



**THÈSE DE DOCTORAT DE
L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE**

Spécialité : Mécanique
École doctorale : Mécanique UPMC

Présentée par **Alexandre BIROLLEAU**

pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

**Résolution de problème inverse et propagation
d'incertitudes. Application à la dynamique des gaz
compressibles**

Directeur de thèse : Didier LUCOR
Encadrant CEA : Gaël POËTTE

Organisme d'accueil : CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

Soutenue le dd/mm/2014 devant la commission d'examen composée de :

M. DESPRÉS BRUNO ?	Professeur des Universités	Président
M. POËTTE GAËL	Ingénieur-chercheur au CEA-DIF	Encadrant CEA
M. LUCOR DIDIER	Chargé de recherche CNRS	Directeur de thèse
M. SANCANDI MARC ?	Ingénieur-chercheur au CEA-CESTA	Rapporteur
M. ABGRALL RÉMI ?	Professeur des Universités	Rapporteur
M. SCHEURER BRUNO	Directeur de recherche au CEA-DIF	Examinateur
M. ???	???	Examinateur

**Résolution de problème inverse et propagation
d'incertitudes. Application à la dynamique des gaz
compressibles**

Alexandre Birolleau

Inverse Problem and Uncertainty Propagation. Application to Compressible Gas Dynamics

Abstract

This thesis deals with uncertainty propagation and the resolution of inverse problems together with their respective acceleration via Polynomial Chaos. The object of this work is to present a state of the art and a numerical analysis of this stochastic spectral method, in order to understand its pros and cons when tackling the probabilistic study of hydrodynamical instabilities in Richtmyer-Meshkov shock tube experiments.

The first chapter is introductory and allows understanding the stakes of being able to accurately take into account uncertainties in compressible gas dynamics simulations.

The second chapter is both an illustrative state of the art on generalized Polynomial Chaos and a full numerical analysis of the method keeping in mind the final application on hydrodynamical problems developing shocks and discontinuous solutions. In this chapter, we introduce a new method, naming iterative generalized Polynomial Chaos, which ensures a gain with respect to generalized Polynomial Chaos, especially with non smooth solutions.

Chapter three is closely related to an accepted publication in *Communication in Computational Physics*. It deals with stochastic inverse problems and introduces bayesian inference. It also emphasizes the possibility of accelerating the bayesian inference thanks to iterative generalized Polynomial Chaos described in the previous chapter. Theoretical convergence is established and illustrated on several test-cases.

The last chapter consists in the application of the above materials to a complex and ambitious compressible gas dynamics problem (Richtmyer-Meshkov shock tube configuration) together with a deepened study of the physico-numerical phenomenon at stake. Finally, in the appendix, we also present some interesting research paths we quickly tackled during this thesis.

Key words

Polynomial Chaos, iterative Polynomial Chaos, bayesian inference, compressible gas dynamics, Richtmyer-Meshkov instabilities, Crossed validation, Euler equations.

Résolution de problème inverse et propagation d'incertitudes. Application à la dynamique des gaz compressibles

Résumé

Cette thèse porte sur la propagation d'incertitudes et la résolution de problème inverse et leur accélération par Chaos Polynomial. L'objectif est de faire un état de l'art et une analyse numérique des méthodes spectrales de type Chaos Polynomial, d'en comprendre les avantages et les inconvénients afin de l'appliquer à l'étude probabiliste d'instabilités hydrodynamiques dans des expériences de tubes à choc de type Richtmyer-Meshkov.

Le premier chapitre est introductif et permet de comprendre les enjeux importants concernant la capacité à prendre en compte les incertitudes en dynamique des gaz compressibles.

Le second chapitre fait un état de l'art illustré sur plusieurs exemples des méthodes de type Chaos Polynomial. Nous y effectuons son analyse numérique et mettons en évidence la possibilité d'améliorer la méthode, notamment sur des solutions irrégulières (en ayant en tête les difficultés liées aux problèmes hydrodynamiques), en introduisant le Chaos Polynomial généralisé itératif. Ce chapitre comporte également l'analyse numérique complète de cette nouvelle méthode.

Le chapitre 3 a fait l'objet d'une publication dans *Communication in Computational Physics*, celle-ci a récemment été acceptée. Il fait l'état de l'art des méthodes d'inversion probabilistes et focalise sur l'inférence bayésienne. Il traite enfin de la possibilité d'accélérer la convergence de cette inférence en utilisant les méthodes spectrales décrites au chapitre précédent. La convergence théorique de la méthode d'accélération est démontrée et illustrée sur différents cas-test.

Le dernier chapitre correspond à l'application des méthodes et algorithmes présentés dans les deux chapitres précédents à un problème complexe et ambitieux, un écoulement de gaz compressible physiquement instable (configuration tube à choc de Richtmyer-Meshkov) avec une analyse poussée des phénomènes physico-numériques en jeu.

Enfin, en annexe, nous présentons quelques pistes de recherche supplémentaires rapidement abordées aux cours de cette thèse.

Mots clés

Chaos Polynomial, Chaos Polynomial itératif, inférence bayésienne, dynamique des gaz compressibles, instabilités de Richtmyer-Meshkov, validation croisée, équations d'Euler.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Construction de modèles	1
1.2	Fusion par confinement inertiel	2
1.3	Tube à choc et instabilité de Richtmyer-Meshkov	3
1.4	Quantification d'incertitudes	6
1.5	Objectifs et contributions de cette thèse	10
1.6	Plan de la thèse	11
2	Propagation d'incertitudes par méthodes spectrales stochastiques	13
2.1	Propagation d'incertitudes dans les codes de simulation	13
2.2	Propagation par Chaos polynomial	14
2.2.1	Historique	15
2.2.2	Polynôme du Chaos généralisé	17
2.2.3	Calcul numérique des coefficients polynomiaux	19
2.2.4	Illustration de l'adaptation à la loi de l'entrée de gPC	21
2.2.5	Existence de la base polynomiale	26
2.2.6	Convergence	27
2.2.7	Exemples d'applications numériques	28
2.3	Chaos polynomial généralisé itératif	32
2.3.1	Contexte	33
2.3.2	Description de l'algorithme i-gPC	34
2.3.3	Base polynomiale	38
2.3.4	Formule de Christoffel	38
2.3.5	Algorithme de Chebychev	38
2.3.6	Convergence théorique	42
2.3.7	Analyse numérique de i-gPC	45
2.3.8	Critère d'arrêt de i-gPC	51
2.3.9	Exemple d'applications numériques	54
2.3.10	Coût numérique de i-gPC	62
2.4	Conclusion du chapitre	63

3	Problème inverse, inférence bayésienne et son accélération	65
3.1	Théorème de Bayes	66
3.2	Inférence bayésienne	66
3.3	Généralités sur le choix de la distribution A priori	68
3.3.1	A priori informatif	68
3.3.2	A priori non informatif	69
3.4	Accélération des problèmes inverses stochastiques	69
3.5	Convergence de la distribution a posteriori	73
3.5.1	Divergence de Kullback-Leibler	74
3.5.2	Variation totale	75
3.5.3	Inégalité de Pinsker	75
3.5.4	Preuve de la proposition 2	76
3.6	Exemples d'applications numériques	81
3.6.1	Fonction marche	81
3.6.2	Équation de Burgers non visqueuse	85
3.6.3	Équation de Burgers non visqueuse et inférence sur 3 paramètres	87
3.6.4	Système des équations d'Euler : Problème de Riemann stochastique	90
3.7	Conclusion du chapitre	95
4	Dynamique des gaz compressibles, propagation d'incertitudes, analyse numérique, résolution d'un problème inverse	97
4.1	Parallèle entre méthodes perturbatives et méthodes par Chaos Polynomial généralisé	98
4.1.1	Motivations : rappels sur les travaux de S. Jaouen	98
4.1.2	Approche par perturbations comme limite de l'approche polynomiale	101
4.1.3	Quelques résultats numériques encourageants	109
4.2	Modélisation physique de l'écoulement 2D en configuration tube à choc de Richtmyer-Meshkov	114
4.2.1	Le modèle : système des équations d'Euler en 2 dimensions d'espace	115
4.2.2	La configuration d'intérêt : le tube à choc de Richtmyer-Meshkov	115
4.2.3	Paramètres d'entrée incertains : l'interface initiale	120
4.2.4	Observable d'intérêt : l'évolution de la taille des instabilités	121
4.2.5	Une étude de propagation d'incertitudes sur un tube à choc de Richtmyer-Meshkov incertain	126
4.3	Étude bayésienne : comparaison à des expériences de tubes à chocs	143
4.3.1	Brève présentation de l'expérience VS85 de [VS95]	144
4.3.2	Réduction de la dimension stochastique du problème initial : développement de Karhunen-Loève	145
4.3.3	Résolution du problème d'inférence bayésienne sur les expériences de tubes à choc de Richtmyer-Meshkov de [VS95]	155
5	Conclusion	163
A	Notations	167

B	Rappels sur la théorie des probabilités	169
C	Rappels sur les méthodes de propagation d'incertitudes non spectrales	177
	C.1 Méthode de Monte-Carlo	177
	C.2 Méthode par perturbations	179
D	Sélection du degré gPC par validation croisée leave one out	181
	D.1 Modification de la quadrature	181
	D.2 Validation croisée	183
	D.3 Critères de sélection	184
	D.4 Exemples numériques	185
	D.4.1 Cas Legendre	185
	D.4.2 Cas sinus	186
	D.4.3 Cas choc	187
	D.4.4 Cas bichoc	189
	D.5 Dimension stochastique supérieure	192
E	Calcul des racines positives de $c - x \tan(ax) = 0$ et $x + c \tan(ax) = 0$	195
	E.1 Équation $c - x \tan(ax) = 0$	195
	E.2 Équation $x + c \tan(ax) = 0$	197
	E.3 Algorithme de Newton	198
F	Analyse de sensibilité de Sobol	201
	F.1 Définitions des indices de Sobol	201
	F.2 Calcul des indices de Sobol par polynômes du chaos	202
	F.3 Validation sur une fonction test	203
	Bibliographie	213

Chapitre 1

Introduction

Cette thèse traite des problèmes inverses stochastiques et de la quantification et propagation d'incertitudes pour la dynamique des fluides compressibles. En particulier, nous nous intéresserons aux tubes à choc et aux instabilités de Richtmyer-Meshkov. Une meilleure compréhension de ces phénomènes est essentielle en particulier dans le contexte de la fusion nucléaire par confinement inertiel (FCI ou ICF en anglais). Nous n'aborderons pas la FCI à proprement parlé mais nous nous concentrerons sur la résolution de problèmes inverses pour les tubes à chocs, ce qui constitue une première étape vers la compréhension des instabilités hydrodynamiques se développant à la suite de choc. Plus généralement, nous aborderons les problèmes hyperboliques [Ser96a, Ser96b]. Les algorithmes et méthodes présentés dans cette thèse pourraient également trouver des applications dans d'autres phénomènes physiques présentant des non linéarités et des discontinuités, comme par exemple en astrophysique ou pour la physique de la turbulence. Ils pourraient même être appliqués à d'autres types de phénomènes non hyperboliques, mais leur efficacité serait sans doute réduite puisque certains d'entre ont été élaborés pour des problèmes relativement spécifiques.

