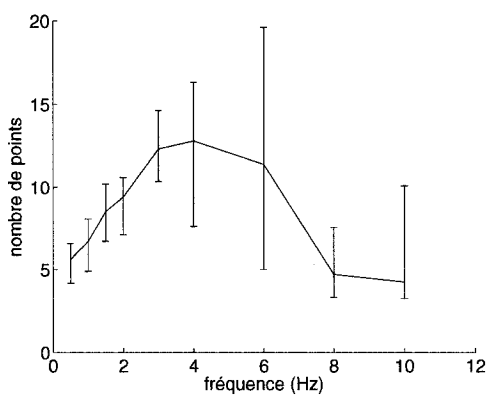
Il y a trois suites de cas tests à deux degrés de libertés. Les deux premières, tel que décrit dans le chapitre 3, sont très similaires. Les cas tests diffèrent par le fait que le



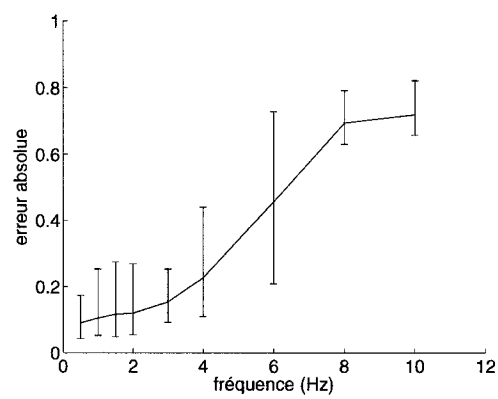
(a) pas de bruit



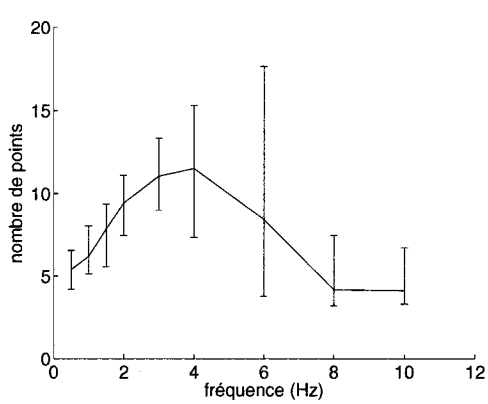
(b) pas de bruit



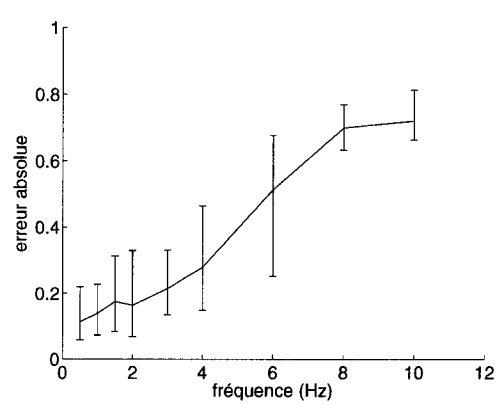
(c) bruit avec $A = 0.015$



(d) bruit avec $A = 0.015$



(e) bruit avec $A = 0.03$



(f) bruit avec $A = 0.03$

Figure 5.10 Résultats des cas tests sans bruit et avec bruit.

premier est axisymétrique, le second est quasi-axisymétrique, et le troisième est un cas plus classique avec deux plans de symétries. La figure 3.19 à la page 54 illustre un cas de ces trois types. Les deux premières suites ont neuf cas tests variant de 0.5 à 6 Hz. La troisième suite à onze cas tests variant de 0.5 à 3 Hz. Les résultats sont présentés dans la figure 5.11 et on retrouve dans l'annexe II des exemples de différents cas tests.

Le critère d'arrêt

La figure 5.11 ne présente les résultats que pour les cas tests ayant atteint le critère d'arrêt. Le fait que les autres cas tests n'aient pas atteint le critère d'arrêt est lié à deux parties essentielles de la méthode de caractérisation. La première est le nombre maximum de points permis pour les approximations. Le deuxième est le critère d'arrêt.

En principe, il serait souhaitable de ne pas limiter le nombre de points utilisé pour construire une approximation mais la méthode de soustraction des points l'oblige. Cette limite assure aussi que le temps de calcul ne soit pas excessivement long. Toutefois, pour les cas tests à deux degrés de liberté, la limite est de 120 points.

Le critère d'arrêt fixe une variation maximale acceptable de la stabilité sous la supposition que l'approximation n'aura atteint le début du plateau qu'à ce moment. Or il se peut que ce critère d'arrêt soit trop limitatif. Alors que la plus grande fréquence qu'a pu approximer le krigeage, selon le critère d'arrêt, est de 2.5Hz, on note que le plateau existe toujours pour les cas tests supérieurs à 2.5Hz. Les graphiques (a) à (c) de la figure 5.12 montre l'existence du plateau pour les cas tests avant et après le cas test de 2.5Hz. Ceci laisse à penser que le critère d'arrêt ne détecte pas bien le plateau. Ceci dit, on peut tout de même, pour les cas tests supérieurs à 2.5Hz, extrapoler le nombre de points nécessaires pour atteindre le plateau. Pour le cas test de 3Hz, il serait nécessaire d'avoir environ une centaine de points pour atteindre le plateau. Pour le cas tests de 3.5Hz, il

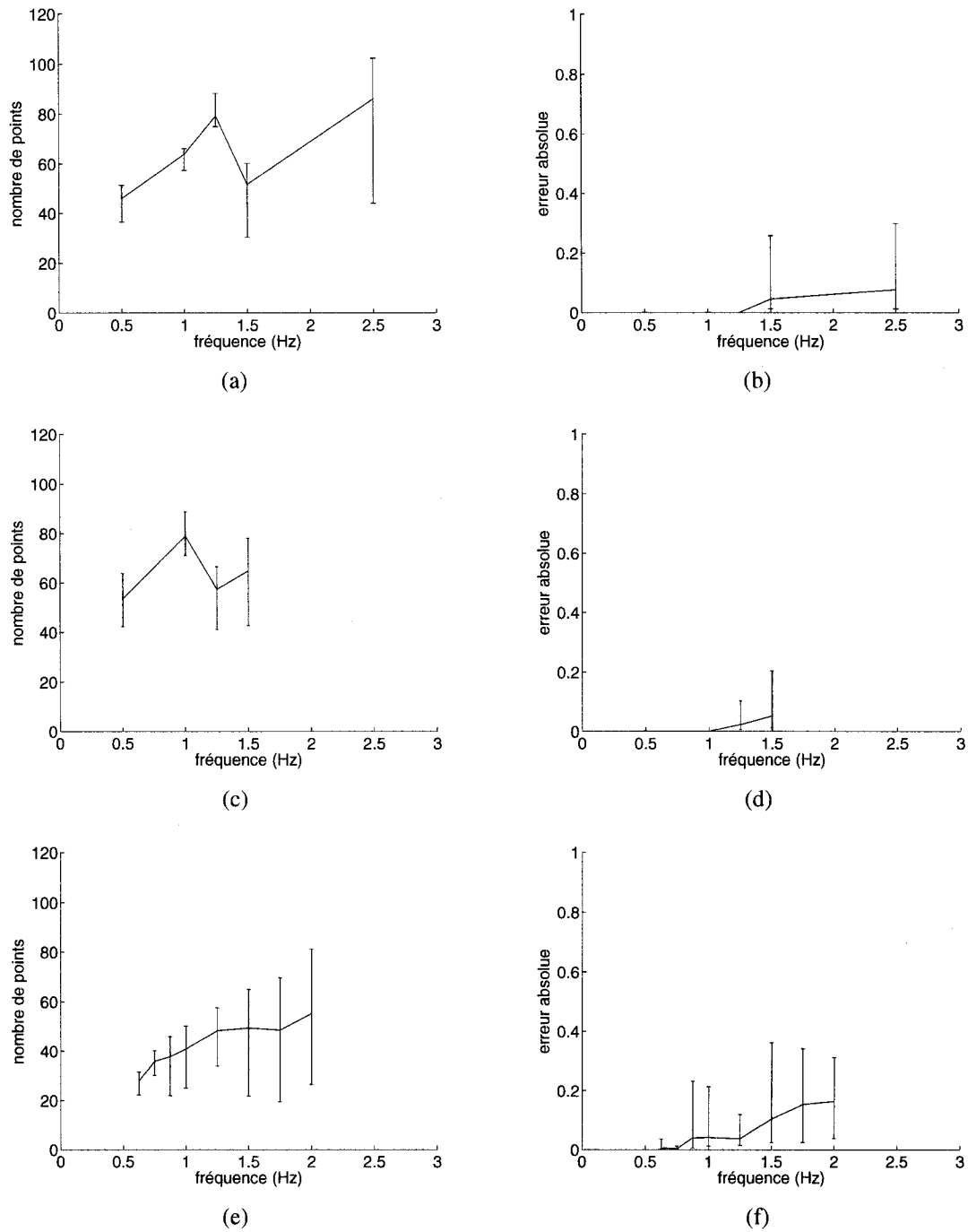
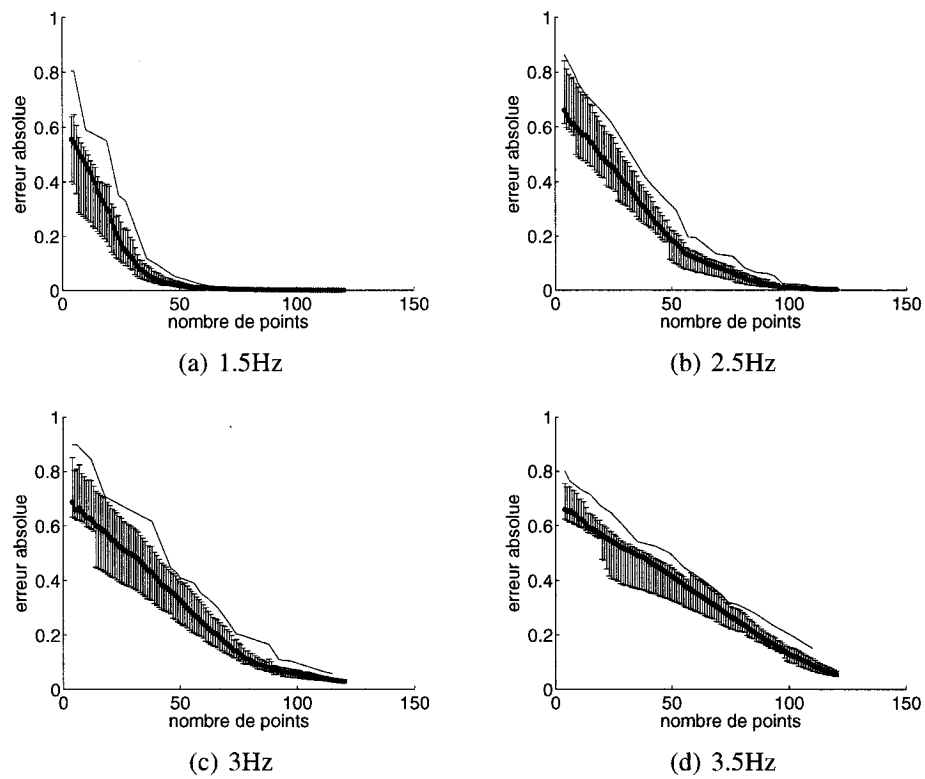


Figure 5.11 Présentation des résultats pour les suites de cas test à 2 degrés de libertés.



(a) 1.5Hz (b) 2.5Hz

(c) 3Hz (d) 3.5Hz

Figure 5.12 Plateaux présents pour la suite de cas tests axisymétriques. Le graphique (d) ne présente pas de plateau pour des approximations avec moins de 120 points.

serait nécessaire d'avoir au delà de 120 points pour atteindre le plateau.

Les effets de la méthode d'échantillonnage

On remarque que les barres d'erreurs des graphiques (a), (c) et particulièrement (e) de le figure 5.8 sont grandes. Ceci peut s'expliquer par la méthode d'échantillonnage qui n'est pas optimale. La méthode de sélection et de soustraction arbitraire des points semble donner parfois une approximation stable avec peu de points et parfois avec beaucoup de points. Cela peut aussi se voir sur les graphiques (a) à (d) de la figure 5.13 qui montrent que l'erreur absolue peut varier significativement selon l'échantillonnage.

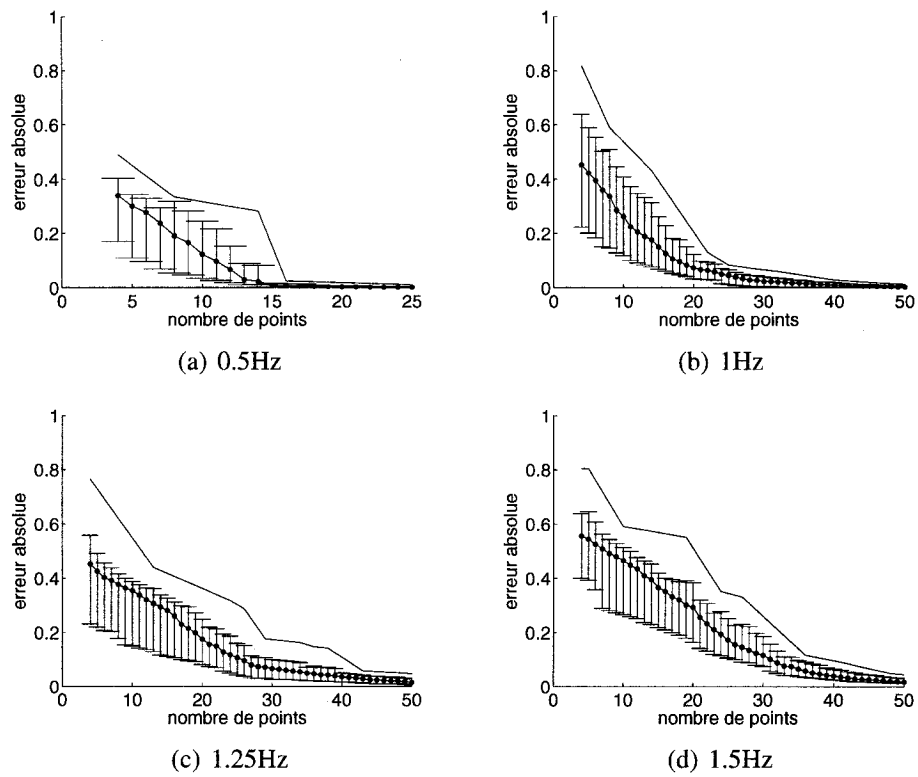


Figure 5.13 Erreur absolue en fonction du nombre de points dans l'approximation. Résultats de la suite avec cas tests axisymétriques.