1.1 Construction de modèles

De nombreux phénomènes physiques, socio-économiques, etc., sont mathématiquement modélisés par des systèmes d'équations (aux dérivées partielles dans notre cas). Le processus de construction de ces modèles nécessite de tenir compte de trois catégories d'erreur.

Erreur numérique Bien souvent les modèles mathématiques ne sont pas solvables analytiquement. Ils sont alors résolus par approximation numérique. Cette erreur représente l'écart entre l'approximation numérique et la solution exacte du modèle.

Erreur d'incertitude Cette erreur quantifie la variabilité du modèle avec certains paramètres du modèle qui sont inconnus et considéré comme aléatoires. Son étude

fait l'objet de la propagation d'incertitudes.

Erreur expérimentale L'erreur expérimentale correspond à l'écart entre le modèle et les expériences en tenant compte de l'erreur de mesure commise par le dispositif expérimental.

On représente la prise en compte de ces différentes erreurs par la relation suivante (ASME V& V 2009) :

$$\delta_{\text{Modèle}} = \underbrace{\delta_{\text{Num}}}_{\text{Analyse numérique}} + \underbrace{\delta_{\text{Incertitude}}}_{\text{Analyse des incertitudes}} + \underbrace{\delta_{\text{Exp}}}_{\text{Métrologie}} . \quad (1.1)$$

En connaissant, ou en estimant, les erreurs de mesure, numérique et d'incertitude, il est possible de comparer le modèle à la réalité et ainsi d'affiner notre compréhension du phénomène et éventuellement même d'affiner le modèle lui-même.

Dans cette thèse, nous nous focaliserons sur l'analyse des incertitudes, ou Uncertainty Quantification (UQ) [Xiu10, LMK10].

Il convient de rappeler la motivation finale de ces travaux : la fusion par confinement inertiel et ses sources d'incertitudes. En particulier, la FCI a motivé l'étude réalisée au chapitre 4 concernant l'évolution de la taille de la zone d'instabilités dans un tube à choc.

1.2 Fusion par confinement inertiel

Des réactions de fusion naturelles sont par exemple rendues possibles dans les objets stellaires car ils génèrent des champs gravitationnel importants capable de confiner le combustible pour atteindre les conditions propices à leur démarrage. Une des approches possibles à notre échelle est la FCI¹ [Kee82] qui consiste à comprimer un mélange fusible jusqu'à des conditions de température/pression telles que les réactions thermonucléaires puissent s'amorcer et s'auto-entretenir [Rag08]. La FCI peut être obtenue en faisant imploser à l'aide de faisceaux lasers puissants un microballon contenant un mélange de deutérium/tritium². Ces faisceaux frappent le micro ballon soit directement (attaque directe) ou indirectement (le micro ballon est alors placé dans une sorte de chambre dans laquelle le laser pénètre).

En théorie, la fusion nucléaire possède beaucoup d'avantages : elle peut produire beaucoup plus d'énergie que la fission, utilise un carburant abondant au coeur des océans (deutérium) et produit des déchets radioactifs dont la durée de vie est très courte. En

1. Projets NIF (National Ignition Facility) au LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory) USA ou LMJ (Laser MégaJoule) au Cesta (Centre d'études scientifiques et techniques d'Aquitaine) France.

2. Deutérium : noyau d'hydrogène contenant un neutron. Tritium : noyau d'hydrogène contenant deux neutrons.

pratique, la communauté se heurte à plusieurs verrous scientifiques. En particulier, le gain énergétique visé dans ces expériences peut être fortement détérioré par l'apparition d'instabilités hydrodynamiques qui peuvent entraîner une déformation voire une rupture de la coquille renfermant le combustible fusible avant démarrage des réactions nucléaires.

En pratique, des défauts d'usinage peuvent par exemple conférer au micro ballon une interface perturbée. Le micro ballon n'est alors pas parfaitement sphérique. Un éclairage laser qui ne serait pas parfaitement uniforme autour du micro ballon aurait les mêmes effets néfastes sur la compression. Les perturbations géométriques du micro ballon et du rayonnement laser, par la suite, impactent le bon déroulement de la fusion, sur le démarrage ou non de la réaction de fusion. Les perturbations du micro ballon et du laser peuvent être vues comme des altérations aléatoires de la sphéricité du micro ballon et de l'uniformité du laser. Comprendre en quoi cet aléa perturbe la FCI est donc cruciale pour la réalisation de la FCI.

Dans cette thèse, nous n'avons bien entendu pas la prétention d'aborder le problème de la FCI complet mais nous focaliserons sur les phénomènes hydrodynamiques en jeu en ne considérant que des perturbations géométriques du micro ballon (pas de perturbation sur l'impulsion fournie, i.e. l'éclairage laser par exemple). Une première approche pour comprendre l'impact de ces perturbations sur la fusion consiste à étudier les tubes à choc dont l'interface initiale entre les deux fluides est perturbée et incertaine.

1.3 Tube à choc et instabilité de Richtmyer-Meshkov

L'interface séparant deux fluides de densités différentes peut, sous certaines conditions, devenir instable. Si cette interface n'est pas parfaitement régulière, des petites perturbations initiales vont croître, d'abord de façon linéaire, puis non-linéaire, avant d'évoluer vers des structures plus complexes et éventuellement vers un mélange turbulent. Alors que l'instabilité de Rayleigh-Taylor (RT) apparaît lorsqu'une interface séparant deux fluides est soumise à un champ d'accélération *permanent* dirigé du fluide léger vers le fluide lourd, l'instabilité Richtmyer-Meshkov (RMI) s'observe lors du passage d'une onde de choc interagissant avec l'interface sous forme d'accélération *impulsionnelle* [Bro02].

A l'échelle du laboratoire, les tubes à chocs constituent des dispositifs expérimentaux particulièrement intéressants pour comprendre les mécanismes de formation du mélange lorsque de telles instabilités hydrodynamiques se développent [VS95, PTR98, LME⁺09, HDYW11, BOPB12]. Il existe différentes expériences en fonction que le choc passe une seule fois au travers de l'interface ou plus d'une fois³. A la différence du choc unique, où le mélange est seulement produit par des structures de vorticités stables et régulières, lorsqu'il y a rechoc, le mélange apparaît souvent beaucoup plus chaotique et moins organisé. On y voit la présence d'un grand nombre de tourbillons dans la couche de mélange

3. On parle de « rechoc » dû à l'onde réfléchie, par exemple après rebond contre une surface fixe

ce qui résulte en une transition beaucoup plus rapide.

Dans notre cas, il s'agit d'un tube horizontal contenant deux fluides séparés par une interface, perturbée ou non, dans lequel se propage un choc. Dans les dispositifs expérimentaux, la forme de l'interface n'est pas connue. Le choc se propage dans le premier fluide (le fluide léger), frappe l'interface, avance dans le deuxième fluide (le fluide lourd) jusqu'à la paroi du tube, et se réfléchit sur la paroi du tube pour repartir en sens inverse. Pendant que le choc se propage dans le tube, les deux fluides subissent des variations de vitesse, de densité, de pression, et se mélangent en voyant la forme de leur interface évoluer.

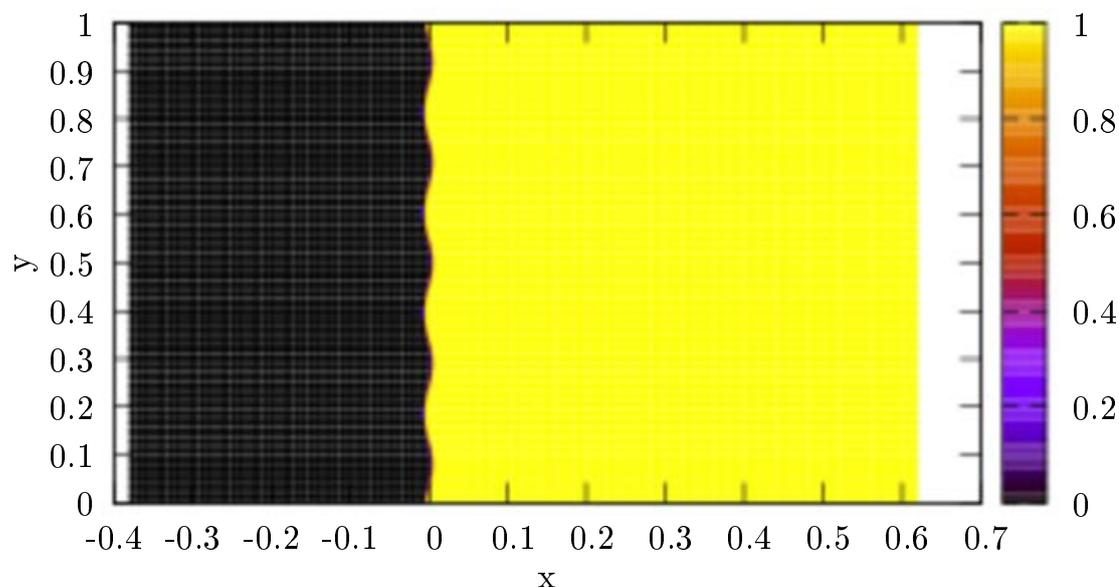


FIGURE 1.1 – Simulation numérique d'un tube à choc à $t = 0$ en présence d'une interface initiale entre les deux fluides perturbée, fraction de présence du fluide lourd.

L'instabilité de Richtmyer-Meshkov évolue suivant trois régimes successifs [CEA09] :

1. un régime linéaire où la croissance des modes de l'interface est similaire pour chaque mode et sans interaction entre les modes ;
2. un régime faiblement non linéaire pendant lequel la croissance de chaque mode commence à dépendre de l'interaction entre les modes. Des structures complexes d'enroulement de l'interface peuvent apparaître ;
3. un régime non linéaire considéré comme pré-turbulent. L'interface est fortement déformée laissant apparaître des structures en bulles et en jets (voir figure 1.2).