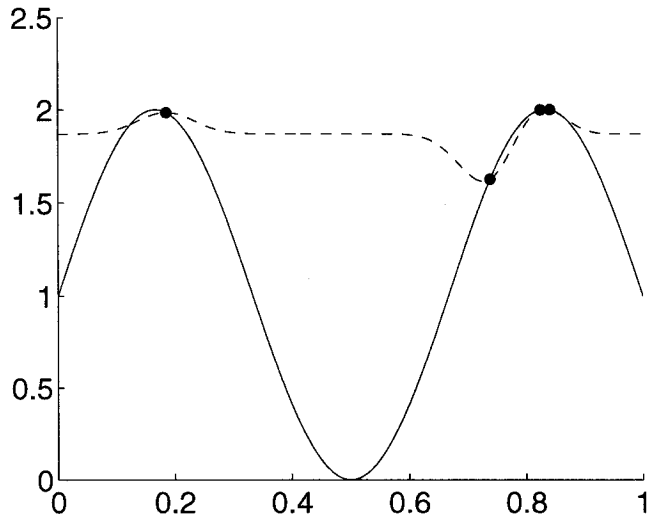


Figure 5.14 Exemple de l'influence qu'à la corrélation sur toute l'approximation. La régression globale est effectuée sur un plan à valeur constante.

On explique l'écart-type des graphiques de la figure 5.11 par l'effet combiné de la méthode de sélection des points de l'échantillon et les termes de corrélations du krigeage. La corrélation qui est fonction de la distance entre deux points limite la propagation de ses connaissances. La connaissance qu'acquièrent les termes de corrélations sont les déviations des points par rapport à la régression globale. Dans le cas présent, ce sont tous les points ne passant pas par un plan à valeur constante β. La propagation de cette information est dictée par la distance entre les points. Si, par exemple, deux points proches annoncent un gradient fort, cette information sera propagée dans l'approximation mais de façon limitée comme on le voit sur la figure 5.14.

Le choix des points a donc une grande influence sur la précision de l'approximation. Si on peut s'assurer d'une distance caractéristique minimale entre deux points, il est probable que l'approximation soit plus stable et précis. Or le fait que la méthode de sélection des points soit aléatoire, cette longueur caractéristique minimale n'est pas toujours re-

spectée. Dans ce cas, il est nécessaire d'avoir plus de points pour atteindre la précision et la stabilité souhaitées. C'est à cet effet que l'on attribue les écart-types si prononcés des graphiques de la figure 5.11.

Le krigeage pour des fonctions à deux degrés de libertés

Les résultats des cas tests à 2 degrés de libertés permettent de connaître quelques aspects intéressants telles que la taille de l'échantillon en fonction de la complexité et la capacité qu'a le krigeage de tirer le plus d'information possible de l'échantillon.

En moyenne, la taille de l'échantillon augmente avec la fréquence des cas tests mais cette augmentation ne semble pas être linéaire comme c'est le cas des cas tests à un degré de liberté. Selon le graphique (e) de la figure 5.11, la tendance serait plutôt logarithmique mais, ceci reste à vérifier. Dans le cas où cela serait vrai, cela voudrait dire que le krigeage profite des informations qui est d'autant plus présentes dans l'échantillonnage que la fonction est complexe. Les graphiques (a) et (c) de la figure 5.11 démontrent que le krigeage peut, parfois, plus facilement approximer une fonction complexe qu'une fonction simple. Ce phénomène peut être le résultat de la combinaison du type de régression et de corrélation utilisé pour le krigeage.

Pour illustrer comment le krigeage arrive à reconnaître les corrélations entre les degrés de libertés, on introduit une notion utilisée pour l'affichage de courbes et de surfaces. En principe, une surface en D dimensions nécessite m^D points pour être bien représentées. Si, par exemple, on représente par 25 points une parabole en deux dimensions et que l'on suppose une interpolation linéaire entre chaque point, cette représentation aura une erreur absolue faible par rapport à la fonction analytique. Si maintenant on souhaite représenter une paraboloïde en trois dimensions avec la même précision que la représentation de la parabole en deux dimensions, il serait nécessaire d'utiliser en-

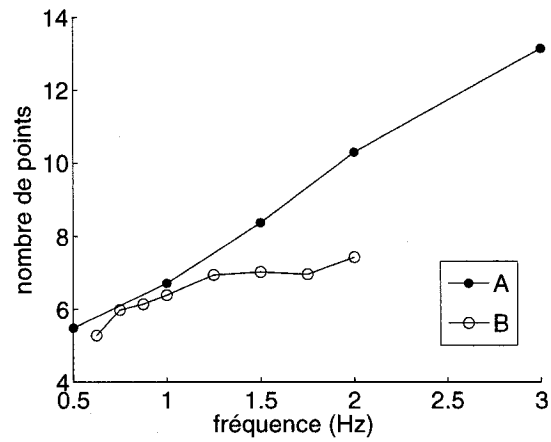


Figure 5.15 Comparaison des résultats des cas tests à un degré de liberté aux résultats cas tests à deux degrés de libertés. (A) suite des cas tests à un degré de liberté sans bruit. (B) La racine carrée des résultats de la suite de cas tests avec deux plans de symétries.

viron 150 points. Dans le cas des fonctions d'approximations, on compare le nombre de points nécessaires à la stabilité pour des cas tests à un degré et à deux degrés de libertés. Admettant une fonction d'approximation nécessitant m^d points pour une fonction exacte avec une complexité donnée, où d est le degré de liberté. Cette même fonction d'approximation nécessiterait, en principe, m^{d+1} points pour une fonction exacte d'une complexité équivalente mais avec un degré de liberté de plus. Une fonction d'approximation pouvant se démarquer de cette tendance démontrerait ainsi une capacité d'utiliser d'autant plus les informations sous-jacentes dans les échantillons. Pour connaître cette tendance, on compare les résultats des cas tests à un degré de liberté aux racines carrées des résultats à deux degrés de libertés. La figure 5.15 résume les résultats.

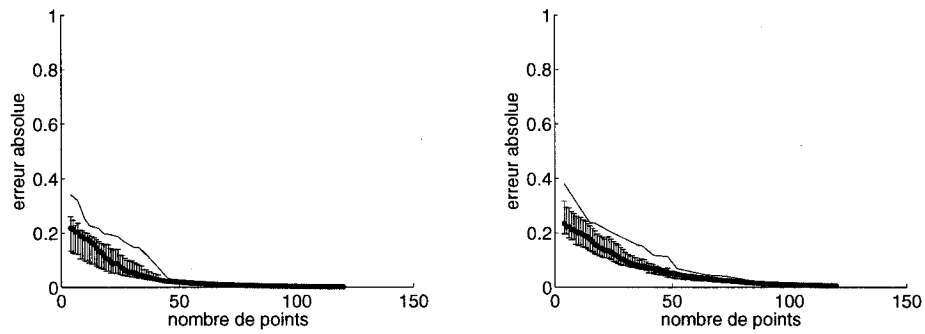
Notons que dans l'esprit de trouver une suite de fonctions à deux degrés libertés équivalentes (en terme de complexité) aux fonctions sinusoïdales des cas tests à un degré de liberté, la troisième suite, soit celle où les fonctions ont deux plans de symétries, est la plus juste. Cette suite utilise, en moyenne, moins de m^2 points où, m est le nombre

de point utilisé par les cas tests à un degré de liberté. Ceci suggère que le krigeage va effectivement chercher les informations indiquant la corrélation entre les degrés de libertés. Les deux premiers types de cas tests, axisymétrique et quasi-axisymétrique nécessitent plus de points pour les cas tests à basses fréquences mais le krigeage semble, par la suite, être capable d'approximer des cas tests compliqués avec moins de m^2 points. Ceci confirme l'affirmation que le krigeage profite bien de l'information provenant d'un échantillonnage d'une fonction dite complexe.

5.3.4 Cas tests à trois degrés de libertés

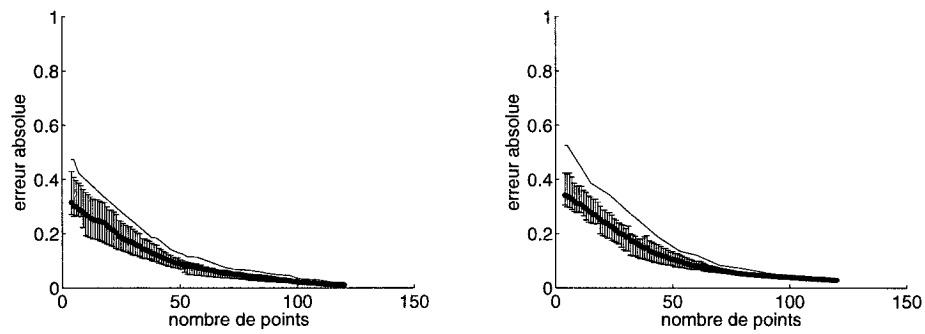
Des cas tests à trois degrés de libertés ont été préparés pour mettre le krigeage à l'épreuve. Mais le problème du critère de convergence énoncé dans la section précédente c'est manifesté dès les premiers cas tests de cette suite. Il était nécessaire d'atteindre une variation maximale de l'ordre de 10^{-6} pour satisfaire le critère d'arrêt. Or aucune approximation a réussi à atteindre cette ordre de grandeur avec des échantillonnages de 120 points. Ils nous est donc impossible de présenter des résultats en fonction de la stabilité. Par contre, on peut présenter la variation de l'erreur absolue en fonction du nombre de points pour les cinq cas tests de cette suite.

De la figure 5.16 on remarque que les approximations converger une stabilité pour les fréquences 0.5 Hz, 0.625 Hz, 0.75 Hz et 0.875 Hz même si le critère n'est pas satisfait. Deux calculs de la stabilité sont présentés ainsi que les erreurs absolues associées pour le cas test à 0.5 Hz sur la figure 5.17. On observe que la stabilité représente raisonnablement bien la tendance de l'erreur absolue.



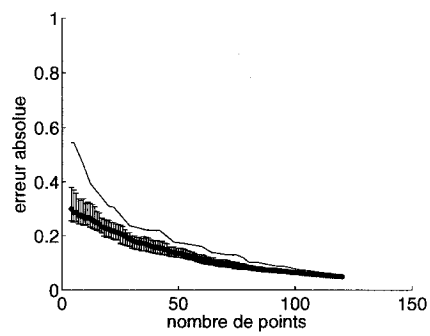
(a) 0.5Hz

(b) 0.625Hz



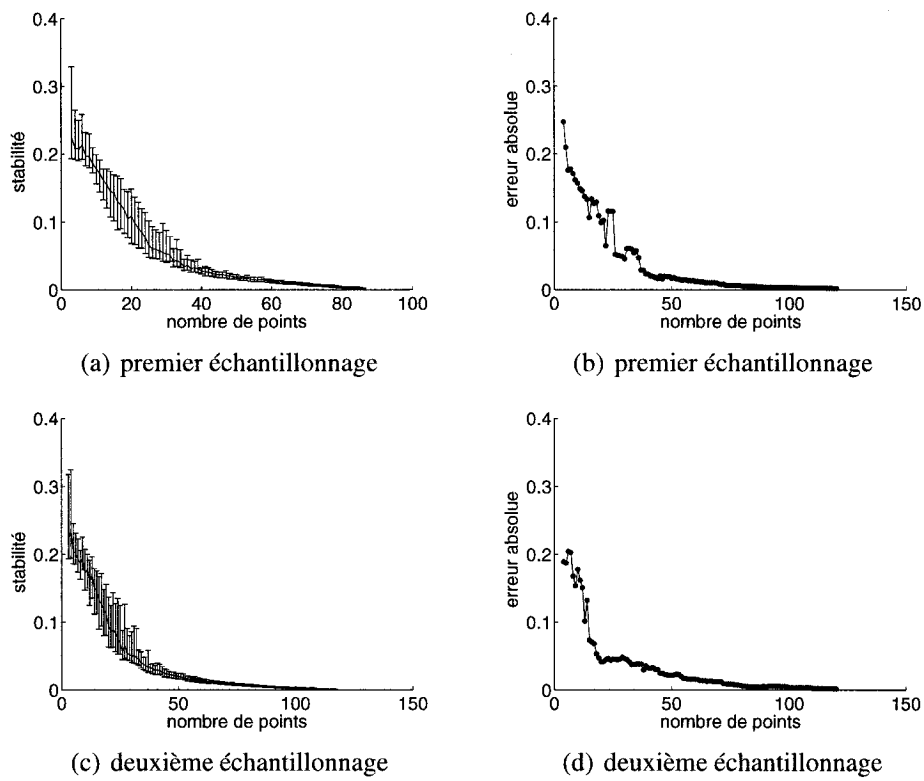
(c) 0.75Hz

(d) 0.875Hz



(e) 1Hz

Figure 5.16 Variation de l'erreur absolue en fonction de la taille des échantillons pour la suite de cas tests à trois degrés de libertés.



(a) premier échantillonnage (b) premier échantillonnage

(c) deuxième échantillonnage (d) deuxième échantillonnage

Figure 5.17 Comparaison de la stabilité et de l'erreur absolue de deux échantillonnages pour le cas tests de 0.5 Hz.

5.4 En résumé

On voit avec ces tests que le krigeage est capable de créer une approximation stable pour des fonctions assez complexes comprenant plusieurs vallées et crêtes. Dans le cas où il n'y a qu'un degré de liberté, le nombre de points nécessaires pour avoir une approximation stable semble croître linéairement avec le nombre de crêtes et de vallées dans la fonction exacte et ce, indépendamment du fait que la fonction soit bruitée. Dans le cas où le nombre de degrés de liberté est plus grand que un, le nombre de points nécessaire pour la stabilité ne semble plus varier linéairement. Nous avons observé qu'une augmentation du degré de liberté ne signifie pas une augmentation exagérée de la taille de l'échantillon. Ceci démontre bien que le krigeage utilise l'information locale sous forme de corrélation pour apporter une plus grande précision à l'approximation. Toutefois, lorsque une approximation du krigeage atteint la stabilité, la démarcation entre un état stable et un état instable est moins évidente quand le nombre de degré de liberté augmente.

CHAPITRE 6

CONCLUSION ET TRAVAUX FUTURS

L'objectif de cette maîtrise était de caractériser la performance d'une fonction d'approximation dans l'optique de l'utiliser pour faciliter le processus d'optimisation. Pour ce faire, nous avons opté pour la création d'une nouvelle façon d'évaluer la performance au lieu d'utiliser les méthodes existantes. Cette approche semble être efficace car les résultats qui en découlent donnent un aperçu plus complet des fonctions d'approximations que ceux retirés des méthodes qui utilisent une approche comparative. Soumettre la fonction d'approximation à des cas tests analytiques a permis d'évaluer sa performance pour différents scénarios. Cette approche a permis aussi de constater que la méthode d'échantillonnage peut être personnalisée suivant la fonction d'approximation.