Au niveau numérique, il existe différents niveaux de modélisation du problème déterministe plus ou moins complexe pour aborder le problème selon qu'on se place en 2 ou

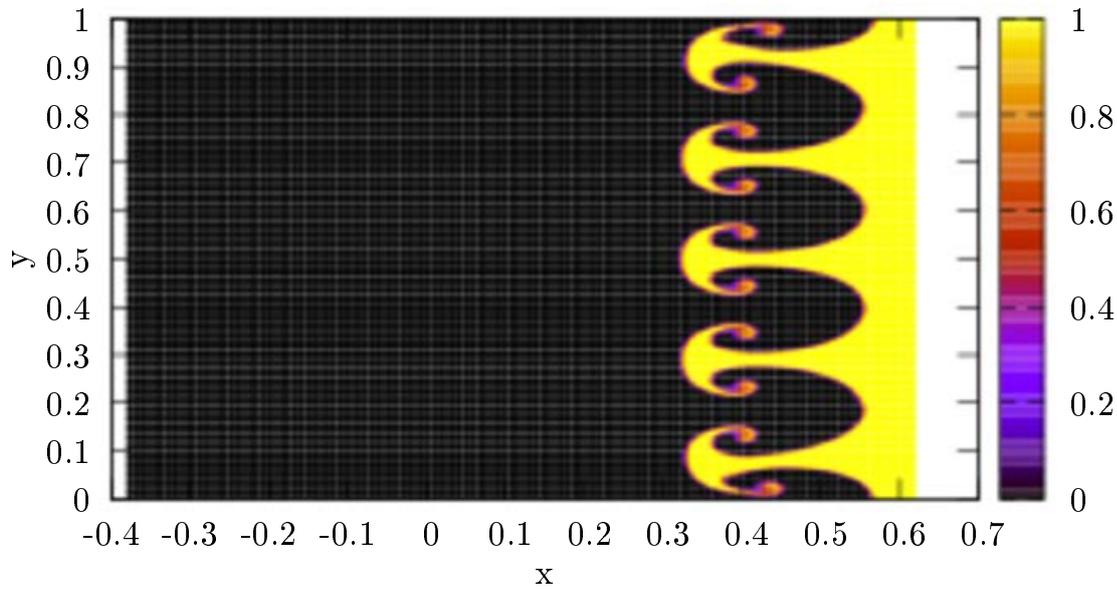


FIGURE 1.2 – Simulation numérique d’un tube à choc en présence d’une interface initiale entre les deux fluides perturbée, fraction de présence du fluide lourd. $t > 0$. La perturbation initiale s’amplifie avec le temps et forme des jets et des tourbillons.

3 dimensions, qu’on résout les équations d’Euler ou celles de Navier-Stokes, qu’on choisisse un modèle de mélange (et de turbulence) plutôt qu’un autre. Dans tous les cas, le terme *barocline*, principale source de génération de vorticit  dans ce type d’ coulement, et provenant du non-alignement du gradient de pression du choc avec le gradient de densit  de l’interface, doit  tre correctement captur  car il est le « moteur » de l’instabilit  de Richtmyer-Meshkov [SZ94]. Des probl mes num riques non-triviaux subsistent pour traiter ces ph nom nes non-lin aires et chaotiques, qui nous conduisent   aborder le probl me sous l’angle probabiliste/ensembliste. Un probl me ardu est par exemple celui de la non-convergence de certains observables : l’interface obtenue num riquement se complexifie au fil du raffinement de maillage. Cette interface chaotique est donc en pratique toujours tronqu e soit par le niveau de viscosit  soit par la taille du maillage si l’ chelle de Kolmogorov est petite relative au maillage [YZL⁺06a].

L’effet des conditions initiales sur le m lange turbulent d’ coulements acc l r s par un choc revet un r le tr s important dans le cadre des instabilit s de type Richtmyer-Meshkov. Il est donc tr s important de contr ler ces perturbations et de quantifier leur impact pour optimiser le rendement  nerg tique de l’exp rience. Des r sultats r cents ont montr  qu’il existe une d pendance du m lange aux conditions initiales en temps longs. En particulier, il a  t  observ  que les modes de perturbation   longueur d’onde plus courte ont tendance   renforcer le m lange et la transition vers la turbulence de ces  coulements [BOPB12].

Notre approche, dans un premier temps, a  t  de simuler les instabilit s de Richtmyer-

Meshkov par le biais de la dynamique des gaz dans des écoulements (2D sphériques) régis par les équations d'Euler. En effet, une modélisation non-visqueuse semble raisonnable pour la phase de croissance linéaire puis non-linéaire jusqu'à des temps pas trop longs. Dans ces simulations, l'interface initiale était un champ incertain, modélisé par un processus stochastique stationnaire choisi [PDL11] ; l'idée étant de s'affranchir d'une approche conventionnelle où des perturbations de longueur d'onde constante sont considérées séparément. Cette approche a été utilisée par la suite pour la calibration de tailles de zone de mélange d'expériences de tube à choc (plan). La taille de la zone de mélange est alors définie comme le support de la densité de probabilité du processus. Cette densité de probabilité, fonction du temps, est estimée par un chaos polynomial généralisé, son support pouvant dans ce cas être évalué à moindre coût. Cette méthodologie repose sur un principe d'ergodicité [Wie38b] et généralise l'approche par perturbations linéaires. Ces résultats de calibration de l'interface initiale obtenus de façon empirique ont montré une bonne adéquation avec des études expérimentales [PLJ12].

Nous décrivons dans le chapitre 4 section 4.2 le modèle physique choisi dans cette thèse pour simuler l'évolution des fluides dans le tube à choc.

1.4 Quantification d'incertitudes

Nous exposons dans cette introduction le contexte de la quantification d'incertitudes [LMK10, DRDT08, dR06a, DR06b].

Le développement récent de la puissance de calcul des ordinateurs a ouvert le champ de la quantification d'incertitudes dans les modèles numériques présentant des données incertaines.

Pour donner un ordre de grandeur, en 2002 le calculateur Tera 1 du CEA-DAM présentait une puissance de 1 teraflops soit 10^{12} opérations par seconde sur les nombres flottants, en 2006 le calculateur du CEA-DAM Tera 10 affichait une performance de 53 teraflops soit $50 \cdot 10^{12}$ opérations par seconde sur les flottants, tandis qu'en 2013 la machine du CEA-DAM Tera 100 affiche un petaflops soit 10^{15} opérations par seconde sur les flottants. La puissance de calcul a donc été multipliée par 1000 en dix ans (cf. figure 1.3).

La propagation d'incertitudes répond à la question suivante : comment l'incertitude sur les données d'entrée impacte-t-elle la quantité d'intérêt en sortie ? Quelle est la densité de probabilité de la sortie connaissant la densité de probabilité de l'entrée ? Il ne s'agit pas d'une étude des erreurs d'arrondis numériques des machines ou de résolution numérique du modèle mais des variations dues à un manque de connaissance de certains paramètres propres au modèle ou à un aléa stochastique irréductible. Cependant, il faudra s'assurer que les erreurs d'approximations numériques sont nettement inférieures aux variations stochastiques. Dans le cas contraire, avec une erreur de résolution numérique de l'ordre de

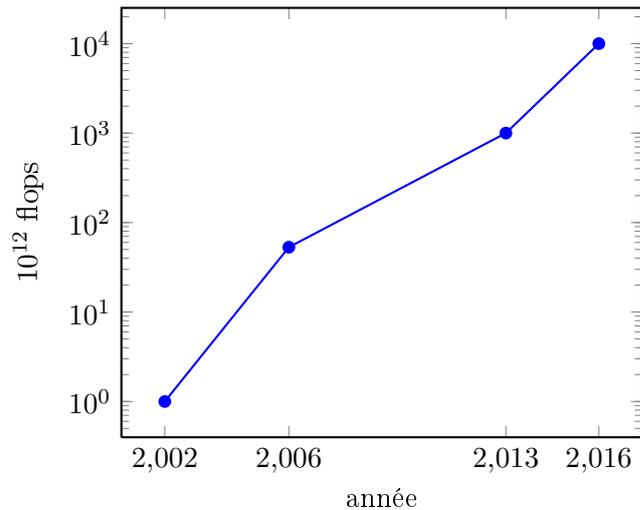


FIGURE 1.3 – Évolution de la puissance de calcul du calculateur Téra du CEA dans le cadre du programme Simulation assurant numériquement sur le long terme la force de dissuasion française de 2002 à nos jours. La puissance de calcul a été multipliée par mille au cours de la dernière décennie. Cette révolution a rendu possible l’analyse des incertitudes dans les simulations.

ou plus grande que la variation stochastique, l’étude de quantification d’incertitudes n’a plus de sens. Ainsi, toute quantification d’incertitudes implique également une étude de convergence du modèle numérique déterministe. C’est ce que nous ferons dans le chapitre 4 concernant le modèle numérique du tube à choc.

La propagation d’incertitudes s’inscrit dans une analyse des incertitudes plus globale, qu’on appelle quantification d’incertitudes (UQ : Uncertainty Quantification) qui comprend classiquement quatre étapes.

- A. Identifier le modèle physique, le modèle numérique, les variables incertaines en entrée et la quantité d’intérêt en sortie.
- B. Quantifier les incertitudes en entrée : déterminer les lois de probabilité des variables d’entrée (avis d’experts, inférence bayésienne).
- C. Propager les incertitudes à travers le modèle (propagation d’incertitudes au sens strict) en déterminant la loi, ou des caractéristiques, de la variable aléatoire de sortie.
- D. Inférence : Hiérarchiser les incertitudes (facteur d’importance, sensibilité aux différentes variables), confrontations aux données expérimentales.

La figure 1.4 illustre les quatre étapes que comprend l’analyse d’incertitudes [DRDT08].

Ce processus, éventuellement itératif, d’analyse des incertitudes met en jeu plusieurs disciplines des mathématiques appliquées traditionnellement disjointes :

- statistique ;
 - probabilité ;
 - analyse numérique, simulation ;
 - vérification et validation de modèle ;
 - dialogue avec les expérimentateurs ;
 - informatique, développement de codes, calcul haute performance.
- La propagation d'incertitudes est donc par essence pluridisciplinaire.

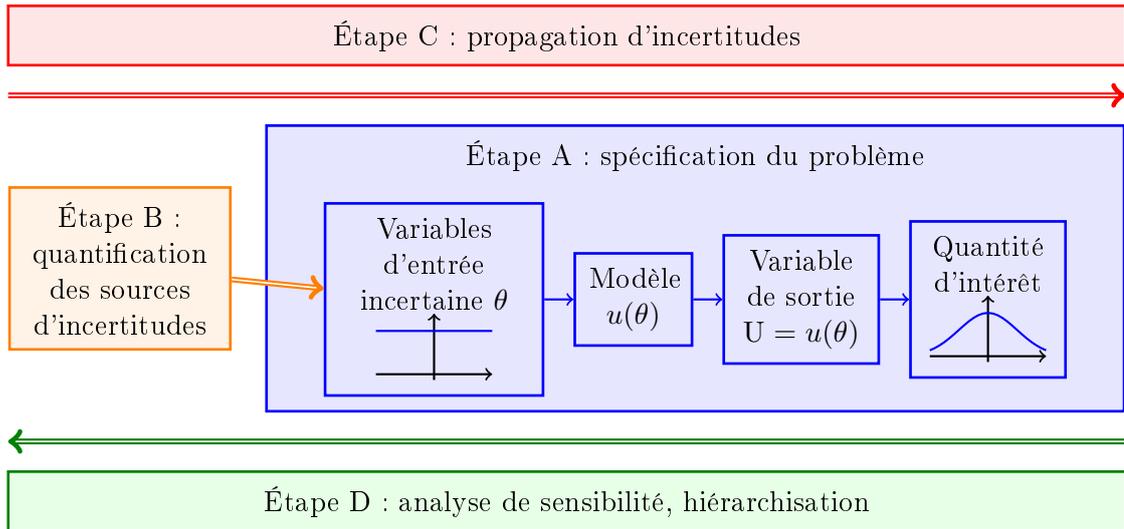


FIGURE 1.4 – Analyse d'incertitudes dans les modèles numériques. Elle comprend quatre étapes : le choix du modèle (A), la quantification des sources (B), le propagation (C), la hiérarchisation (D)

Cette thèse se concentre sur l'étape C de propagation et l'intègre dans la résolution de problèmes inverses en s'inscrivant dans un cadre bayésien. La figure 1.5 reprend la figure 1.4 en y intégrant une étape d'inférence bayésienne à partir de données expérimentales.

Cette notion d'incertitudes recouvre en réalité deux aspects. On distingue, en effet, les incertitudes épistémiques traduisant un manque de connaissance d'une quantité déterminée, des incertitudes stochastiques traduisant essentiellement une variabilité intrinsèque de la grandeur. Les premières sont réductibles alors que les secondes ne le sont pas car elles ne peuvent pas être éliminées complètement. On parle ainsi également d'incertitudes réductibles et d'incertitudes irréductibles. Par exemples, l'incertitude sur le module d'Young d'un matériau sera qualifié d'épistémique, alors que l'incertitude sur le cours de l'or sera stochastique car intrinsèquement aléatoire.

Dans les modèles numériques, ces incertitudes portent sur des constantes physiques, des conditions de bords, des conditions aux limites, des géométries, un terme source dans le modèle, une paramétrisation du modèle physique en lui-même . . .

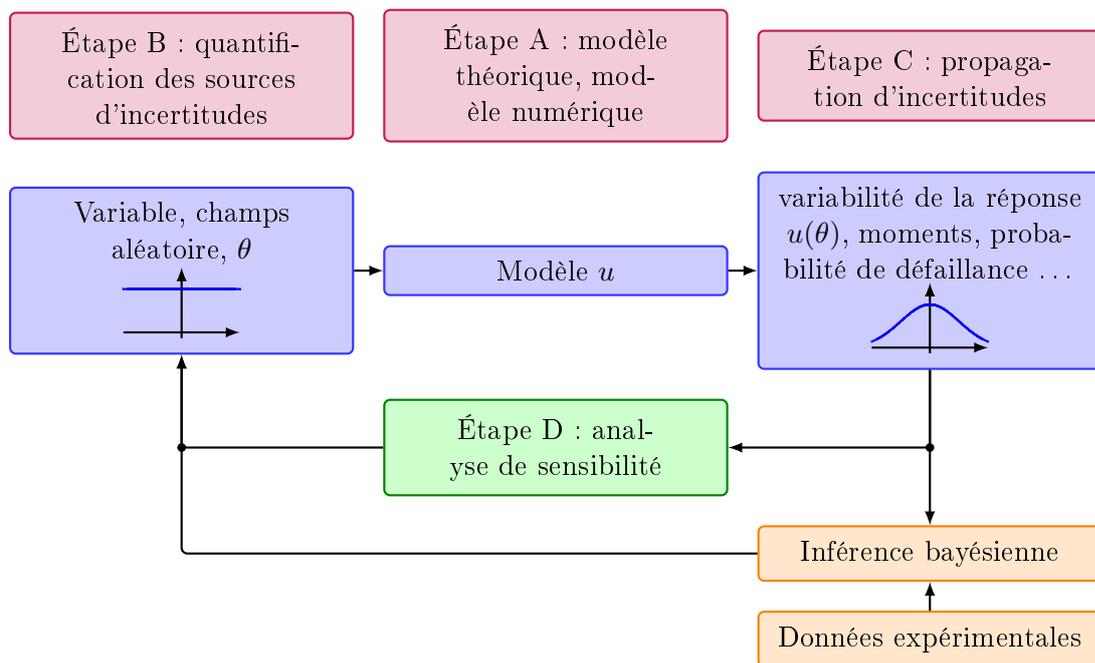


FIGURE 1.5 – Analyse d’incertitudes couplée à l’inférence bayésienne lorsque des données expérimentales sont disponibles. Les quatre étapes et une cinquième correspondant à l’inférence bayésienne pour se confronter aux données expérimentales.

Auparavant, le coût d’un calcul limitait grandement le nombre de simulations effectuées de sorte que les chercheurs et les ingénieurs restaient dans des cadres déterministes et analysaient sous des formes rudimentaires (par traitement des cas extrêmes, par arithmétique d’intervalles, ou par développement de Taylor à l’ordre deux autour de la moyenne, la variabilité de la solution numérique du modèle). Cette première approche de l’analyse d’incertitude pouvait suffire lorsque les modèles mis en jeu étaient essentiellement linéaires. Il en va autrement aujourd’hui. Comme nous l’avons déjà vu, les progrès en terme de puissances des ordinateurs permet à présent une analyse fine des incertitudes, analyse nécessaire sachant que les modèles sont de plus en plus complexes, multi-physiques, et fortement non linéaires. Nous prenons l’exemple des équations pour l’hydrodynamique, que nous étudierons dans toute cette thèse et notamment aux chapitres 3 et 4, dont les solutions se caractérisent par le développement de discontinuités en temps fini.

Cette quantification d’incertitudes fournit aux scientifiques ainsi qu’aux ingénieurs un outils de compréhension supplémentaire des phénomènes étudiés. Elle implique également une gestion des risques plus rationnelle afin de garantir dans un cadre industriel [dR06a, DR06b, DRDT08], par exemple, la fiabilité d’une centrale nucléaire, la sécurité d’un

aéronef, ou la solidité d'un barrage hydraulique. La prise en compte des incertitudes modifie et optimise la phase de conception des produits assurant ainsi une conception plus robuste lorsque de très nombreux paramètres macroscopiques sont en jeux.

Certes, comme nous l'avons souligné, la puissance de calcul des ordinateurs s'est accrue, mais elles restent insuffisantes, pour pouvoir se permettre une quantification des incertitudes par des méthodes Monte-Carlo [RC04b], c'est-à-dire par échantillonnage direct de la variable aléatoire d'entrée. En effet, les techniques Monte-Carlo convergent lentement en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}})$, N désignant le nombre d'échantillons utilisés. N correspond également au nombre de simulations lancées et mesure donc le coût numérique de la quantification d'incertitude. Des alternatives convergeant plus rapidement et réduisant donc le coût numérique ont été proposées. En particulier, les méthodes spectrales dites de chaos polynomial, dérivées de l'article fondateur de Wiener de 1938 [Wie38a] par R.G. Ghanem et P.D. Spanos [GS03] en 1991, se sont révélées particulièrement efficaces. Il s'agit d'approcher une variable aléatoire par sa projection sur une base polynomiale tronquée de l'espace stochastique. Elles ont ensuite été étendues [XK02, WK06] et largement appliquées notamment en mécanique des fluides [OLMG01, OLMG02, Luc11]. Dans cette thèse, nous focaliserons sur l'application non intrusive de l'approche par Chaos Polynomial, cf. chapitre 2.

1.5 Objectifs et contributions de cette thèse

Cette thèse apporte trois contributions originales. Elles visent à aborder de manière bayésienne les problèmes inverses concernant des phénomènes non linéaires ou dont la linéarité évolue au cours du temps.

Dans un premier temps, concernant l'évolution des non linéarités, au chapitre 2 section 2.3, nous présentons une version numériquement stable de l'algorithme du chaos polynomial itératif pour construire de manière itérative et adaptative des approximations de variables aléatoires. Cette stabilisation résulte de l'introduction d'un critère d'arrêt déduit de la théorie des moments et des problèmes aux moments.

Ensuite, au chapitre 3, nous appliquons l'inférence bayésienne couplée au chaos polynomial et au chaos polynomial itératif à des problèmes hydrodynamiques.

Enfin, au chapitre 4 nous étudions numériquement l'expérience du tube à choc de Richtmyer-Meshkov soumise à une incertitude d'interface initiale entre les deux fluides. Cette étude évalue l'influence des différents paramètres numériques et physiques et vise à calibrer les paramètres de l'interface, vue comme un processus stochastique, dans un cadre bayésien.

1.6 Plan de la thèse

Cette thèse comprend trois chapitres. Le chapitre 2 décrit l'analyse des incertitudes dans les codes de simulation numérique puis se concentre sur le chaos polynômial car il s'agit d'un élément central dans ce travail. Nous y introduisons le chaos polynômial itératif et son critère d'arrêt. Le chapitre 3 traite de l'inférence bayésienne pour résoudre des problèmes inverses. Le chapitre 4 se concentre sur l'étude numérique du tube à choc et des instabilités de Richtmyer-Meshkov, ainsi que sur la calibration bayésienne des paramètres de l'interface initiale.

Chapitre 2

Propagation d'incertitudes par méthodes spectrales stochastiques

Objectifs : Dans ce chapitre, nous exposons le contexte de la propagation d'incertitudes dans les modèles numériques. Nous passerons en revue les étapes qui la composent. Nous nous concentrerons ensuite sur une méthode de quantification d'incertitudes : le polynôme du chaos, car nous avons choisi d'en faire un élément central dans cette thèse pour les raisons que nous développons dans la suite de ce chapitre (page 15).

Nous introduisons, ensuite l'algorithme *iterative generalized polynomial Chaos* (i-gPC). Basé sur le polynôme du chaos et sur la théorie des moments statistiques, il permet de mieux gérer les problèmes dans lesquels apparaissent des discontinuités en adaptant la base d'approximation à la réponse. •

2.1 Propagation d'incertitudes dans les codes de simulation

Nous laissons désormais de côté les étapes A, B et D pour nous focaliser sur l'étape C (chapitre 1 pour la description de ces étapes) : la propagation des incertitudes à travers le modèle.

Tous d'abord, introduisons les objets manipulés dans ce chapitre, ainsi que dans toute cette thèse. On désigne par u la solution du modèle décrivant le phénomène physique considéré. Il s'agit typiquement de la résolution d'une équation aux dérivées partielles dont la solution est approchée numériquement par des algorithmes numériques (éléments finis, différences finies, volumes finis, méthodes spectrales, méthodes Monte-Carlo . . .) car il n'existe pas de solution analytique. θ correspond au paramètre incertain du modèle. Il s'agit d'un vecteur de dimension finie, ou un champs stochastique. Dans ce

dernier cas, lorsque l'incertitude est modélisée par un champ de processus stochastique, l'étape de propagation d'incertitudes peut s'avérer particulièrement complexe. Pour le moment, l'idée est de se ramener au cas d'un vecteur de dimension finie en paramétrant le processus stochastique inconnu ou en réalisant son analyse spectrale et en ne conservant que les premiers modes (décomposition de Karhunen-Loève, voir la section 4.3.2).