Cette méthode fait dans un premier temps, la caractérisation des fonctions d'approximations. Mais elle peut aussi servir à la caractérisation des fonctions exactes car, une fois que l'on connaît le comportement de la fonction d'approximation pour certaines complexité, il nous sera possible d'associer une complexité à une approximation d'une fonction exacte inconnue.

La caractérisation telle que présentée dans ce mémoire permet de caractériser le comportement des fonctions d'approximations. Toutefois, il est apparent que des améliorations à la méthode seraient souhaitables pour en augmenter l'efficacité.

6.1 Précision et travaux futurs pour la méthode de caractérisation

Critère d'arrêt

Parmi les aspects à améliorer, la définition d'un nouveau critère d'arrêt est primordiale. Le critère proposé se base sur une mesure de stabilité et il tend à identifier des approximations qui ont déjà convergées à toute fin pratique. Le critère idéal devrait être capable de détecter la transition entre la zone instable et la zone stable.

Méthode d'échantillonnage

Un autre aspect qui devrait être amélioré est la méthode d'échantillonnage. La méthode d'échantillonnage aléatoire utilisée pour la caractérisation du krigeage est "trop parfaite" car elle est universelle et offre un échantillonnage non-biaisé. Mais dans le contexte d'une application en milieu industrielle, il serait préférable d'adapter la méthode d'échantillonnage afin de respecter plutôt une longueur caractéristique minimale. Cette longueur, n'étant pas connue a priori, devra être établie pendant l'échantillonnage. Ceci veut dire qu'il n'est pas possible de faire la sélection de tous les points potentiels dans le domaine de travail tel qu'il est faite présentement.

Ce qui suit est un exemple de ce à quoi pourrait ressembler la méthode d'échantillonnage pour le krigeage. Cette méthode serait une version modifié de l'hyper cube latin. Le domaine de travail serait divisé en sous-domaine, tel qu'on le fait habituellement pour l'hyper-cube latin. Le nombre de sous-domaines, et donc le nombre de points dans l'échantillon, serait défini par le maximum de fois que l'on souhaite évaluer la fonction exacte. Une fois le domaine divisé, on ne choisit que le nombre minimum de sous-domaines nécessaire pour évaluer la fonction d'approximation. Cette sélection peut être aléatoire ou peut suivre une règle quelconque. Pour chaque sous-domaine, un point est

choisi. Le choix de la position du point dans le sous-domaine peut aussi être soit aléatoire ou peut suivre une règle quelconque. Si l'approximation n'a pas atteint la stabilité, un sous-domaine n'ayant pas de point est choisi et un nouveau point y est inséré. Cette approche assure, dans le pire des cas, que l'échantillonnage sera représentatif de tous le domaine de travail.

La stabilité

Le calcul de la stabilité est un outil qui permet de discerner si l'approximation est stable et, suivant quelques prémisses, peut déterminer si l'approximation est représentative de la fonction exacte. Cependant, on y retrouve tout de même quelques limites. Dans le cas où la fonction exacte est d'une grande dimensionnalité, il se peut que la transition vers une approximation stable ne soit pas très bien démarquée. La stabilité semble bien démarquer quand l'approximation diverge de la fonction exacte mais, une mauvaise interprétation de cette information pourrait induire en erreur.

Le principe de la stabilité semble bien fonctionner pour des approximations utilisant des fonctions de bases. Or il est peu probable que des approximations paramétrisées telle qu'un polynôme de Lagrange ou des régressions polynômiales démontreraient le même comportement de stabilité. Il est donc préférable de n'utiliser cette méthode qu'avec des approximations non-paramétrisées.

Le calcul de la stabilité semble bien représenter l'évolution de l'approximation même si le nombre de sous-ensembles n'est pas statistiquement représentatif. Ceci dit, il serait bien, pour légitimer l'outil, de tester plus rigoureusement cette affirmation.

Cas tests

Les cas tests utilisés dans ce mémoire ont été développés sous deux suppositions. La première suppose que la réponse de la boucle d'analyse est continue sur tout le domaine et la deuxième suppose que le bruit est indépendant de la moyenne. On a démontré que pour une modélisation d'une aube en deux dimensions, ces deux suppositions tiennent. Or il reste à démontrer que ces suppositions tiennent pour des modélisations en trois dimensions d'écoulements incompressibles et, à la rigueur, le démontrer aussi pour des modélisations d'écoulements compressibles avec chocs.

6.2 Le krigeage

Le krigeage est une fonction d'approximation qui réussit à représenter une fonction exacte avec peu de points. Il offre à l'utilisateur la chance de personnaliser l'approximation en choisissant une fonction de régression et une fonction de corrélation parmi plusieurs ou alors en créer de nouvelles. Il offre aussi à posteriori la chance d'étudier l'approximation par le biais des matrices de régressions et de corrélations. Or il est rare que le type de régression et de corrélation permettant de mieux approximer la fonction exacte soit connu à priori. C'est dans cette optique qu'une méthode d'application a été proposée dans le chapitre du krigeage.

Un détail sur les calculs qu'effectue le krigeage : l'optimisation itérative qui est accomplie pour connaître les coefficients de régressions et de corrélations serait un bon sujet d'étude. Cette étude analyserait, dans un premier temps, s'il est possible de trouver une solution analytique à cette optimisation. Si celle-ci n'existe pas, l'étude se pencherait sur la sélection d'un optimiseur itératif plus efficace.

6.3 Conclusion

Le but de ce travail était de concevoir une nouvelle façon d'évaluer la performance de fonctions d'approximations selon quelques critères. Nous avons identifié avant tout deux besoins essentiels dans l'optimisation : l'assurance d'une bonne représentativité de la fonction exacte par une approximation et l'opportunité d'avoir une information accrue de la fonction exacte. Pour satisfaire ces besoins, deux taches on été accomplies. Nous avons développé une méthodologie permettant de connaître l'influence de la dimensionalité, du bruit et de la complexité sur la précision d'une approximation. Cette méthodologie utilise des cas tests conçus avec des fonctions sinusoïdales et échantillonne le domaine de travail de façon aléatoire. Nous avons aussi établie un critère pouvant discerner le nombre de points nécessaires pour assurer la représentativité. Ces deux tâches satisfont les besoins décrits ci-haut en nous renseignant sur la complexité d'un problème selon sa dimensionalité et le nombre de point nécessaire pour avoir une approximation stable.

Le principe d'échantillonner de façon aléatoire pour reconstruire une fonction qui est sinusoïdale s'apparente un peu à une analyse fréquencielle mutlidimensionnelle que l'on retrouve en génie électrique. On remarque d'ailleurs qu'il y a des efforts consacrées à la reconstruction de signaux où le but est d'assurer que ceux-ci soit bien représentés par leurs approximations. Il serait alors intéressant d'explorer ce domaine de recherche pour voir s'il est possible d'appliquer leurs outils à nos problèmes.

En somme, il y a quelques travaux à faire pour perfectionner la méthode de caractérisation. Ces travaux permettraient dans un premier temps à assurer une bonne caractérisation des fonctions d'approximations et, dans un deuxième temps de caractériser des fonctions exactes dans un milieu industriel.

Maintenant que la structure de la caractérisation est en place, une prochaine étape serait

de caractériser plusieurs autres fonctions d'approximations, permettant ainsi de voir comment elles se comparent les unes aux autres.

BIBLIOGRAPHIE

ALEXANDROV, N. M. ET LEWIS, R. M. 2000. "First-order Frameworks for Managing Models in Engineering Optimization". *1st International Workshop on Surrogate Modelling and Space Mapping for Engineering Optimization.*

ALEXANDROV, N. M., NIELSEN, E. J., LEWIS, R. M. ET ANDERSON, W. K. 2000. "First Order Model Management with Variable-Fidelity Physics Applied to Multi-Element Aifoil Optimization". *8th AIAA/NASA/USAF/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Long Beach, CA.* No. 2000-4886, 1 – 7.

BATILL, S. M., RENAUD, J. E. ET GU, X. 2000. "Modeling and Simulation Uncertainty in Multidisciplinary Design Optimization". *8th AIAA/NASA/USAF/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Long Beach, CA.* American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., no. AIAA-2000–4803, 1–11.

BLOTTNER, F. G. 1990. "Accurate Navier-Stokes Results for a Hypersonic Flow over a Spherical Nosetip". *AIAA Journal of Spacecraft and Rockets*, 27, 113–122.

BOEHM, B. W. 1981. *Software Engineering Economics.* Prentice-Hall.

CHUNG, H.-S. ET ALONSO, J. J. 2000. "Comparison of Approximation Models with Merit Functions for Design Optimiszation". *8th AIAA/NASA/USAF/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Long Beach, CA.* No. 2000-4754, 1 – 16.

CHUNG, H.-S. ET ALONSO, J. J. January 14–17, 2002. "Using Gradients to Construct Construct Cokriging Approximation Models for High-Dimensional Design Optimization Problems". *AIAA 40th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.* No. 2000-0317, 1 – 15.

DOMINIK, C. 1994. "Application of the Incompressible Navier-Stokes Equations to High-Lift Flows". Rapport technique AIAA-94–1872, American Institute of Aeronautics and Astronautics.

ELDRED, M. S., GIUNTA, A. A. ET COLLIS, S. S. 2004. "Second-Order Corrections dor Surrogate-Based Optimization with Model Hierarchies". *10th AIAA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Albany, NY.* No. 2004-4457, 1 – 15.

GIUNTA, A. A. 2002. "Use of Data Sampling, Surrogate Models, and Numerical Optimization in Engineering Design". *AIAA 40th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.* Reno, NV, no. AIAA-2002–0538.

JEON, K.-S., LEE, J.-W. ET CHOI, J.-H. January 14–17, 2002. "Efficient System Optimization Techniques Through Subspace Decomposition and Response Surface Refinement". *AIAA 40th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.* Reno, NV, no. AIAA-2002–0321.

JONES, D. 2001. "A Taxonomy of Global Optimization Methods Based on Response Surfaces". *Journal of Global Optimization*, 21, 345 – 383.

KHURI, A. I. 1987. *Response Surfaces : Designs and Analyses.*

KOCH, P. N., WUJEK, B., GOLOVIDOV, O. ET SIMPSON, T. W. 2002. "Facilitating Probabalistic Multidisciplinary Design Optimization Using Kriging Approximation Models". *9th AIAA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Atlanta, GA.* 9th AIAA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimisation, no. AIAA 2002-5415, 1–11. Bibliothèque Mathématiques et informatiques, pavillon André-Aisenstadt, Université de Montr?al.

LIU, W. ET BATILL, S. M. 2000. "Gradient-Enhanced Neural Network Response Sur-

face Approximations". *8th AIAA/NASA/USAF/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Long Beach, CA*. No. 2000-4923, 1 – 11.

LONG, L. 2003. "Optimisation d'aubes avant directices d'une turbine hydraulique de type Francis". Projet de Fin d'étude. Dans les archives du laboratoire LUMINOS.

LOPHAVEN, S. N., NIELSEN, H. B. ET SONDERGAARD, J. 2002a. "Aspects of the Matlab Toolbox Dace". Rapport technique IMM-REP-2002-13, Technical Universaty of Denmark.

LOPHAVEN, S. N., NIELSEN, H. B. ET SONDERGAARD, J. 2002b. "Dace, A Matlab Kriging Toolbox". Rapport technique IMM-TR-2002-12, Technical Universaty of Denmark.

MATHERON, G. 1965. *Les variables régionalisées et leurs estimations*. Masson et Cie. QA 273 M384 Polytechnique de Montréal.

MATHERON, G. 1970. *La théorie des variables régionalisées et ses applications*. Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique de Fontainebleau. QA 273 M39 Polytechnique Montréal.

MATHERON, G. 1989. *Estimating and Choosing: an essay on probability in practice*. Springer-Verlag. QA 273 M2813 1989.

MCKAY, M. D., BECKMAN, R. J. ET CONOVER, W. J. 1979. "A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from Computer Code". *Technometrics*, 21, 239–245.

MYERS, R. H., MONTGOMERY, D. C. ET VINING, G. G. 2002. *Generalized Linear Models*. Wiley series in probability and statistics. John Wiley and Sons,Ltd. QA 276 M94 2002, Polytechnique Montréal.

OBERKAMPF, W. L., DELAND, S. M., RUTHERFORD, B. M., DIEGERT, K. V. ET ALVIN, K. F. 2002. "Error and Uncertainty in Modeling and Simulation". *Reliability Engineering and System Safety*, 75, 333–357.

OBERKAMPF, W. L. ET HELTON, J. C. 2004. *Engineering Design Reliability Handbook*, CRC Press LLC, chapitre 10 – Evidence Theory for Engineering Applications. 10.1 – 10.30.

ROACHE, P. J. 1998. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico, USA.

ROGERS, S. 1993. "Progress In High-Lift Aerodynamic Calculations". Rapport technique AIAA-93–0194, American Institute of Aeronautics and Astronautics. Dans les archives du lab.

SACKS, J., WELCH, W. J., MICHELL, T. J. ET WYNN, H. P. 1989. "Design and Analysis of Computer Experiments". *Statistical Science*, 4, 409–423. Université de Montréal, faculté de Math.

SPALART, P. R. ET ALLMARAS, S. R. 1992. "A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows". *AIAA 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. Reno, NV, no. 92–0439.

SPELLUCCI, P. 1999. *DONLP2 Users Guide*. Programme et documentation disponibles au `ftp://plato.la.asu.edu/pub/donlp2/`.

SRIVASTAVA, A., HACKER, K. ET LEWIS, K. January 14–17, 2002. "Development of a Kriging Based Surrogate Approximation Method for Large-Scale Systems". *AIAA 40th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 1–15.

ZLOBEC, S. 2001. *Stable Parametric Programing*. Kluwer.

ANNEXE I

VÉRIFICATION ET VALIDATION DE LA BOUCLE D'ANALYSE DE L'AUBE AVANT-DIRECTRICE

I.0.1 Vérification et validation d'une boucle d'analyse de CFD

La vérification accomplie ici est seulement celle du cas particulier de l'aube avant directrice. On suppose que le code de CFD FLUENT à été suffisament vérifié. La validation de la modélisation sera accomplie en justifiant le choix du modèle de turbulence, des conditions aux frontières et des conditions initiales. Aucune comparaison avec des données expérimentales n'est effectuée cas celles-ci ne sont pas disponibles.

Compromis et hypothèses

Le but de la vérification, selon Roache (1998), est de connaître l'erreur associée à la solution. Cette erreur permet d'avoir une certaine confiance dans la solution numérique avant même de la comparer aux résultats expérimentaux. Le calcul de l'erreur, dans notre cas, sert plutôt à démontrer que la solution a une certaine stabilité et qu'il est pertinent de l'utiliser comme référence pour définir des cas tests vraisemblants.

Dans un contexte de vérification rigoureuse, chaque variation de la géométrie ou des conditions de l'écoulement nécessiterait une vérification. Une étude de cette envergure est très coûteuse et n'est donc pas réellement envisageable. L'alternative est de proposer l'hypothèse suivante : *Advenant un maillage ayant une topologie fixe pour toute variation géométrique du domaine. Advenant aussi que les mailles respectent les critères d'une métrique qualitative pour toute variation de la géométrie du domaine. Si le mail-*

lage pour une géométrie donnée converge, alors le maillage converge pour toutes autres géométries. On entend ici par convergence du maillage l'indépendance de la solution par rapport au maillage au fur et à mesure que celui est raffiné. Cette hypothèse est applicable aux maillages structurés. Or le maillage dans ce travail est mixte : structuré dans la zone correspondant à la couche limite et non structuré pour le reste du domaine. La topologie du maillage change donc en fonction de la géométrie. Il est alors nécessaire de modifier l'hypothèse : *Supposons qu'il y a des maillages représentant chacun une variante de la géométrie. Advenant que la topologie des maillages est très similaire. Advenant aussi que les mailles respectent les critères d'une métrique qualitative. Si une suite de ces maillages converge, alors toutes les suites de maillages convergent.* Cette hypothèse est théoriquement vérifiable, quoiqu'elle nécessiterait une infinité de calcul. Dans le cas de la modélisation ci-présente, une vérification de l'hypothèse consiterait à évaluer la convergence du maillage pour toutes variations possibles de la géométrie.

Source potentielle d'erreur

Bien qu'il y ait plusieurs sources d'erreurs dans un calcul numérique, la convergence de la solution pour un maillage donné à une grande influence sur les résultats. La précision de la solution est dépendante des résidus des calculs effectués par le code de CFD. Pour minimiser cette source d'erreur, la tendance d'une grandeur caractéristique globale en fonction des résidus sera observée. L'idée est de s'assurer que la grandeur caractéristique tend vers une valeur asymptotique.

La modélisation et sa validation

La discrétisation du domaine et le calcul de l'écoulement sont accomplis avec les logiciels fournis par la compagnie Fluent, soit Gambit version 2.1.2 et Fluent 6.1.22.

Le domaine La géométrie 2D considérée est une aube d'avant directrice d'une turbine Francis. Le domaine de calcul débute à la bâche spirale et finit à l'entrée de la roue. La figure I.1 schématise le domaine. On retrouve typiquement dans une turbine 20 aubes avant directrices. L'idéal serait de modéliser les 20 aubes mais cela serait trop coûteux en temps et en ressource de calcul. Alors, le domaine de calcul choisi ne représente qu'une avant-directrice.

Les frontières supérieures et inférieures du domaine sont de l'eau. On impose dans ce cas une condition aux frontières de type périodique. L'entrée de l'eau dans le domaine est représentée par un profil de vitesse. Ce profil décrit comment l'eau sort de la bâche spirale. La sortie est représentée par une condition de pression constante. Il est justifiable d'utiliser cette condition car la sortie est loin à l'aval de l'aube et le profil d'écoulement à la sortie est supposé uniforme. De plus, de toutes les conditions frontières testées, celle-ci donne la meilleure convergence.

Le but principal de la modélisation est de déterminer la perte de pression entre l'amont et l'aval de l'aube. Une paroi imaginaire est placée directement à l'aval de l'aube pour calculer la pression à la sortie.

L'aube est entièrement définie par une NURBS. Celle-ci débute et finit au bord de fuite en passant par l'extrados, le bord d'attaque et l'intrados. La NURBS utilisée n'est pas une courbe fermée et le bord de fuite a une épaisseur non nulle. Le bord de fuite est défini par un segment de droite liant le premier point de la NURBS au dernier point.

L'eau entre dans le domaine à une vitesse de 15 m/s et à un angle de 15 degrés. La pression de référence est prise à la coordonnée $(0, 0)$. Plus de détails sur la modélisation sont donnés par Long (2003).

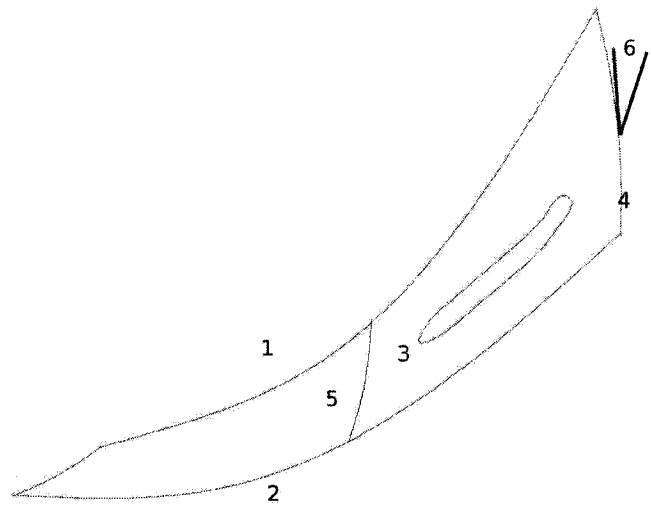


Figure I.1 Le domaine de calcul pour l'étude d'écoulement autour d'une aube avant directrice. 1,2 : condition de type périodique imposée à ces frontières. 3 : aube avant-directrice. 4 : entrée du domaine. 5 : section où la pression de sortie est calculée. 6 : angle d'entrée

Le maillage Le maillage idéal pour ce type de problème serait structuré. Ceci assurerait une bonne représentation de l'écoulement dans tout le domaine et surtout à la paroi de l'aube. Malheureusement ce type de maillage n'a pu être utilisé pour deux raisons. La forme du domaine impose une déformation inacceptable des mailles. Bien des astuces auraient permis de contourner ce problème mais celles-ci n'ont pu être utilisées, à cause de limitations du mailleur Gambit. La deuxième complication est le changement de la géométrie. Étant donné que ce maillage sera utilisé pour explorer une grande variété de géométries du bec de l'aube, il est nécessaire que le maillage puisse s'adapter. Or Gambit ne peut adapter un maillage structuré pour des géométries de formes extrêmes. L'alternative, que nous avons choisi, est d'imposer un maillage de couche limite sur l'aube et de mailler le reste du domaine en non structuré.

La modélisation de la turbulence Les modèles de turbulence suggérés pour ce genre de scénario sont ceux du type à une équation. On retrouve par exemple le modèle de

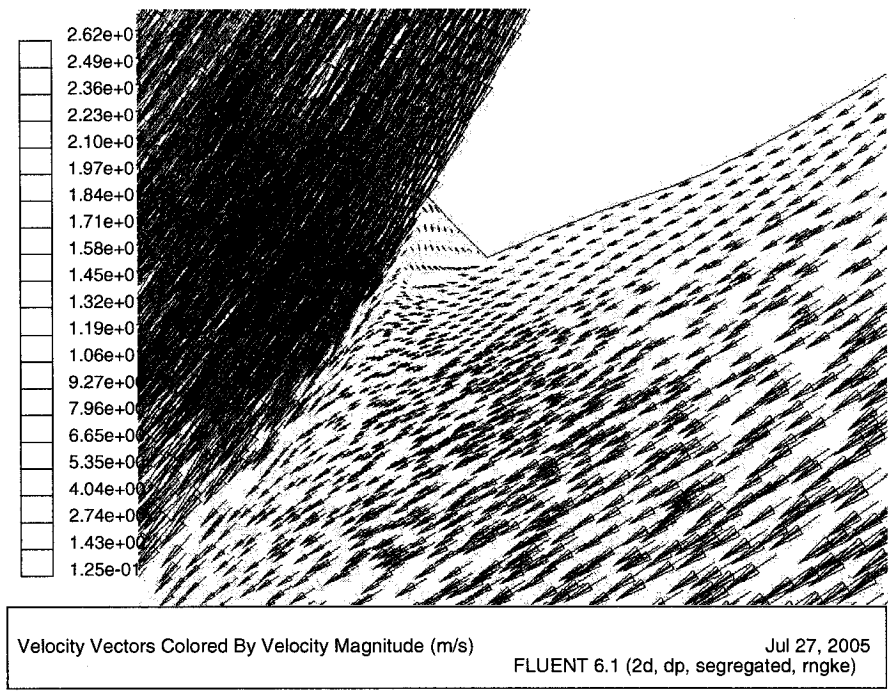


Figure I.2 Turbulence au bord de fuite de l'aube modélisée avec RNGK-ϵ.

Baldwin-Barth qui, d'après Rogers (1993), modélise bien les profils à grande portance. Le modèle de turbulence utilisé dans ce travail est celui de Spalart-Allmaras (voir Spalart et Allmaras (1992)). D'après Dominik (1994), il est réputé bien représenter le décrochage en compressible et en incompressible. Les figures I.2 et I.3 montrent comment le modèle de Spalart-Allmaras permet de bien capturer le décrochage au bord de fuite de l'aube.

La vérification

La vérification du code est accomplie à l'aide de la méthodologie élaborée par Roache (1998). Cependant, avant d'attaquer la vérification, une petite étude est faite pour connaître le ratio idéal entre le nombre de maille dans la couche limite et nombre de maille dans le reste du domaine. Le but de cette exercice est d'avoir au final le maillage le

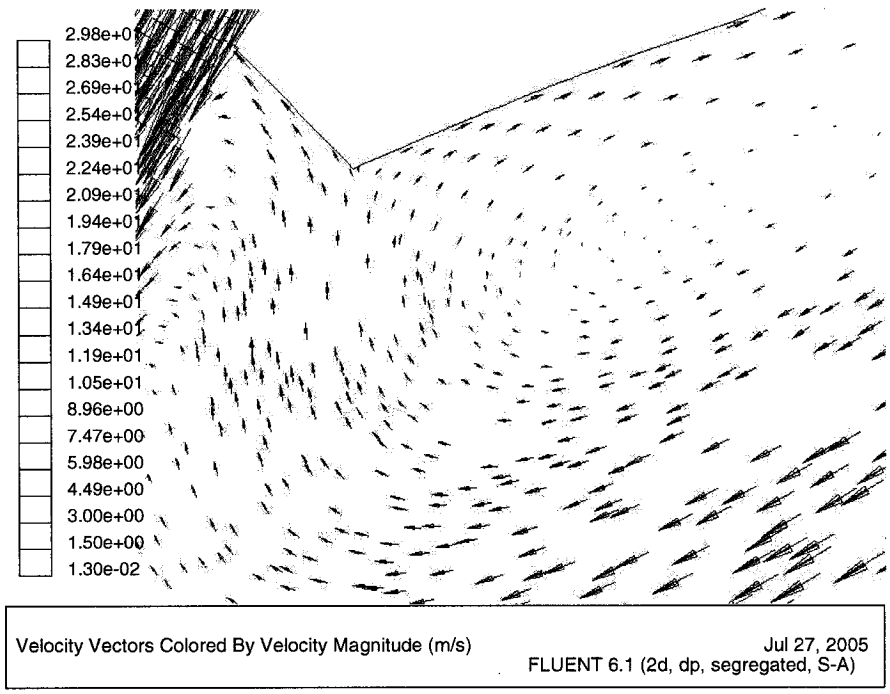


Figure I.3 Turbulence au bord de fuite de l'aube modélisée avec Sparlat-Allmaras.

plus fin que Gambit peut produire avec un ratio raisonnable pour les différentes types de mailles dans le domaine. L'approche, inspirée de la méthodologie de Roache, cherche à connaître le nombre de mailles nécessaire pour qu'il y ait indépendance de la grandeur caractéristique par rapport au maillage. Pour simplifier cette étude, les variables du maillage sont regroupées en trois paramètres : les directions u et v dans le maillage de la couche limite et S, l'intervalle des mailles sur les arêtes du domaine. Ce dernier contrôle la taille des mailles non structurées dans le domaine. Il est alors possible de varier ces trois paramètres et voir comment réagit la grandeur caractéristique. Étant donnée que le but est de trouver le maillage le plus raffiné, le paramètre v est fixé à son minimum, soit la valeur idéal pour y^+, et seul les paramètres u et S seront variés.