Cette phase consiste à chercher la loi de probabilité de la sortie du modèle connaissant la loi de probabilité de l'entrée, comme l'illustre la figure 2.1. Parfois, on ne cherche pas toute la loi de la sortie mais simplement quelques données statistiques telles que des moments statistiques ou des quantiles. Les moments statistiques de U s'obtiennent par

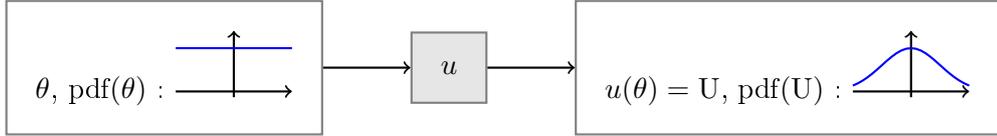


FIGURE 2.1 – Propagation d'incertitude sur θ à travers u . On cherche la loi de $U = u(\theta)$.

la relation suivante :

$$\int_{\mathbb{R}} u^k \, d\mathbb{P}(u) = \int_{\Omega} [u(x)]^k \, d\mathbb{P}(x). \quad (2.1)$$

La loi de U se caractérise par les espérances :

$$\forall g \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}, \mathbb{R}), \mathbb{E}[g(u)] = \int_{\Omega} g(u(x)) \, d\mathbb{P}(x). \quad (2.2)$$

Dans tous les cas, la question se ramène à un calcul d'intégrale impliquant la fonction inconnue u .

Il existe différentes méthodes afin de propager l'incertitude à travers un modèle. Nous ne détaillerons pas dans cette thèse ces différentes méthodes. Nous nous concentrerons sur une méthode : le polynôme du chaos dans son application non intrusive (utilisation d'un code en boîte noire).

2.2 Propagation par Chaos polynomial

Le Chaos polynomial est une méthode non statistique de construction d'approximation¹. Il désigne une approximation polynomiale d'une variable aléatoire dans un espace de probabilité. Il s'agit de la transposition aux espaces stochastiques de l'approximation

¹ Ces approximations sont également appelées en fonction des communautés surface de réponse ou méta-modèle.

polynomiale bien connue des espaces fonctionnels. Cette méthode approche une variable aléatoire inconnue par un polynôme d'une variable aléatoire connue. Le polynôme du chaos s'applique à la propagation d'incertitudes lorsque le paramètre incertain d'entrée est un vecteur aléatoire.

Le chaos polynomial généralisé (gPC) constitue une généralisation du chaos polynomial de Wiener [Wie38a].

gPC est intéressant pour la propagation d'incertitudes car l'approximation du modèle dépend de la variable aléatoire d'entrée. La construction même de l'approximation dépend de la loi de probabilité de l'entrée et du produit scalaire défini par cette loi d'entrée. Nous illustrerons plus loin que pour un même modèle, et différentes lois de probabilité en entrée, les modèles approchés par polynômes du chaos sont différents les uns des autres. gPC est par ailleurs intéressant pour le fait que les calculs peuvent être lancés en parallèle et non de manière séquentielle, pour sa vitesse de convergence plus rapide que les méthodes Monte-Carlo en faible dimension stochastique ce qui sera le cas dans nos applications. Pour synthétiser, nous avons opté pour le polynôme du chaos généralisé pour les raisons suivantes :

- adaptation du modèle à la loi de probabilité de l'entrée ;
- vitesse de convergence intéressante en dimension stochastique relativement faible ;
- calculs en parallèle et en boîte noire lorsqu'utilisée dans sa forme non intrusive.

Commençons par une brève revue de l'historique de la théorie.

2.2.1 Historique

Le chaos polynomial fut introduit, en ce qui concerne ses principes théoriques, par Wiener en 1938 dans son étude sur la décomposition des processus stochastiques gaussiens [Wie38a]. Il s'agit de représenter une variable aléatoire dans la base orthonormale des polynômes de Hermite d'une variable aléatoire gaussienne centrée réduite. En 1947, Cameron et Martin démontrèrent que le polynôme du chaos converge au sens de la norme L^2 pour toute variable aléatoire de l'espace stochastique L^2 [CM47a]. Bien plus tard, en 1991, R.G. Ghanem et P.D. Spanos [GS03] exploitèrent l'idée de Wiener et l'appliquèrent avec succès à de nombreux problèmes de propagation d'incertitudes, notamment en mécanique. L'approche de Wiener fut ensuite étendue aux problèmes non gaussiens par l'utilisation d'autres bases de polynômes orthogonaux (chaos polynomial généralisé gPC), à des problèmes moins réguliers en découpant l'espace stochastique en sous espaces et en utilisant des bases de fonctions polynomiales par morceaux (ME-gPC) [WK07, WK05a], ou en utilisant des bases d'ondelettes à la place des bases polynomiales [LMKNG04]. Le chaos polynomial généralisé (gPC) constitue l'une des méthodes de propagation d'incertitude les plus répandues actuellement [HKC⁺04, Xiu03, KLM06, YZL⁺06b, JSK02].

Le polynôme du chaos consiste à approcher, au sens de l'erreur quadratique L^2 , une

variable aléatoire inconnue par une série tronquée de polynômes orthogonaux, ou de façon plus générale par une série tronquée de fonctions orthogonales. L'approche originelle de Wiener utilisait la base des polynômes de Hermite d'une variable aléatoire gaussienne centrée réduite. gPC généralise cette approche par l'utilisation de la base de polynômes orthonormaux par rapport à la mesure de probabilité du paramètre incertain d'entrée θ . La figure 2.2 illustre l'accélération de la convergence en norme L^2 possible grâce à gPC par l'utilisation d'une base polynomiale mieux adaptée : la transformation considérée est régulière, $u(X) = \sin(2\pi X)$, où X suit une distribution uniforme, impliquant que la variable aléatoire $u(X)$ suit une loi arcsinus. On voit l'accélération de la convergence permise par l'introduction de la base polynomiale de Legendre gPC adaptée à l'entrée uniforme. La courbe Hermite correspond au chaos polynomial de Hermite, c'est-à-dire une approximation en fonction d'une gaussienne. Pour cela la loi uniforme est d'abord transformée en une gaussienne ξ par la relation $X = F(\xi)$ où F correspond à la fonction de répartition de la loi normale. $u(\xi)$ est alors approchée par une série de polynômes de Hermite $\sum_k u_k H_k(\xi)$.

La courbe de Legendre correspond au chaos polynomial généralisé qui s'adapte à la loi uniforme en entrée ².

Ainsi, gPC introduit une meilleure base polynomiale que le polynôme du chaos originel. Cela pose la question de la recherche d'une base polynomiale encore mieux adaptée voire optimal. Nous essaierons d'apporter un élément de réponse à cette question en introduisant le chaos polynomial itératif.

Dans la section suivante, nous présentons formellement le polynôme du chaos généralisé.

2. Seuls les degrés impairs sont représentés du fait de l'imparité de u , seuls les termes impairs contribuent au développement polynomial.

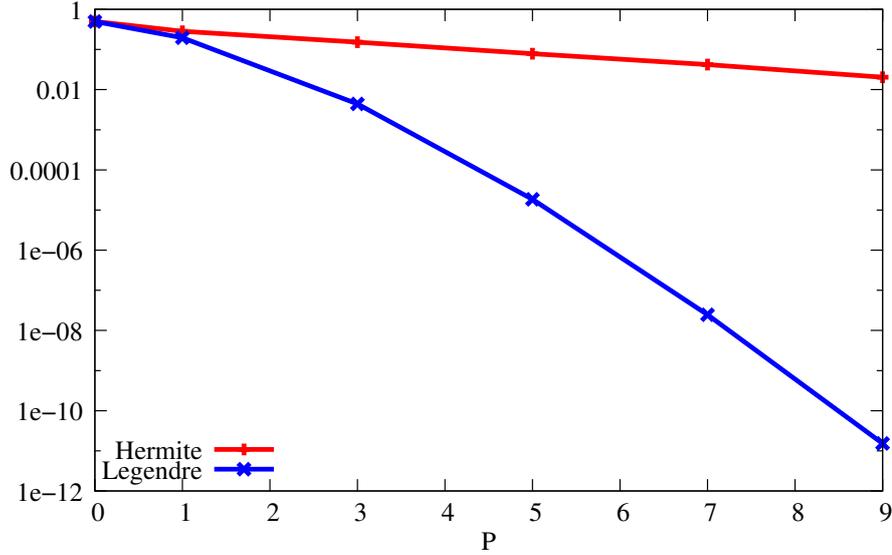


FIGURE 2.2 – Convergence en norme L^2 du chaos polynomial classique (en rouge) et du chaos polynomial généralisé (en bleu). On voit l'accélération de la convergence permise par l'introduction de la base polynomiale de Legendre gPC adaptée à l'entrée uniforme. $u(x) = \sin(2\pi x)$. Hermite : chaos polynomial de Hermite (approximation en fonction d'une gaussienne). L'uniforme est d'abord transformée en une gaussienne ξ par la relation $X = F(\xi)$ où F correspond à la fonction de répartition de la loi normale. $u(\xi)$ est alors approchée par une série de polynômes de Hermite $\sum_k u_k H_k(\xi)$. Legendre : chaos polynomial généralisé. Seuls les degrés impairs sont représentés car du fait de l'imparité de u , seuls les termes impairs contribuent au développement polynomial.

2.2.2 Polynôme du Chaos généralisé

Soit u le modèle numérique et θ le paramètre d'entrée incertain vivant dans l'espace stochastique $(\Theta, \mathcal{B}, \mathbb{P})$. θ suit la loi de probabilité de mesure $\mathbb{P}(\theta)$ supposée connue. θ est un vecteur aléatoire de dimension d dont les composantes sont supposées indépendantes. Si telle n'est pas le cas, il faut avoir recours à des méthodes permettant de rendre les composantes de l'entrée indépendantes [LD09].

Le polynôme du chaos généralisé représente la variable aléatoire $u(\theta)$ par un polynôme en θ dans la base polynomiale orthonormale par rapport à la loi de probabilité du paramètre θ (2.4).

$$U = u(\theta) \simeq \sum_{k=0}^P u_k^\theta \phi_k^\theta(\theta) \quad (2.3)$$

avec

$$\forall(k, l) \in \mathbb{N}^2, \mathbb{E} \left[\phi_k^\theta(\theta) \phi_l^\theta(\theta) \right] = \int \phi_k^\theta(\theta) \phi_l^\theta(\theta) \, d\mathbb{P}(\theta) = \delta_{k,l} \quad (2.4)$$

où les coefficients polynomiaux sont définis par

$$u_k^\theta = \mathbb{E} \left[u(\theta) \phi_k^\theta(\theta) \right] \quad (2.5)$$

$$= \int_{\Omega} u(\theta) \phi_k^\theta(\theta) \, d\mathbb{P}(\theta). \quad (2.6)$$

Le nombre de termes P dépend de la dimension de d et du degré maximal p des polynômes selon la relation combinatoire

$$P_1 + 1 = \frac{(d+p)!}{d!p!} \quad (2.7)$$

ou

$$P_2 + 1 = (p+1)^d \quad (2.8)$$

selon les choix. Mais il existe d'autres choix possibles, comme dans [Bla09], permettant de conserver uniquement les termes important du développement gPC en fonction de la réponse et selon certains critères *a priori*.