Ce qui suit est une synthèse de la démarche élaborée par Roache. Dans un premier temps, 15 calculs CFD ont été fait avec 15 différents maillages, tous maillés selon la même géométrie du domaine. Trois des résultats sont utilisés pour calculer la conver-

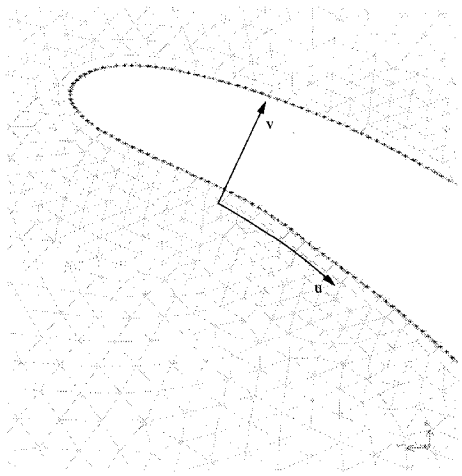


Figure I.4 Paramétrisation du maillage de la couche limite.

gence, pour extrapoler la valeur de la grandeur caractéristique pour un maillage infiniment raffiné et pour connaître les bornes d'erreurs. L'ordre de convergence est calculé selon

$$p = \ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right) / \ln(r)$$

où f_i est la valeur de la fonction coût pour le maillage i, r le ratio de raffinement entre les maillages et p l'ordre convergence. Le maillage $i = 1$ est le plus raffiné et $i = 3$ est le plus grossier. La variable f_i peut représenter n'importe quelle valeur obtenue par le calcul numérique : la vitesse en un point, l'intensité de la turbulence, etc. Cependant, le choix de la différence de pression entre l'entrée et la sortie permet de connaître l'ordre de convergence sur tout le domaine. En général, on crée les maillages de sorte que le ratio $r = h_1/h_2$ soit constant, h_i étant la longueur des mailles. Or le ratio n'a pu être gardé constant pendant le raffinement du maillage dans ce travail et donc une valeur équivalente a du être utilisée. Cette valeur est donnée par

$$r = \left(\frac{N_1}{N_2}\right)^{1/D} \tag{I.1}$$

où D est la dimension du problème, N_i le nombre d'éléments dans le maillage i. Il arrive que r ne soit pas constant, c'est à dire que $r_{12} \neq r_{23}$. Il est impossible, dans ce cas, de trouver l'ordre de convergence avec l'équation I.1. Il existe tout de même une équation transcendantale pouvant calculer l'ordre avec des ratios non constants :

$$
\begin{aligned}
p_{j+1} &= \omega p_j + (1-\omega)\frac{\ln(\beta)}{\ln(r_{12})} \\
\beta &= \frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_{23}}\frac{r_{12}{}^{p_j}-1}{r_{23}{}^{p_j}-1} \\
\epsilon_{12} &= \frac{f_2-f_1}{f_1} \\
\epsilon_{23} &= \frac{f_3-f_2}{f_2}
\end{aligned}
$$

ω est une constante bornée $0 \leq \omega \leq 1$. Les termes ϵ_{12} et ϵ_{23} sont les erreurs relatives des maillages. Une fois que p est connu, on peut calculer la valeur extrapolée de la différence de pression. Son équation est

$$f_{h=0} = f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1}$$

Les bornes de l'erreur pour la solution numérique est

$$GCI_{fine} = \frac{F_s|\epsilon_{12}|}{r^p - 1}$$

GCI_{fine} est la valeur des bornes en pourcentage pour une série de maillage fins et F_s est le facteur de sécurité. L'équation est légèrement modifiée dans le cas où des maillages grossiers sont utilisés (voir Roache (1998)). Le facteur de sécurité est soit trois dans le cas où seulement deux maillages sont utilisés pour calculer l'erreur, soit 1.25 dans le cas où trois maillages sont utilisés. Finalement les bornes de l'erreur pour la solution

numérique sont

$$f_1 \left(1 - GCI_{fine}\right) \leq f_{h=0} \leq \left(1 + GCI_{fine}\right) f_1$$

Pour que tous ces calculs soient valides, on doit être dans la zone asymptotique de la convergence du maillage. On vérifie cette condition avec la comparaison

$$GCI_{23} = r^p GCI_{12}$$

où GCI_{23} et GCI_{12} sont les GCI_{fine} calculés avec les maillages deux trois et les maillages un deux respectivement.

Résultats

Les 15 maillages utilisés ont entre 3236 et 125731 mailles. Le nombre maximum de mailles est décidé par les limites de Gambit et l'ordinateur utilisé. Le nombre minimum est décidé de façon plus qualitative. On remarque que la grandeur caractéristique devient très bruitée lorsque le nombre de mailles est sous un certain minimum. Pour assurer la qualité des maillages, un maximum de 0.7 est imposé selon la métrique *equi angle skew* de Gambit. Il a donc été nécessaire de faire quelques ajustements sur quelques maillages pour respecter ce maximum.

Raffinement du maillage et convergence des résidus Le raffinement de la couche limite et du domaine ont donné les résultats que l'on observe sur la figure I.5. On remarque que la perte de pression converge bien vers une valeur asymptotique lorsque le nombre de mailles sur le domaine augmente. Or ce n'est pas le cas avec la couche limite. Son comportement est plutôt étrange mais pas unique (on remarque un problème similaire dans la section suivante). Une étude approfondie de cette anomalie serait

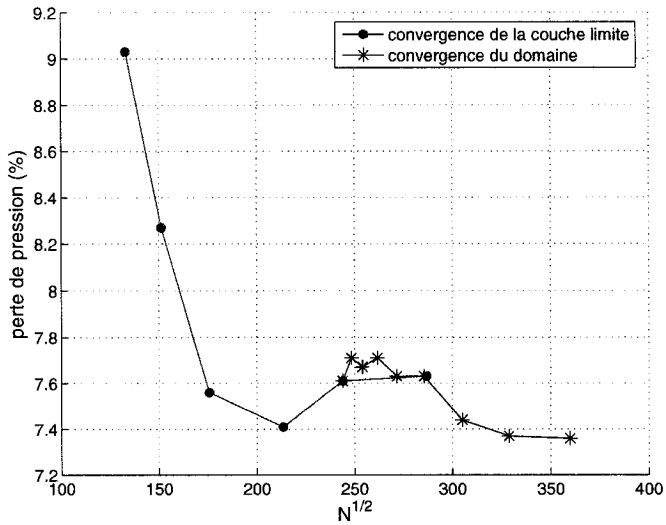


Figure I.5 Convergence du maillage selon les valeurs de la grandeur caractéristique. Ces deux convergences sont les résultats des variations individuelles du nombre de maille dans la couche limite et dans le domaine. À noter: l'abscisse représente le nombre total de mailles dans le domaine de calcul. Si la couche limite semble avoir une plus grande influence sur toute le domaine c'est que les mailles non structurées voisines subissent aussi un raffinement afin que le maillage soit de bonne qualité.

souhaitable mais elle dépasse l'optique de ce mémoire. On doit donc se contenter de ces résultats pour choisir le rapport entre le maillage structuré et non structuré. Le rapport est calculé en utilisant pour le domaine, la configuration obtenue pour l'avant dernier maillage et pour la couche limite, la configuration obtenue pour l'avant dernier maillage. Ces maillages sont représentés respectivement par les points situés à $N^{\frac{1}{2}} = 245$ et $N^{\frac{1}{2}} = 325$ sur la figure I.5.

L'erreur induite par la précision de la résolution des équations principales est minimisée en assurant une convergence à 10^{-6} (voir figure I.6).

Calcul de l'ordre de convergence La figure I.7 illustre la convergence de la solution en fonction de la taille du maillage. Les trois derniers maillages sont utilisés pour les

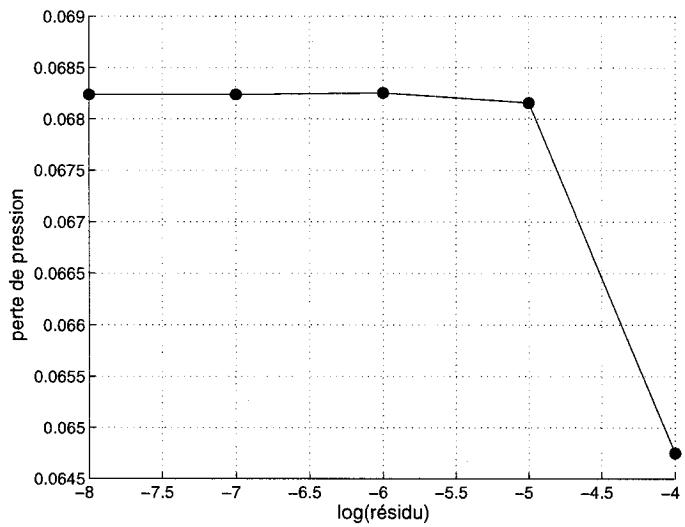


Figure I.6 La convergence de la grandeur caractéristique en fonction des résidus.

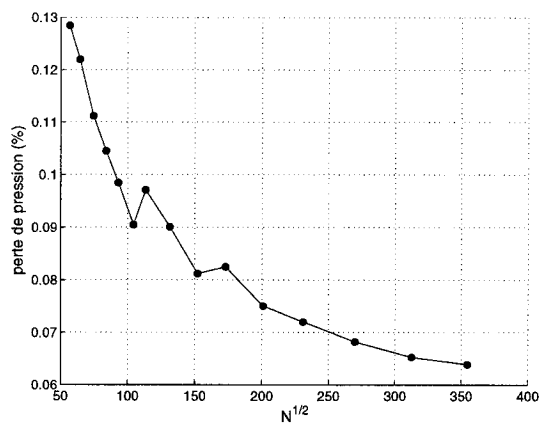


Figure I.7 Convergence du maillage selon les valeurs de la fonction coût. Cette convergence est calculé selon la méthodologie de Roache (1998)

Tableau I.1 Résultats obtenu pour les calculs de la vérification.

$p = 0.8796$	$r = 1.1586$	$GCI_{fine} = 41.17\%$	$f_{h=0} = 0.0438$

calculs du GCI. Le tableau I.1 résume les résultats. Une première remarque doit être faite à propos de r. Roache suggère que le rapport entre les maillages soient supérieur à 1,1 pour minimiser toutes sources de bruit tels que la discrétisation, la troncature, etc. Bien que le ratio idéal serait de deux, le ratio obtenu avec ces maillages est toute même acceptable.

La convergence obtenue semble raisonnable. Bien que Fluent ait utilisé des méthodes de deuxième ordre pour les calculs des équations Navier-Stokes, les conditions particulières du cas calculé font en sorte que la résolution globale du problème soit d'ordre un ou moins.

Les trois maillages sont bien dans la zone asymptotique mais de justesse. L'idéal serait d'avoir un GCI plus faible, apportant plus de confiance à la solution numérique mais ceci nécessiterait un maillage plus fin que celui obtenu.

Conclusion

L'objectif de ce travail était de vérifier et de valider la modélisation d'une aube d'avant-directrice. Bien que la complexité de la géométrie du domaine de calcul était problématique, il a été toute même possible de montrer qu'en raffinant le maillage ont obtient une solution qui converge.

N'ayant pas de valeurs expérimentales, on ne peut faire autrement que se contenter de la validation par justification. Ceci dit, on a réussi à justifier les aspects les plus influents de la modélisation.

On peut donc conclure que cette modélisation est représentative de l'écoulement autour d'une aube d'avant-directrice et, pour les fins de vraisemblance, elle est représentative d'une modélisation typique en CFD.

Tableau I.2 Variation de la couche limite. Tableau d'information des maillages.

maillage testé		1	2	3	4	5	6
informations des maillages	nombre de maille	17725	22885	30877	45553	59485	82317
	skew max du maillage	0.61	0.61	0.61	0.63	0.63	0.61
	bord de fuite	0.035	0.035	0.035	0.035	0.035	0.035
	intra et extra	0.45	0.36	0.288	0.18	0.14	0.112
	bord d'attaque	0.15	0.12	0.096	0.07	0.056	0.045
	périodique fi n écoulement	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	périodique intérieur	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	entrée sorti et interface	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	couche limite: 1^{iere} maille	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
	couche limite: agrandissement	1.000001	1.000001	1.000001	1.000001	1.000001	1.000001

Tableau I.3 Variation de la couche limite. Résultats de l'étude de convergence des maillages.

maillage testé	1	2	3	4	5	6
pression entrée	219103.53	223187.92	218084.81	231481.42	236222.11	236269.08
pression sortie	199328.73	204739.59	201597.72	214319.5	218256.44	218232.00
fonction coût	9.03%	8.27%	7.56%	7.41%	7.61%	7.63%
itération de fluent	1047	1655	1931	2361	3209	4925
temps de calcul	0:05:00	0:20:00	0:25:00	0:30:00	0:50:00	1:10:00
convergence continuité	9.9601e-6	9.9842e-6	9.9555e-6	9.9412e-6	9.9783e-6	9.684e-6
vitesse en x	3.5856e-7	4.4718e-7	4.4016e-7	6.0772e-7	5.8271e-7	4.8184e-7
vitesse en y	3.6161e-7	5.0465e-7	5.5501e-7	7.6752e-7	7.2493e-7	5.2167e-7
nut	2.3082e-6	2.3444e-6	2.7491e-6	6.5009e-6	3.8599e-6	3.7337e-6

Tableaux de données et de résultats

Tableau I.4 Variation du nombre de mailles sur les arrêtes du domaine. Tableau d'information des maillages.

maillage testé		1	2	3	4	5
informations des maillages	nombre de mailles	59485	61681	64542	68492	73772
	skew max du maillage	0.61	0.61	0.63	0.62	0.62
	bord de fuite	0.035	0.035	0.035	0.035	0.035
	intra et extra	0.14	0.14	0.14	0.14	0.14
	bord d'attaque	0.056	0.056	0.056	0.056	0.056
	périodique fi n écoulement	1.0	0.8	0.64	0.51	0.41
	périodique intérieur	1.0	0.8	0.64	0.51	0.41
	entrée sortie et interface	1.0	0.8	0.64	0.51	0.41
	couche limite: 1^{iere} maille	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
	couche limite: agrandissement	1.000001	1.000001	1.000001	1.000001	1.000001

maillage testé		6	7	8	9
informations des maillages	nombre de maille	81524	93003	108037	129492
	skew max du maillage	0.64	0.65	0.65	0.62
	bord de fuite	0.035	0.035	0.035	0.035
	intra et extra	0.14	0.14	0.14	0.14
	bord d'attaque	0.056	0.056	0.056	0.056
	périodique fi n écoulement	0.33	0.26	0.21	0.0.17
	périodique intérieur	0.33	0.26	0.21	0.17
	entrée sorti et interface	0.33	0.26	0.21	0.17
	couche limite: 1^{iere} maille	0.03	0.03	0.03	0.03
	couche limite: agrandissement	1.000001	1.000001	1.000001	1.000001

Tableau I.5 Variation du nombre de mailles sur les arrêtes du domaine. Résultats de l'étude de convergence des maillages.

maillage testé	1	2	3	4	5
pression entré	236222.11	235865.03	235212.25	236576.47	237360.36
pression sortie	218256.44	217673.28	217171.00	218340.44	219248.66
fonction coût	7.61%	7.71%	7.67%	7.71%	7.63%
itération de fluent	3209	3235	3063	3002	3065
convergence continuité	9.9783e-6	9.9842e-6	9.9706e-6	9.9575e-6	9.9530e-6
vitesse en x	5.8271e-7	4.4718e-7	9.5621e-7	1.7286e-6	2.3852e-6
vitesse en y	7.2493e-7	5.0465e-7	9.3686e-7	1.6007e-6	2.1995e-6
nut	3.8599e-6	2.3444e-6	3.7751e-6	5.2309e-6	7.3645e-6

maillage testé	6	7	8	9
pression entré	236664.03	239139.55	236159.23	212149.27
pression sortie	218585.64	221346.97	218750.39	196515.42
fonction coût	7.63%	7.44%	7.37%	7.36%
itération de fluent	3084	3278	3607	4329
convergence continuité	7.4978e-6	6.6863e-6	4.9031e-6	4.9010e-6
vitesse en x	2.1315e-6	2.6494e-6	2.8810e-6	2.9188e-6
vitesse en y	1.9275e-6	2.6343e-6	2.5182e-6	2.2699e-6
nut	9.9946e-6	9.9897e-6	9.9974e-6	9.9836e-6

Tableau I.6 Tableau de l'influence de la convergence. Le maillage cinq a été utilisé pour cette étude.