Ces relations (2.7) et (2.8) ainsi que la figure 2.3 font apparaître ce qui est communément appelé fléau de la dimension dans la littérature : on observe une croissance combinatoire rapide du nombre de termes en fonction de la dimension.

La base polynomiale, dite adaptée à θ , vérifie la relation d'orthonormalité suivante :

$$\forall(k, l) \in \mathbb{N}^2 : \int_{\Theta} \phi_k^\theta(\theta) \phi_l^\theta(\theta) \, d\mathbb{P}(\theta) = \delta_{k,l}. \quad (2.9)$$

Le tableau suivant 2.2.2 présente les bases polynomiales qui correspondent aux lois de probabilités classiques de dimension stochastique un. Dans le cadre de lois non conventionnelles, la base polynomiale adaptée se calcule numériquement par la formule analytique explicite de Christoffel (section 2.3.4) ou par l'algorithme de Chebychev (section 2.3.5) présentant une version modifiée pour les problèmes mal conditionnés. Dans les deux cas, on utilise les $2P+1$ premiers moments statistiques de la loi de θ pour déterminer la base polynomiale de degré P . Plus précisément, on utilise les

$$\mu_k = \int_{\Theta} \theta^k \, d\mathbb{P}(\theta) \quad (2.10)$$

pour $k \in \{0, 1, \dots, 2P\}$. Nous reviendrons sur ces deux méthodes numériques dans la section 2.3.

Le base polynomiale d'une variable θ de dimension d est généralement construite en tensorisant les bases 1D adaptées aux variables indépendantes $\theta_1, \dots, \theta_d$.

$$\phi_k^\theta = \prod_{i=1}^d \phi_{k_i}^{\theta_i} \quad (2.11)$$

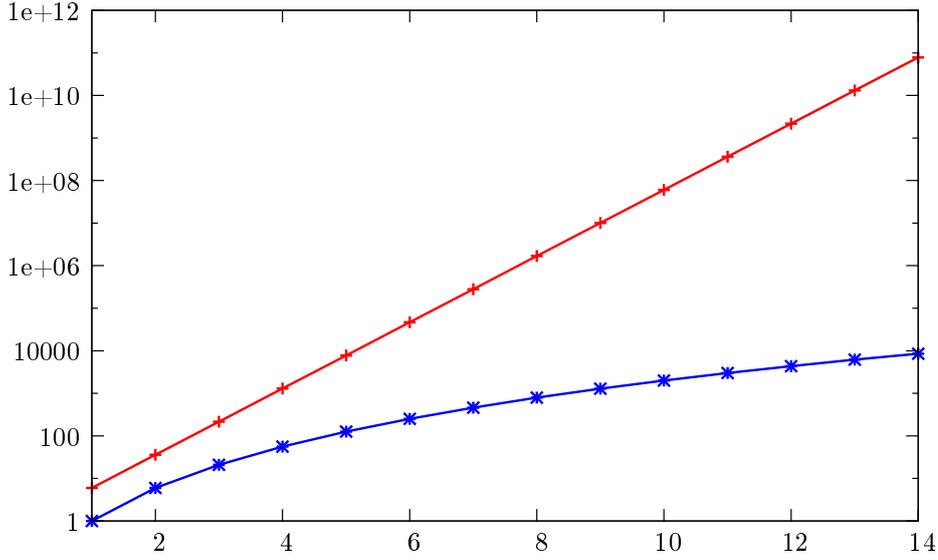


FIGURE 2.3 – Nombre de termes du développement gPC en fonction de la dimension stochastique d pour un degré polynomial partiel $p = 5$. En rouge $P_1 + 1 = (p + 1)^d$ et en bleu $P_2 + 1 = \frac{(d+p)!}{d!}$ avec $P_i + 1$ le nombre de termes du développement polynomial, p le degré partiel des polynômes du produit de tensorisation (2.11).

où l'indice k correspond en fait au multi-indice de dimension d : $k = (k_1, k_2, \dots, k_d)$.

À noter que l'existence de la base polynomial adaptée à θ n'est pas toujours assurée. Pour clarifier cette affirmation, nous résumons dans la section 2.2.5 le chapitre un de l'ouvrage Orthogonal Polynomials de Walter Gautschi [Gau04]

Avant cela, nous présentons le calcul numérique des coefficients polynomiaux, effectué de manière non intrusive, et nous illustrons l'adaptation de gPC à la loi de probabilité de l'entrée. Cela passe par l'adaptation de la quadrature numérique d'intégration pour calculer les coefficients polynomiaux, adaptation de la base polynomial, adaptation de l'approximation gPC qui résulte des deux premières adaptations.

2.2.3 Calcul numérique des coefficients polynomiaux

Il existe deux classes de méthodes non intrusives (i.e. utilisant un code de simulation en boîte noire à la manière des méthodes Monte-Carlo, cf. annexe C) pour calculer les coefficients polynomiaux du développement gPC : par moindre carré et par intégration numérique de la relation analytique (2.5).

	Variable aléatoire	Polynôme d'Askey
Lois continues	gaussienne	Hermite
	gamma	Laguerre
	beta	Jacobi
	uniforme	Legendre
	arcsinus	Chebyshev
Lois discrètes	Poisson	Charlier
	binomiale	Krawtchouk
	négative-binomiale	Meixner
	hypergéométrique	Hahn

TABLE 2.1 – Correspondance entre les bases de polynômes 1D et les lois de probabilité des paramètres d'entrée [Xiu03] 1D stochastique.

La méthode des moindres carrés cherche à minimiser en $u_0^\theta, \dots, u_P^\theta$:

$$\|u(\theta) - \sum_{k=0}^P u_k^\theta \phi_k^\theta(\theta)\|_2^2 \quad (2.12)$$

à partir d'un plan d'expérience $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N_q}$ et des calculs $u(\theta_1), u(\theta_2), \dots, u(\theta_{N_q})$.

L'autre méthode nous semble plus appropriée car les points de quadrature sont déterminé en fonction de la loi de probabilité de l'entrée. Elle consiste à intégrer numériquement (2.5) en utilisant une formule de quadrature [Wal03] (θ_i, ω_i) avec $i \in \{1, \dots, N_q\}$:

$$u_k \simeq u_k^{N_q} = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i u(\theta_i) \phi_k^\theta(\theta_i). \quad (2.13)$$

Il existe plusieurs méthodes de quadrature 1D qui sont ensuite tensorisées, de manière pleine ou creuse, pour obtenir une quadrature de dimension multiple.

Pour intégrer par rapport à une loi uniforme sur un intervalle borné, on utilise la quadrature de Gauss-Legendre, de Clenshaw-Curtis, de Fejer. Plus généralement, pour une loi de support borné on pourra se ramener modulo une transformation mettant en jeu la fonction de répartition, à ces dernières quadratures. Par rapport à une gaussienne, dont le support n'est pas borné, on utilise la quadrature de Gauss-Hermite.

La figure 2.4 montre des exemples des quadratures de Gauss-Legendre, Clenshaw-Curtis, Fejer et uniforme. La figure 2.5 montre un exemple de quadrature 2D tensorisée pleine de Clenshaw-Curtis.

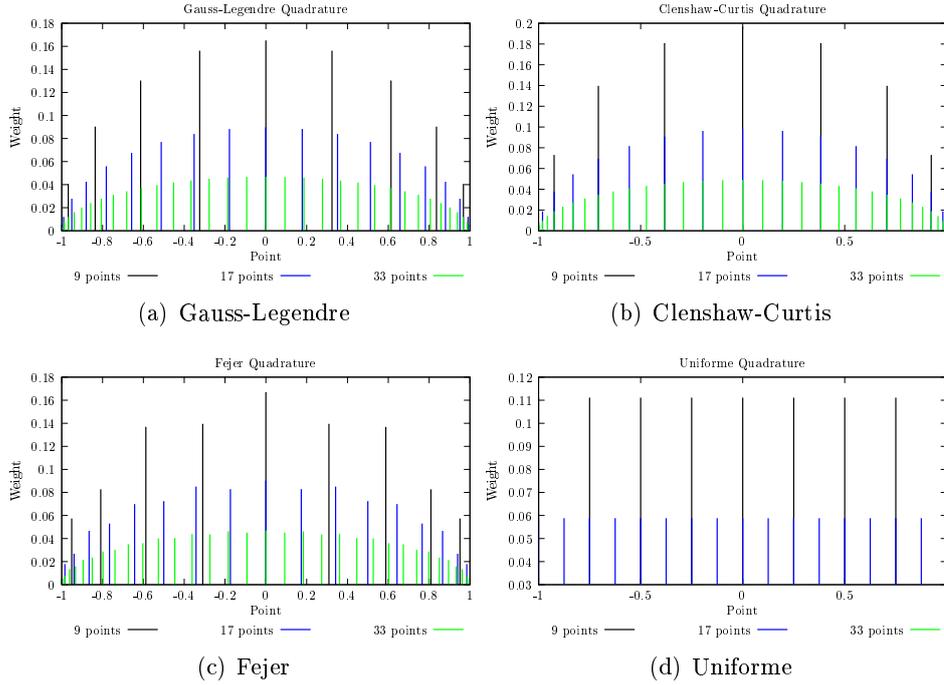


FIGURE 2.4 – Quadratures numériques

2.2.4 Illustration de l'adaptation à la loi de l'entrée de gPC

Dans cette section, nous illustrons le fait que la base polynomiale gPC est modifiée lorsque la loi de probabilité de l'entrée change. Nous choisissons d'illustrer cette propriété sur le modèle $u = \mathbb{I}\{\theta < 0.5\}$. Nous prenons trois lois de probabilité dont les densités sont représentées sur la figure 2.6.

Le fait de mettre des lois de probabilité différentes en entrée implique des lois de probabilité différentes en sortie. Le figure 2.7 montre les trois lois de la sortie correspondant aux trois lois d'entrée. Il s'agit de trois fois deux Dirac, dont les poids ne sont pas les mêmes.

Nous utilisons 16 points de quadrature d'intégration numérique adaptés à chacune des trois lois et un degré de troncature polynomial de 8, $P = 8$. La figure 2.8 montre les poids en fonction des points d'intégration. Ces poids et points sont calculés pour chacune des lois de probabilité d'entrée en passant par les moments statistiques, puis les polynômes adaptés.