convergence testé	1	2	3	4	5	6
convergence	1e-3	1e-4	1e-5	1e-6	1e-7	1e-8
itération	1400	2197	3208	3644	4398	4925
pression entré	203931.06	242285.41	236222.11	236344.08	236269.3	236269.08
pression sortie	202127.19	225229.98	218256.44	218194.34	218230.98	218232.00
fonction coût	0.9%	7.04%	7.61%	7.68%	7.63%	7.63%

Tableau I.7 Variation du nombre de mailles dans le domaine pour une étude de GCI. Le facteur de multiplication est 1.15. À noter, la géométrie utilisée dans ce cas a la forme dite optimisée.

maillage testé		1	2	3	4	5	6	7
informations	nombre de maille	3236	4165	5570	7062	8676	10896	12854
	skew max du maillage	0.64	0.64	0.62	0.62	0.62	0.62	0.62
	bord de fuite	0.15	0.185	0.161	0.140	0.122	0.106	0.092
	intra et extra	0.569	0.495	0.43	0.37	0.37	0.37	0.37
des	bord d'attaque	0.347	0.302	0.263	0.229	0.199	0.173	0.15
	périodique fi n écoulement	1.31	1.14	0.987	0.858	0.746	0.649	0.564
	périodique intérieur	1.31	1.14	0.987	0.858	0.746	0.649	0.564
maillages	entrée sorti et interface	1.31	1.14	0.987	0.858	0.746	0.649	0.564

maillage testé		8	9	10	11	12	13	14	15
informations	nombre de maille	17276	23153	29899	40406	53346	72818	97747	125731
	skew max du maillage	0.62	0.66	0.62	0.62	0.62	0.62	0.65	0.65
	bord de fuite	0.08	0.07	0.061	0.053	0.046	0.04	0.035	0.03
des	intra et extra	0.184	0.16	0.14	0.11	0.323	0.281	0.244	0.212
	bord d'attaque	0.13	0.113	0.098	0.085	0.074	0.064	0.056	0.049
	périodique fi n écoulement	0.49	0.426	0.37	0.32	0.28	0.24	0.21	0.215
	périodique intérieur	0.49	0.426	0.37	0.32	0.28	0.24	0.21	0.215
maillages	entrée sorti et interface	0.49	0.426	0.37	0.32	0.28	0.24	0.21	0.215

Tableau I.8 Variation du nombre de mailles dans le domaine pour une étude de GCI. Résultats de la convergence des maillages.

maillage testé	1	2	3	4	5	6	7
pression entré	269547.59	269212.03	261115.7	259619.91	257160.88	258402.19	253474.34
pression sortie	236632.38	237556.66	231442.52	231547.42	230337.23	233254.67	229753.28
fonction coût	12.21%	11.75%	11.36%	10.81%	10.43%	9.73%	9.36%
itération de fluent	1170	1283	1248	1248	1357	1426	1611
convergence continuité	7.5535e-07	1.4399e-07	2.4374e-07	3.8949e-07	1.5230e-07	5.4764e-08	6.5518e-8
vitesse en x	2.8672e-07	5.3886e-08	1.6168e-07	3.3461e-07	1.8092e-07	4.0870e-08	9.4507e-8
vitesse en y	3.4642e-07	5.3772e-08	1.5987e-07	3.3562e-07	1.6819e-07	4.4020e-08	9.4549e-8
nut	9.9625e-07	9.9603e-07	9.9512e-07	9.9621e-07	9.9997e-07	9.9237e-07	9.9975e-7

maillage testé	8	9	10	11	12	13	14	15
pression entré	247217.8	239172.72	241061.62	236078.72	231414.78	226044.7	221233.58	219957.27
pression sortie	224788.02	218408.73	221346.25	217811.72	214448.58	210243.78	206526.2	205935.75
fonction coût	9.07%	8.68%	8.18%	7.74%	7.33%	6.99%	6.64%	6.37%
itération de fluent	1842	2167	2601	3127	3717	4277	5281	7291
convergence continuité	3.4179e-8	4.7452e-8	2.8915e-8	2.2163e-8	1.8986e-08	3.2002e-8	3.2820e-08	4.3959e-07
vitesse en x	4.5119e-8	1.0877e-8	5.8033e-8	8.2249e-8	7.5966e-08	1.4662e-7	1.3054e-07	6.0043e-07
vitesse en y	4.1446e-8	9.1410e-8	5.9796e-8	6.7358e-8	7.5625e-08	1.4174e-7	1.2056e-07	6.0552e-07
nut	9.9808e-7	9.9611e-7	9.9787e-7	9.9615e-7	9.9888e-07	9.9837e-7	9.9953e-07	9.9859e-07

ANNEXE II

EXEMPLES DE CAS TESTSET D'APPROXIMATIONS

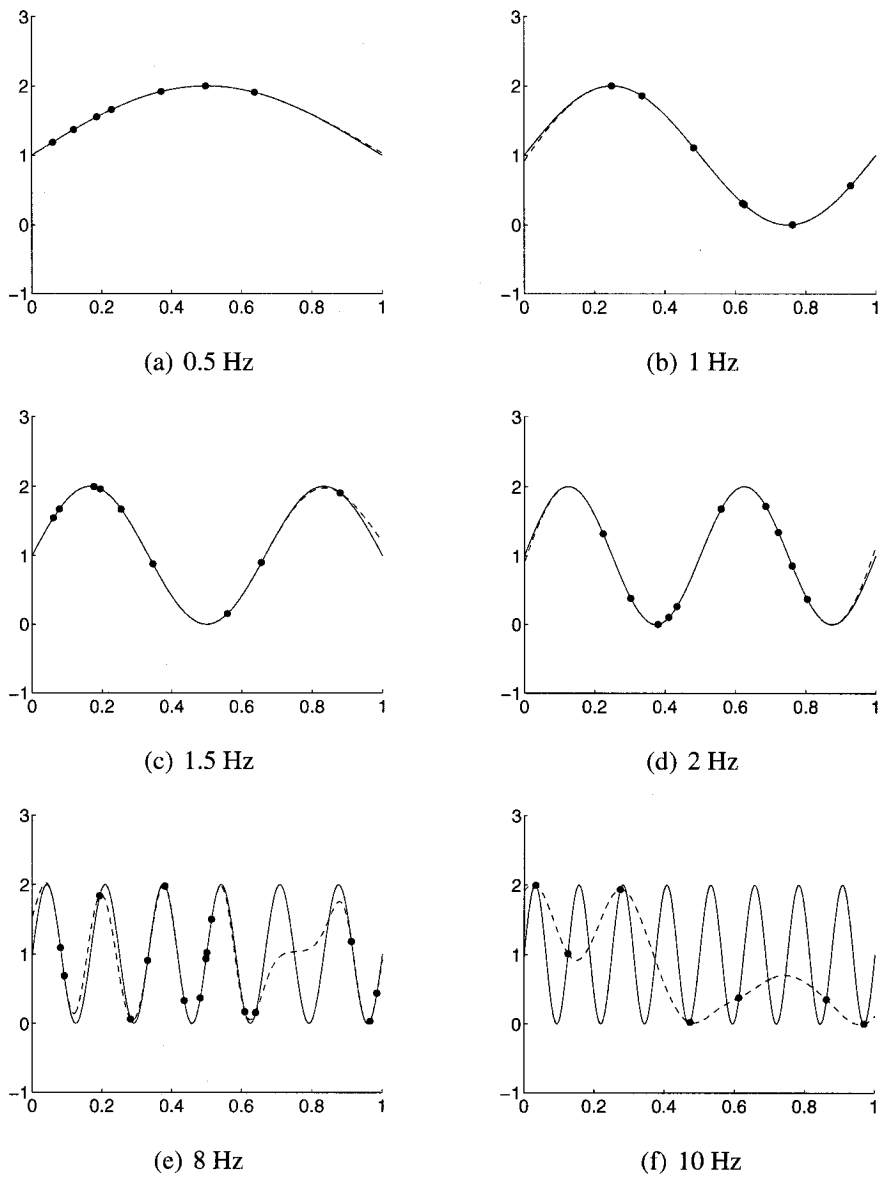


Figure II.1 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite sans bruit.

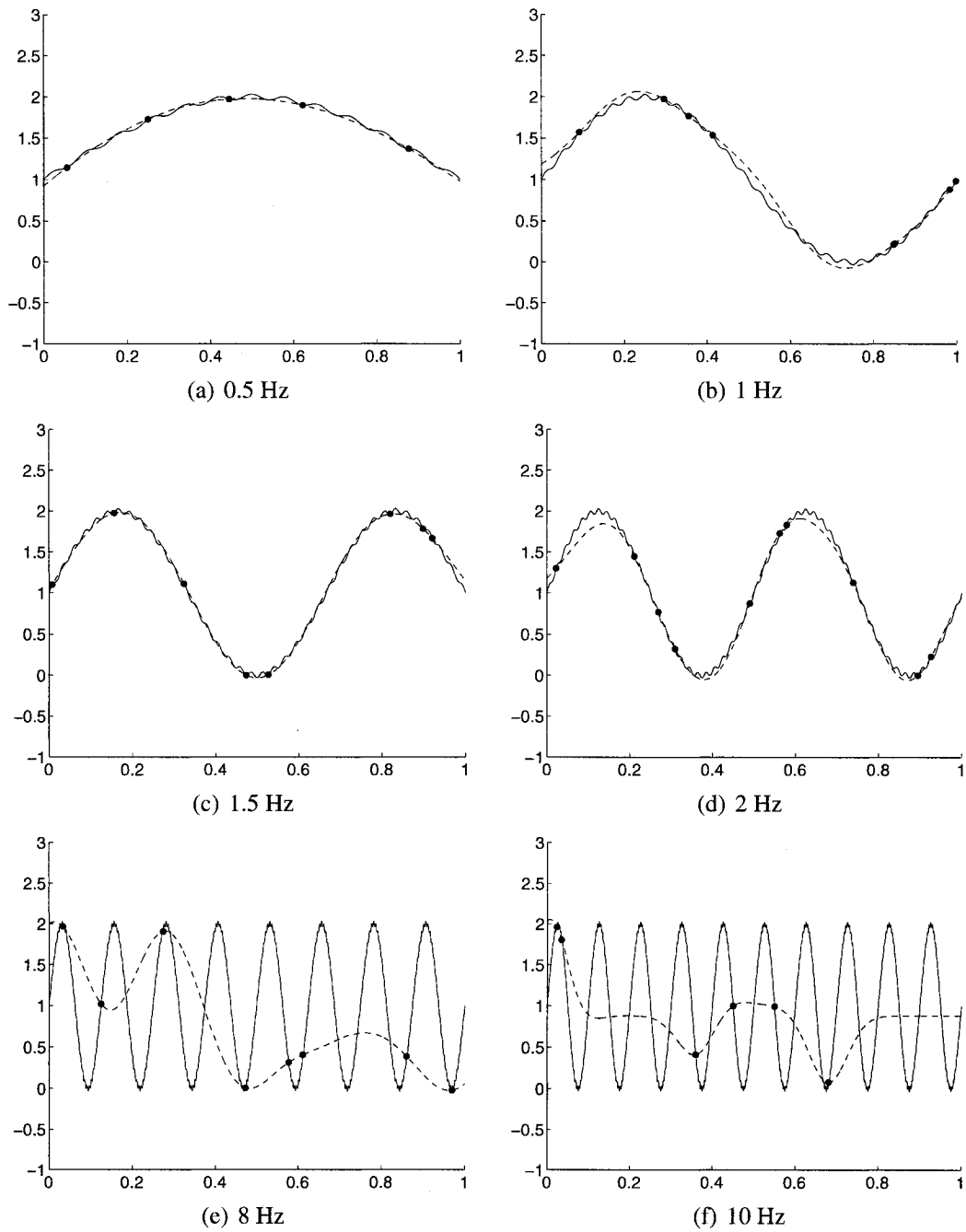


Figure II.2 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite avec le bruit d'une amplitude de 0.03.

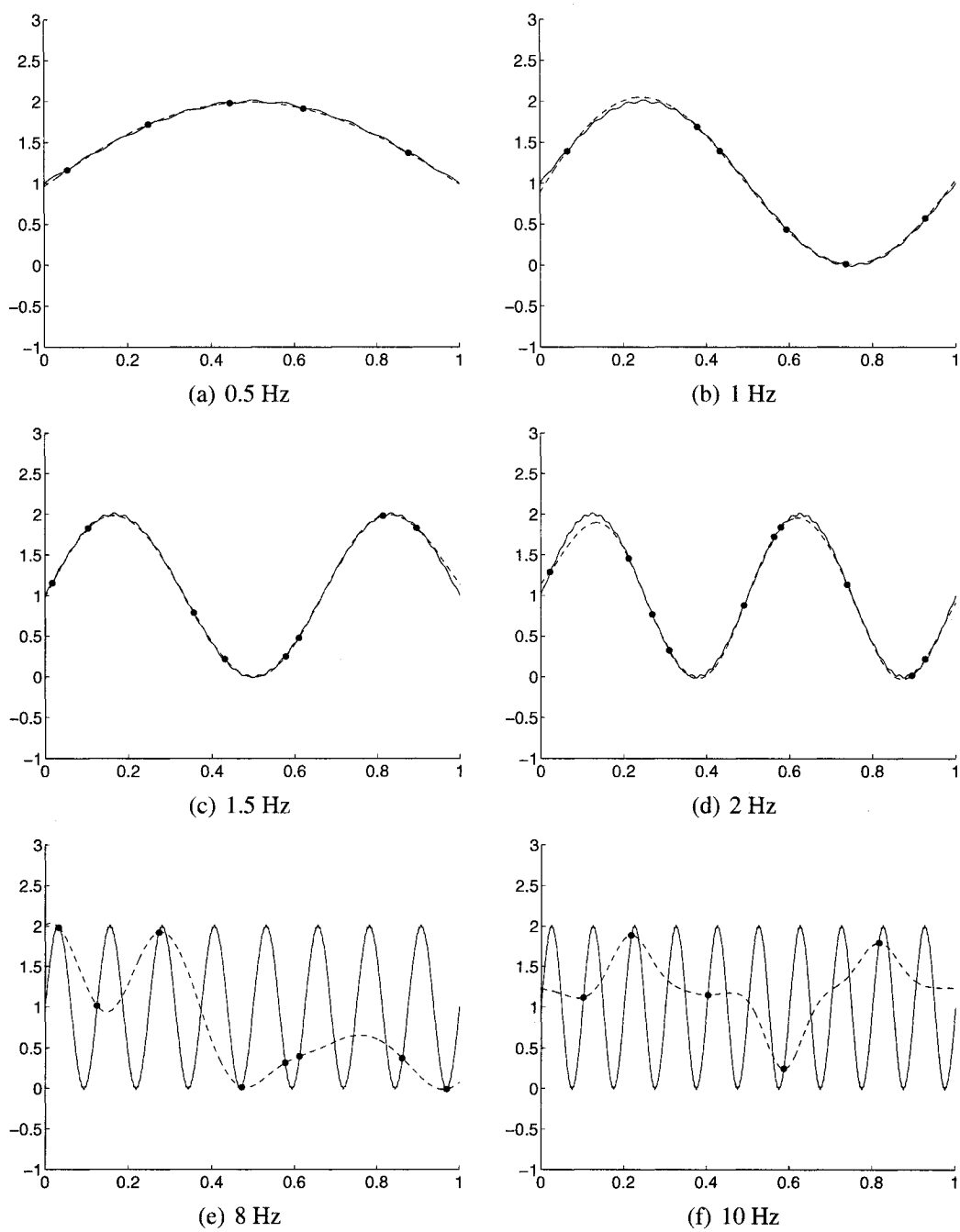
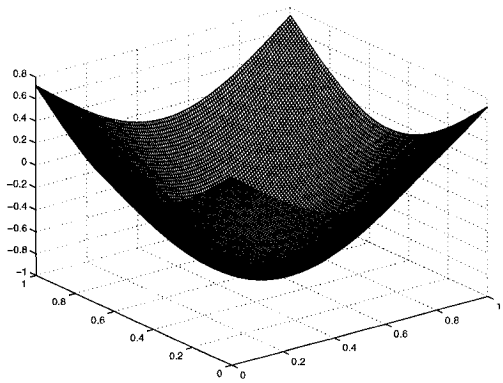
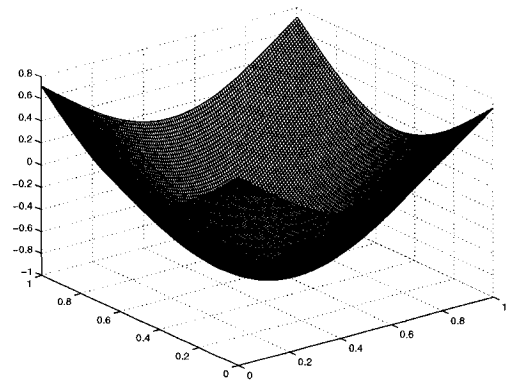