Nous construisons dans chacun des trois cas les bases polynomiales adaptées à la loi d'entrée (figure 2.9 montrant les trois bases polynomiales) et la projection gPC corre-

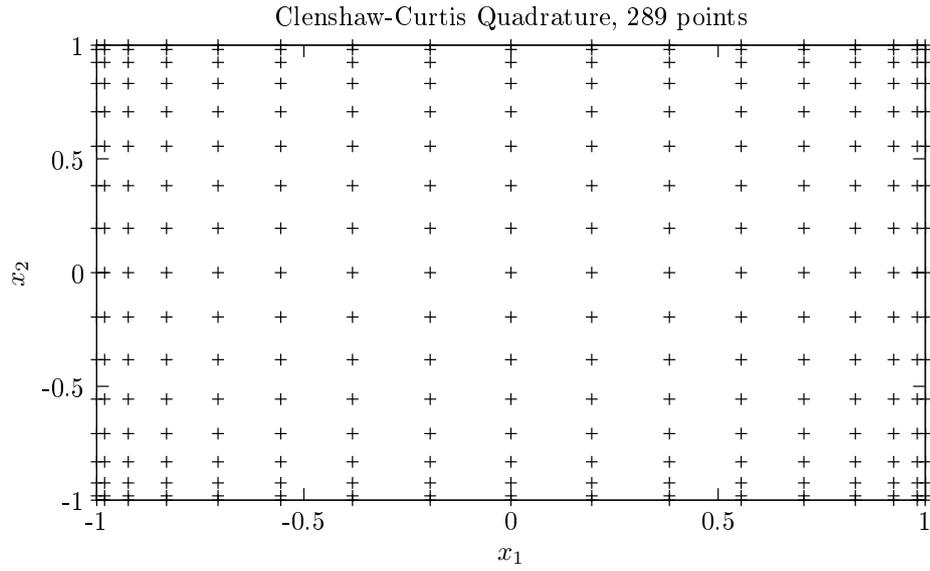


FIGURE 2.5 – Quadrature numérique tensorisée pleine de Clenshaw-Curtis, 289 points (17^2), 17 points par dimension

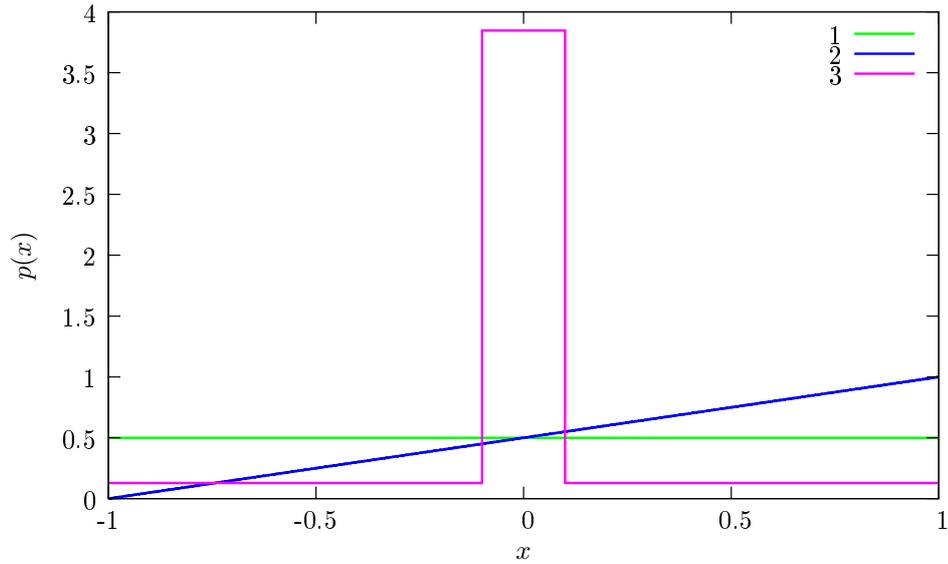


FIGURE 2.6 – Densité de probabilité des trois variables aléatoires en entrée : une uniforme, une triangulaire et une composée de trois uniformes. Nous conserverons les mêmes conventions de couleurs pour les autres figures de cette section.

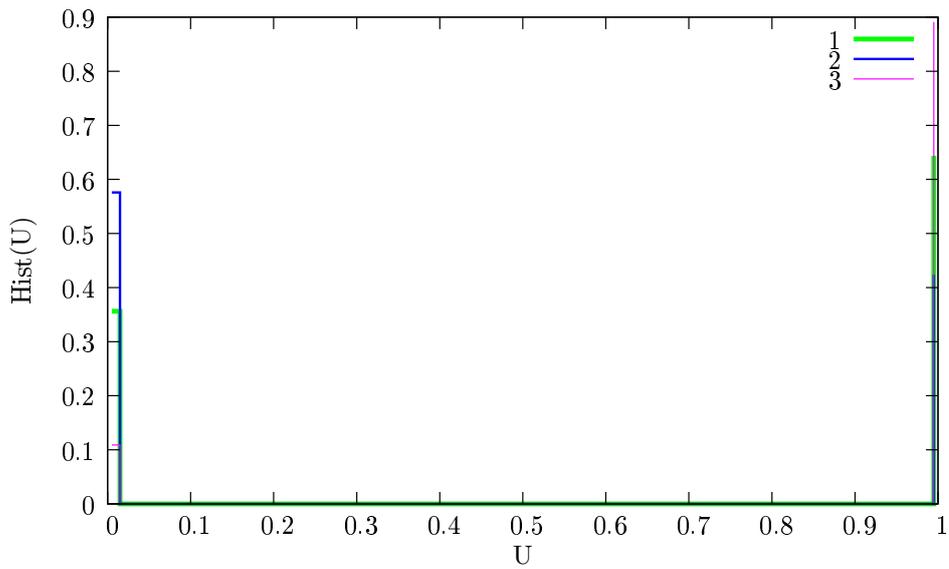


FIGURE 2.7 – Densité de probabilité des trois variables aléatoires en sortie

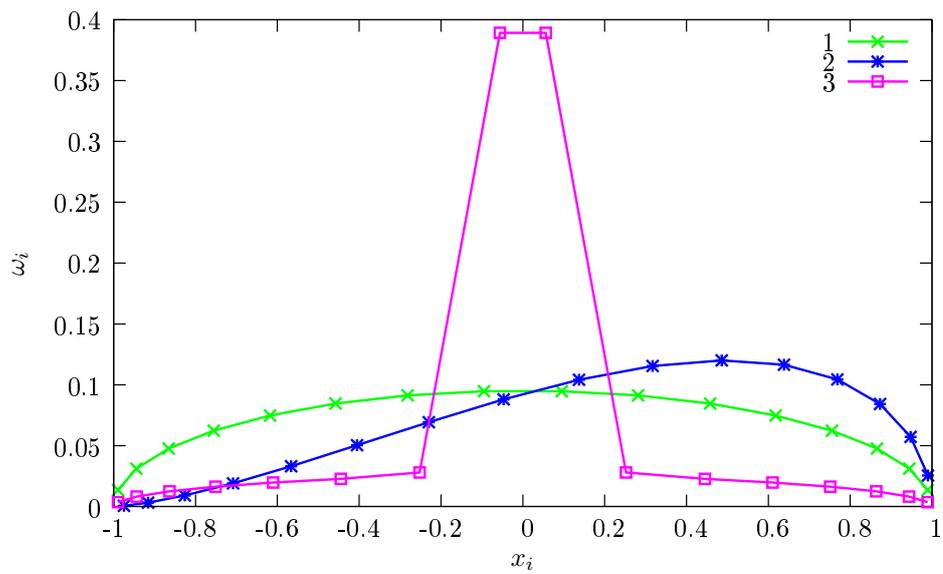


FIGURE 2.8 – Points et poids de quadrature adaptés des trois variables aléatoires en entrée

spondante avec un degré de troncature $P = 8$ (figure 2.10 et la loi de l'approximation sur la figure 2.11).

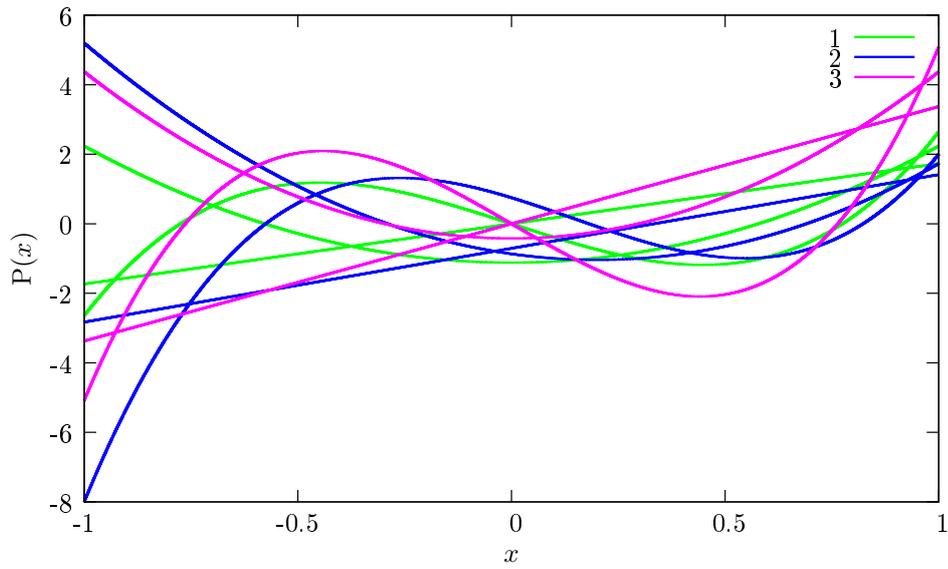


FIGURE 2.9 – Premiers polynômes de la base adaptée pour les trois variables aléatoires en entrée. Le polynôme de degré 0 n'est pas représenté car il s'agit dans tous les cas du polynôme constant 1.

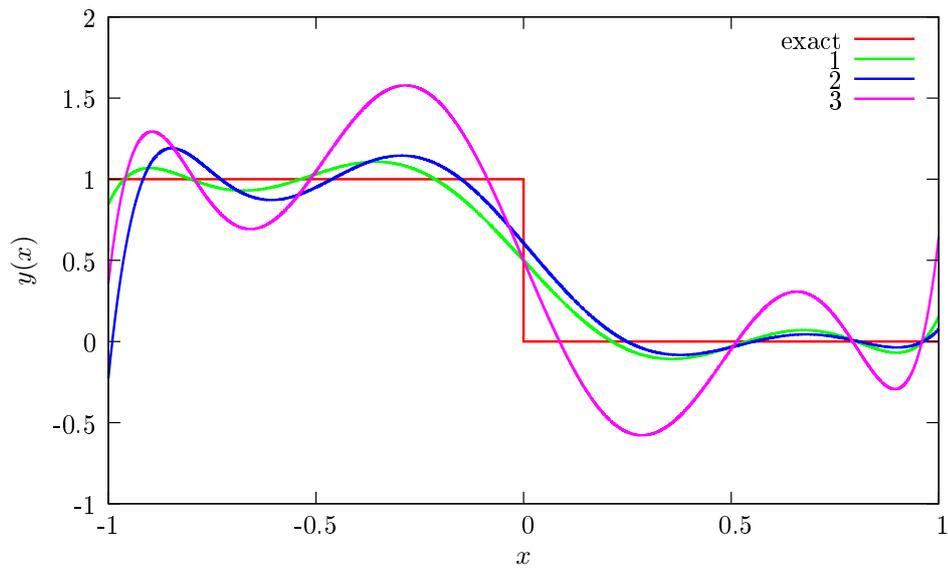


FIGURE 2.10 – Approximations gPC correspondant aux trois variables aléatoires en entrée. Le fait de mettre des lois différentes en entrée implique la construction de modèles gPC différents.