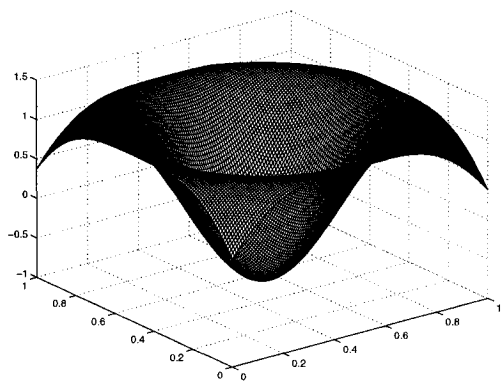
Figure II.3 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite avec le bruit d'une amplitude de 0.015.



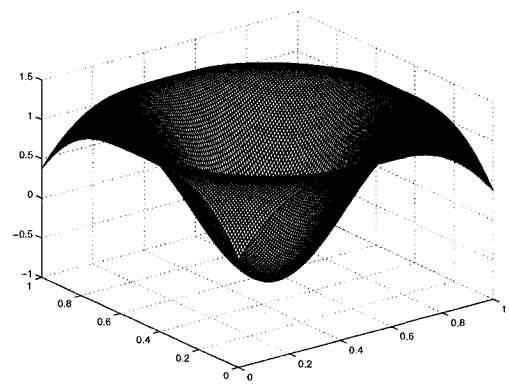
(a) approximation 0.5 Hz



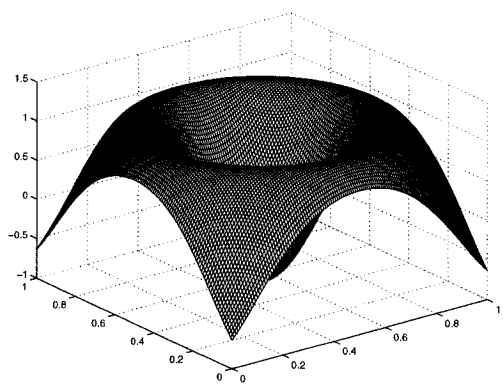
(b) exacte 0.5 Hz



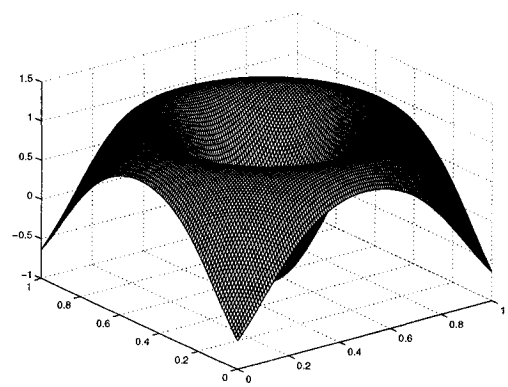
(c) approximation 1 Hz



(d) exacte 1 Hz

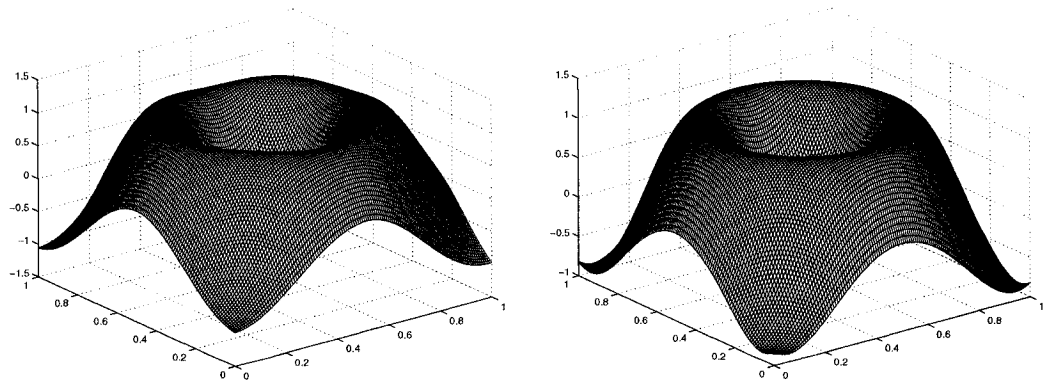


(e) approximation 1.25 Hz



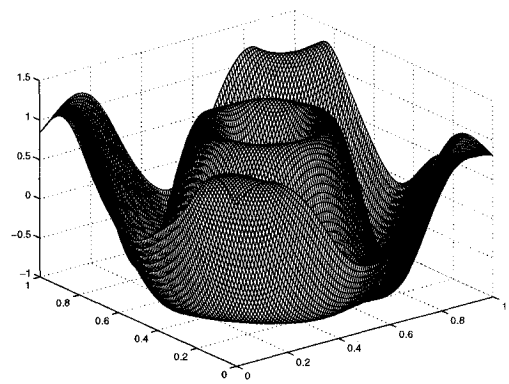
(f) exacte 1.25 Hz

Figure II.4 Exemples de différents cas tests et d'une approximation pour la suite axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.001476 avec 28 points. (c) Une erreur absolue de 0.006235 avec 52 points. (e) Une erreur absolue de 0.000163 avec 73 points.

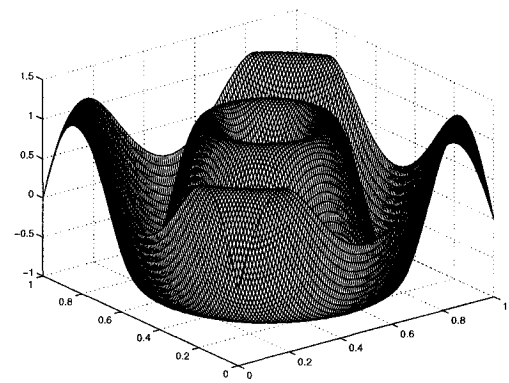


(a) approximation 1.5 Hz

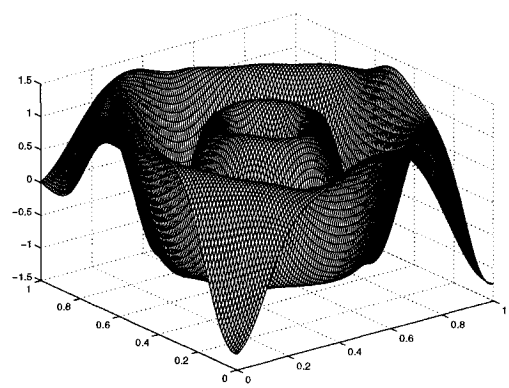
(b) exacte 1.5 Hz



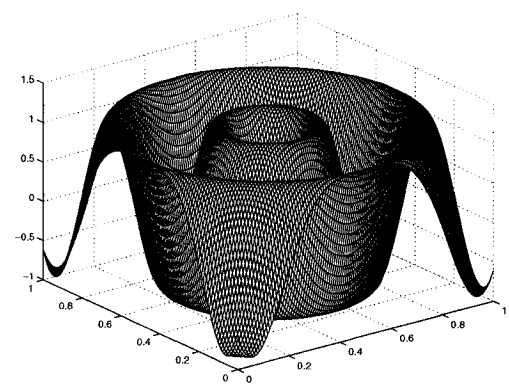
(c) approximation 2.5 Hz



(d) exacte 2.5 Hz

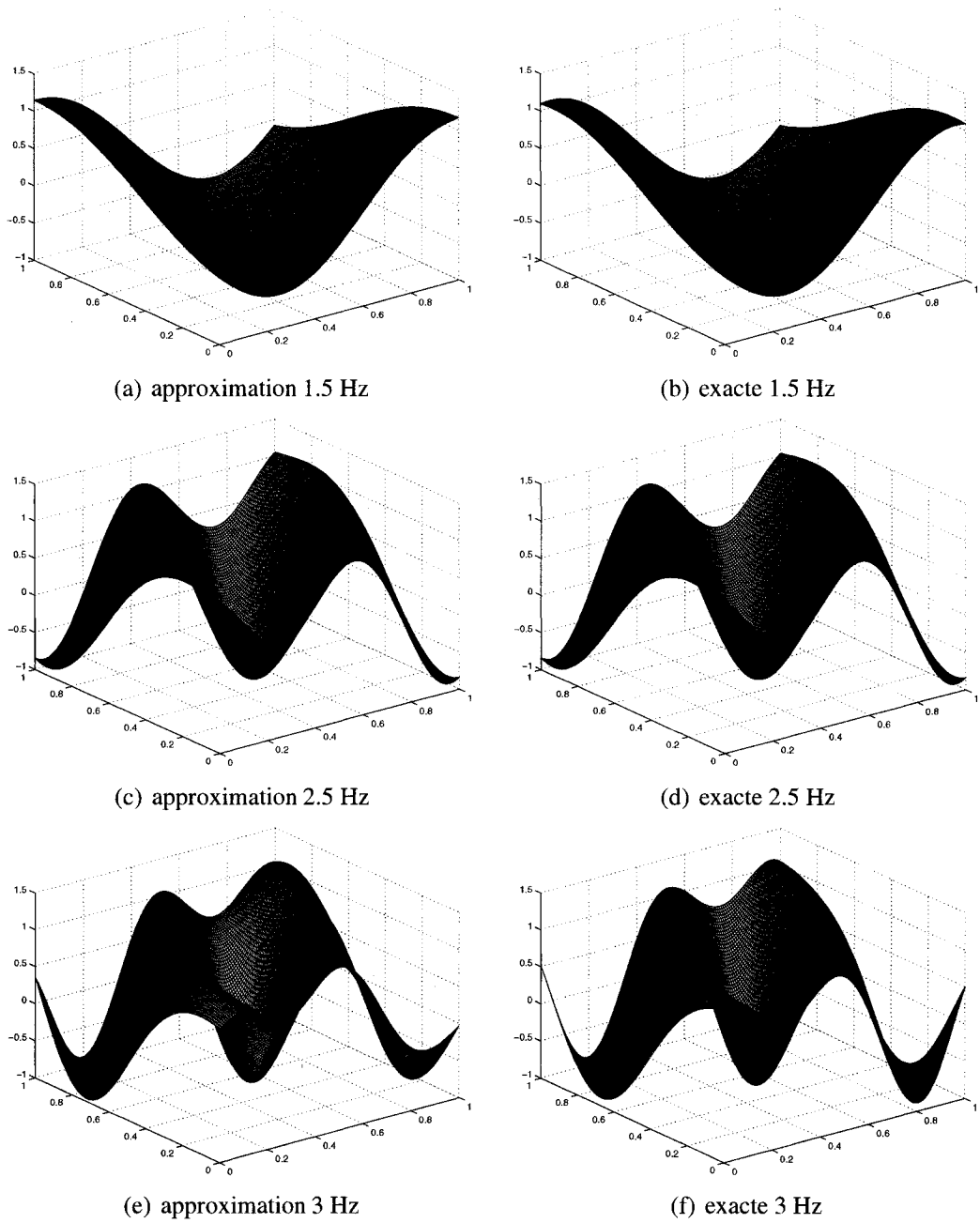


(e) approximation 3 Hz



(f) exacte 3 Hz

Figure II.5 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.0491 avec 40 points. (c) Une erreur absolue de 0.0530 avec 77 points. (e) Une erreur absolue de 0.070 avec 94 points. À noter, l'échantillon utilisé pour l'approximation (e) est le seul qui a atteint la convergence pour ce cas test.



(a) approximation 1.5 Hz

(b) exacte 1.5 Hz

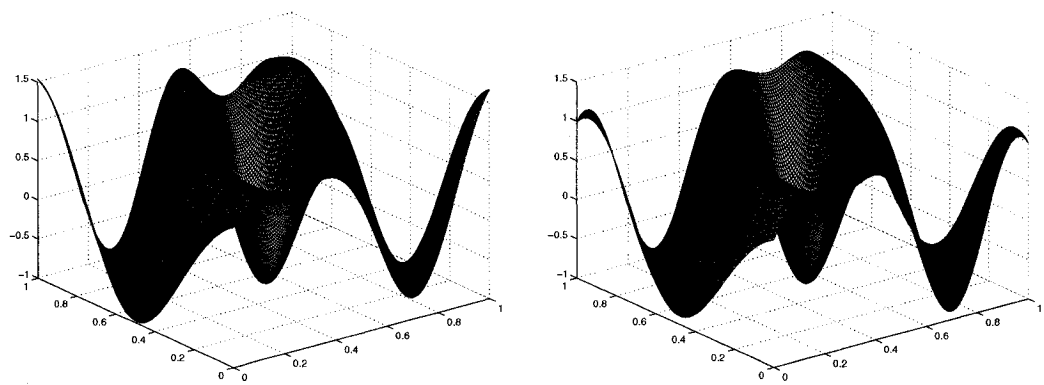
(c) approximation 2.5 Hz

(d) exacte 2.5 Hz

(e) approximation 3 Hz

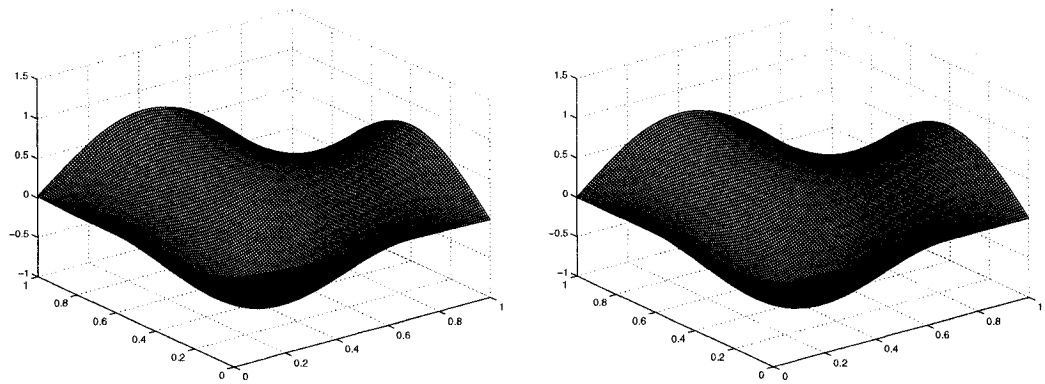
(f) exacte 3 Hz

Figure II.6 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.0022 avec 40 points. (c) Une erreur absolue de 0.00032 avec 72 points. (e) Une erreur absolue de 0.034 avec 39 points.



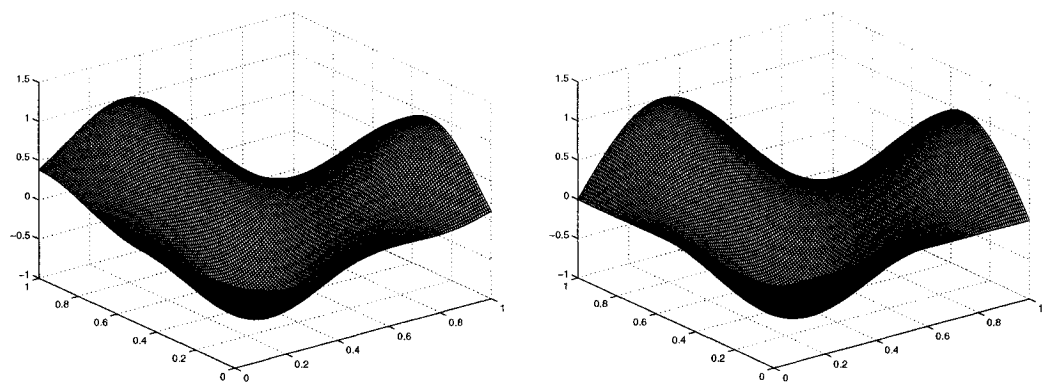
(a) approximation 1.5 Hz (b) exacte 1.5 Hz

Figure II.7 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.095 avec 45 points.



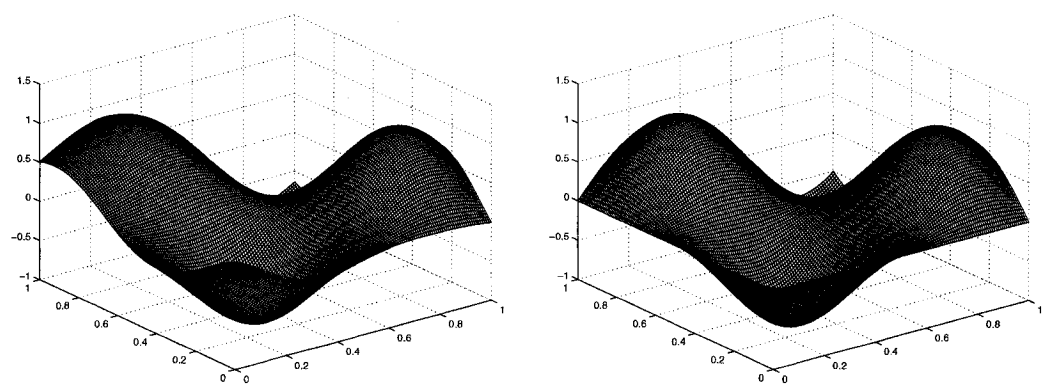
(a) approximation 0.625 Hz

(b) exacte 0.625 Hz



(c) approximation 0.75 Hz

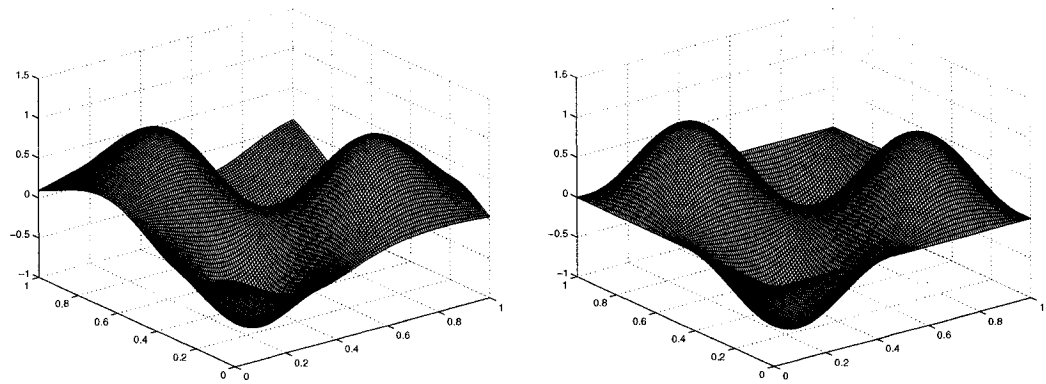
(d) exacte 0.75 Hz



(e) approximation 0.875 Hz

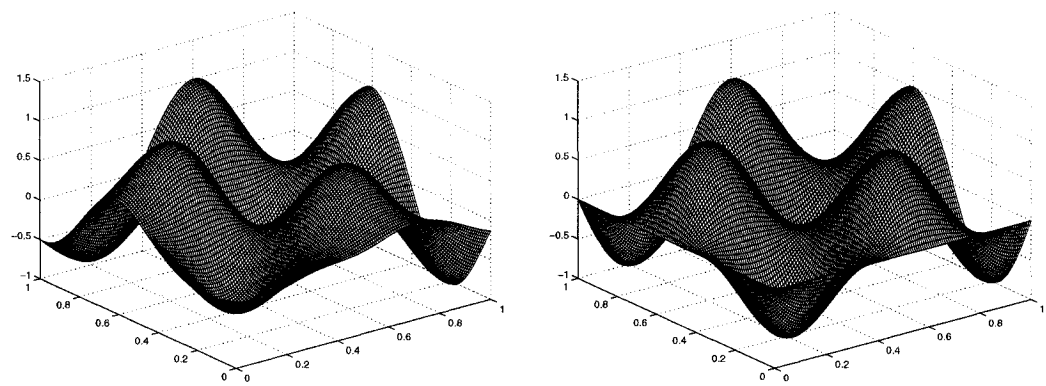
(f) exacte 0.875 Hz

Figure II.8 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.022 avec 18 points. (c) Une erreur absolue de 0.026 avec 20 points. (e) Une erreur absolue de 0.070 avec 22 points.



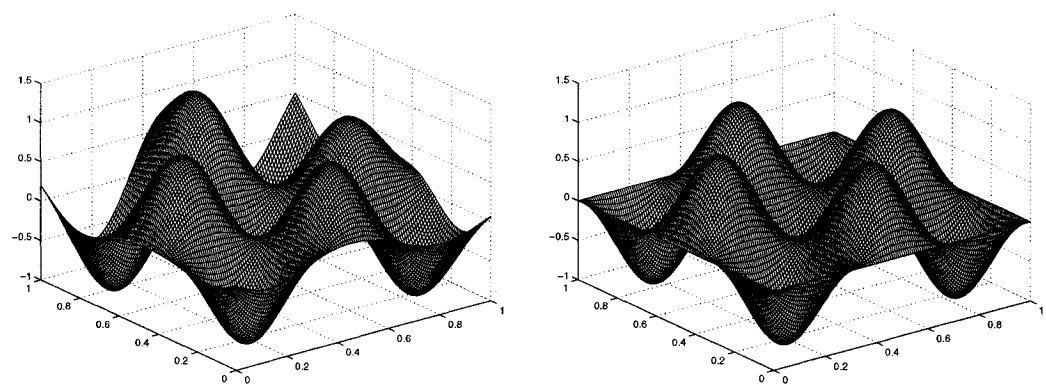
(a) approximation 1 Hz

(b) exacte 1 Hz



(c) approximation 1.25 Hz

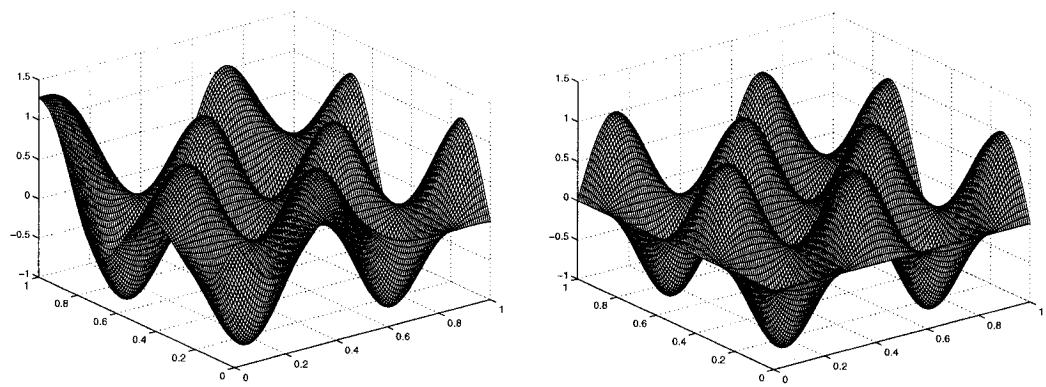
(d) exacte 1.25 Hz



(e) approximation 1.5 Hz

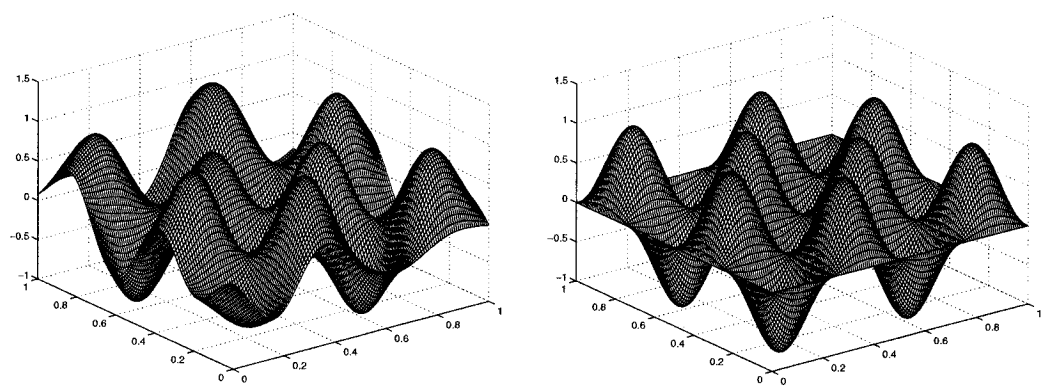
(f) exacte 1.5 Hz

Figure II.9 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.074 avec 22 points. (c) Une erreur absolue de 0.085 avec 33 points. (e) Une erreur absolue de 0.065 avec 47 points.



(a) approximation 1.75 Hz

(b) exacte 1.75 Hz



(c) approximation 2 Hz

(d) exacte 2 Hz

Figure II.10 Exemples de différents cas tests et d'une approximation stable pour la suite quasi-axisymétrique. (a) Une erreur absolue de 0.022 avec 18 points. (c) Une erreur absolue de 0.092 avec 57 points.

ANNEXE III

LE KRIGEAGE

On a maintenant un système à deux équations, soit 4.13 et 4.10. On veut connaître de façon explicite les valeurs des inconnus $c(x)$ et λ. Avec quelques manipulations et en posant $\tilde{\lambda} = -\lambda/2\sigma^2$ on trouve pour l'équation 4.13

$$c = R^{-1}\left(r(x) - \tilde{\lambda}F\right) \tag{III.1}$$

et de l'équation 4.10 on a

$$c = F^{T^{-1}} f(x)$$

On a donc

$$R^{-1}r(x) - \tilde{\lambda}R^{-1}F = F^{T^{-1}} f(x)$$

en isolant $\tilde{\lambda}$ on obtient :

$$\tilde{\lambda} = \left[F^T R^{-1} F\right]^{-1}\left[F^T R^{-1} r(x) - f(x)\right] \tag{III.2}$$

Sachant que la matrice R est symétrique et en substituant dans $\hat{y} = c^T Y$ les termes c^T et Y donnés par les équations III.1 et III.2 on obtient :

$$\begin{aligned}
\hat{y} &= \left(r(x) - \tilde{\lambda}F\right)^T R^{-1}Y \\
&= \left(r(x) - \left[F^T R^{-1} F\right]^{-1}\left[F^T R^{-1} r(x) - f(x)\right] F\right)^T R^{-1}Y \\
&= r(x)^T R^{-1}Y - \left[F^T R^{-1} r(x) - f(x)\right]^T \left[F^T R^{-1} F\right]^{-1} F^T R^{-1}Y
\end{aligned}$$

Sachant que $Y \approx F\beta$ selon l'équation 4.1 et que la solution obtenue pour la méthode des moindres carrés généralisée est donnée par l'équation 4.7 on trouve

$$\begin{aligned}
\hat{y} &= r(x)^T R^{-1} Y - \left[F^T R^{-1} r(x) - f(x)\right]^T \beta \\
&= f(x)^T \beta + r(x)^T R^{-1} Y - r(x)^t R^{-1} F\beta \\
&= f(x)^T \beta + r(x)^T R^{-1} \left(Y - F\beta\right) \qquad \text{(III.3)}
\end{aligned}$$