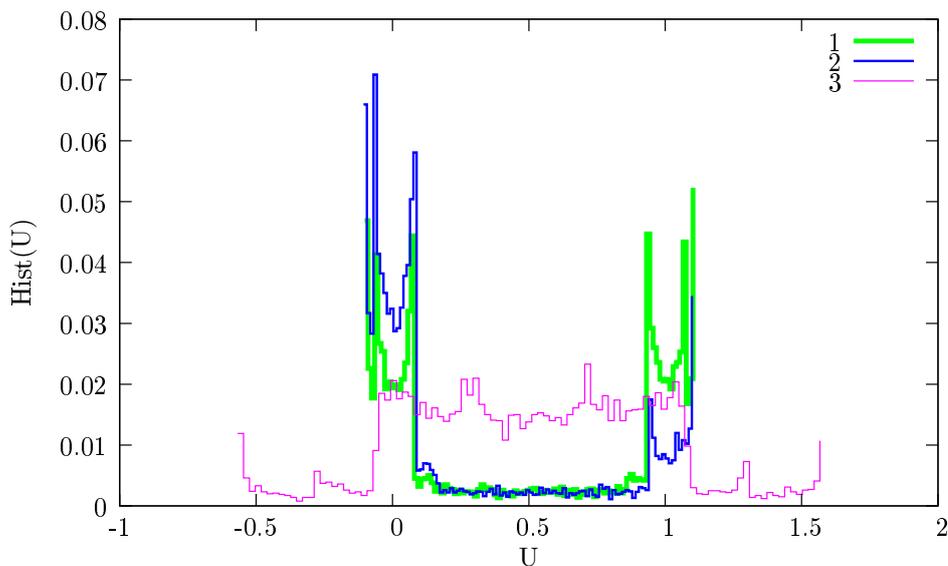


FIGURE 2.11 – Densité de probabilité des trois variables aléatoires en sortie approchées par gPC réalisé avec 10000 tirages Monte-Carlo de la variable d’entrée. La densité rose se rapproche de la loi uniforme mais le nombre d’échantillonnage n’est pas suffisant.

	E_i	Espace stochastique associé à
Erreur quadratique de y_1^{gPC}	0.0093	X_1
Erreur quadratique de y_2^{gPC}	0.0066	X_2
Erreur quadratique de y_3^{gPC}	0.0395	X_3

TABLE 2.2 – Erreur quadratique de y_i dans l’espace stochastique associé à X_i

Nous adaptions ainsi la quadrature numérique d’intégration et la base polynomiale à la loi de probabilité de l’entrée. C’est le principe de gPC.

L’approximation gPC s’adapte à l’entrée. On voit sur la figure 2.10 les différentes approximations de la sortie construites.

Notons y_i^{gPC} , avec $i \in \{1, 2, 3\}$, l’approximation gPC correspondant à l’entrée i . Nous calculons l’erreur quadratique de y_i dans l’espace stochastique associé à la variable X_i :

$$E_i = \int_{\Omega} \left[y_i^{\text{gPC}}(x) - u(x) \right]^2 p_i(x) dx \quad (2.14)$$

où p_i désigne la densité de probabilité de X_i . Le tableau 2.2 présente les valeurs de ces erreurs. On constate que bien que le modèle soit le même, les erreurs L^2 sont différentes car les lois d’entrée et les approximations gPC sont différentes.

2.2.5 Existence de la base polynomiale

Sous quelles conditions, la base de polynômes orthogonaux par rapport à la loi de θ existe-t-elle ? Dans les ouvrages et les articles traitant du polynôme du chaos généralisé très peu mentionnent cette question et encore moins y répondent. Nous insistons donc sur ce point. Pour les démonstrations, nous renvoyons le lecteur à l'ouvrage [Gau04].

Dans cette section, nous présentons les conditions d'existence de la base polynomiale adaptée à la loi de θ étant donnés ses moments statistiques. Nous les supposons calculés de manière exacte.

Soit $d\mathbb{P}(\theta)$ la mesure de probabilité de l'entrée θ . Nous introduisons les moments statistiques μ_r définis par

$$\mu_r = \int_{\Theta} \theta^r d\mathbb{P}(\theta), r = 0, 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

$\mathbb{R}[\theta]$ désigne l'espace des polynômes de la variable θ à coefficients réels et $\mathbb{R}_d[\theta]$ désigne l'espace des polynômes en θ à coefficients réels de degré inférieur ou égal à d . Sur ces deux espaces, nous définissons le produit scalaire suivant :

$$\forall P, Q \in \mathbb{R}[\theta], \langle P|Q \rangle = \int_{\Theta} P(\theta)Q(\theta) d\mathbb{P}(\theta). \quad (2.16)$$

Sa norme associée est

$$\forall P \in \mathbb{R}[\theta], \|P\| = \sqrt{\langle P|P \rangle}. \quad (2.17)$$

Les conditions d'existence de la base portent de manière équivalente sur les moments statistiques ou sur la positivité du produit scalaire. D'un point de vue numérique, nous préférons les critères portant sur les moments car ils sont testables en pratique.

Définition 1 *Le produit scalaire (2.16) est dit défini positif sur $\mathbb{R}[\theta]$ si $\|P\| > 0$ pour tout P non nul dans $\mathbb{R}[\theta]$. De même, le produit scalaire (2.16) est dit défini positif sur $\mathbb{R}_d[\theta]$ si $\|P\| > 0$ pour tout P non nul dans $\mathbb{R}_d[\theta]$.*

Le théorème suivant fournit le premier critère d'existence. Il n'est cependant pas utilisable tel quel numériquement.

Théorème 1 (chapitre 2 de [Gau96]) *Si le produit scalaire (2.16) est défini positif sur $\mathbb{R}[\theta]$ alors il existe une unique séquence $\{\pi_k^\theta\}_{k \in \mathbb{N}}$ de polynômes orthogonaux unitaires par rapport à la loi de θ .*

Afin de fournir un critère plus pratique numériquement, nous introduisons les matrices et déterminants de Hankel associés aux moments (2.15). Ces derniers permettront de tester numériquement le caractère défini positif du produit scalaire.

Définition 2 (Hankel, cf. [Gau04]) Pour $n \in \mathbb{N}^*$, la matrice de Hankel H_n est définie par

$$H_n = \begin{pmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{n-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-2} \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Son déterminant est noté Δ_n , $\Delta_n = \det(H_n)$.

À l'aide des déterminants de Hankel, le théorème suivant fournit un critère numérique simple assurant le caractère défini positif du produit scalaire (2.16), et par voie de conséquence de l'existence d'une unique base de polynômes orthogonaux et unitaires.

Théorème 2 (chapitre 2 de [Gau96]) *Le produit scalaire (2.16) est défini positif sur $\mathbb{R}[\theta]$ si et seulement si les déterminants de Hankel Δ_n sont strictement positifs pour tout n appartenant à \mathbb{N} . De même, le produit scalaire (2.16) est défini positif sur $\mathbb{R}_d[\theta]$ si et seulement si les déterminants de Hankel Δ_n sont strictement positifs pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $n \leq d + 1$.*

Les théorèmes 1 et 2 nous permettent d'écrire le théorème d'existence suivant utilisable en pratique.

Théorème 3 *Si les déterminants de Hankel Δ_n sont strictement positifs pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $n \leq d + 1$ alors il existe une unique séquence de polynômes unitaires orthogonaux de degrés inférieurs à d par rapport à la loi de θ .*

Remarque : Concernant les lois discrètes, si la variable aléatoire θ peut prendre N valeurs avec une probabilité strictement positive alors la base polynomiale n'existe que jusqu'au degré N . L'espace des variables aléatoire engendré par des polynôme en θ est de dimension finie. Une variable aléatoire θ de loi discrète prenant une infinité de valeurs avec une probabilité non nulle engendre un espace de dimension infinie. La base polynomiale adaptée à θ existe pour tout degré. •

Cette études des conditions d'existence n'est en générale pas faite et nous insistons sur l'originalité de ce travail.

2.2.6 Convergence

Le théorème de Cameron-Martin assure la convergence de gPC en norme stochastique L^2 . Cette convergence est d'autant plus rapide que le modèle est régulier.

Théorème 4 (Cameron-Martin [CM47a]) *Si u est une fonction de $L^2(\Omega)$ alors l'approximation gPC converge en norme quadratique lorsque le degré polynomial tend vers*

l'infini :

$$\|u - \sum_{k=0}^P u_k \phi_k^\theta\|_{L^2} \xrightarrow{P \rightarrow \infty} 0. \quad (2.19)$$

Preuve. Pour la preuve, nous revoyons le lecteur à [CM47a].



Ce théorème n'est valable que lorsque l'intégration des coefficients polynomiaux est exacte. Lorsque cette intégration est numérique et donc approchée, comme en fait dans la totalité des cas pratiques, la convergence en P doit être accompagnée de la convergence en points de quadrature (si par exemple les coefficients sont calculés par quadrature numérique) pour assurer la convergence globale de l'approximation. Un écueil connu provient du fait qu'il est important de garder un ordre de troncature P raisonnable pour un nombre de points de quadrature fixé (sous peine de voir les termes polynomiaux de haut degrés amplifier l'erreur d'intégration sur les coefficients). Nous illustrerons ce problème dans la section 2.2.7 et verrons ce qui se produit si à nombre de points de quadrature fixé, on augmente trop le degré polynomial de troncature.

2.2.7 Exemples d'applications numériques

Nous illustrons ici simplement la convergence de gPC sur des modèles en dimension 1 en présentant un cas régulier et un cas discontinu. Nous insistons particulièrement sur l'apparition du phénomène de Gibbs, c'est-à-dire l'apparition d'oscillations, lorsque le modèle d'intérêt présente une discontinuité ou un fort gradient.

Nous utilisons une quadrature numérique de Gauss-Legendre contenant 33 points pour illustrer la précision de l'approximation gPC et une quadrature de Gauss-Legendre contenant 1024 points afin de garantir une intégration très précise et montrer la convergence de gPC avec le degré de troncature polynomial.

Nous montrons également que, à précision finie d'intégration des coefficients polynomiaux, il existe un degré de troncature optimal pour la norme quadratique. Il n'est en pratique pas connu. En effet, l'erreur quadratique peut se décomposer comme la somme de deux termes : l'erreur d'intégration et l'erreur de troncature. L'équation (2.20) montre cette décomposition de l'erreur. L'erreur d'intégration vient de l'erreur que l'on commet en calculant les coefficients polynomiaux à précision d'intégration finie. L'erreur de troncature vient de la troncature de la série polynomiale infinie pour ne conserver que les $P+1$ premiers termes, soit un polynôme de degré P . $u^{P,N}$ désigne l'approximation tronquée au degré P calculée avec N points de quadrature. Les coefficients polynomiaux exacts notés

u_k et leur approximation par intégration est notée $u_k^{P,N}$

$$\|u(X) - u^{P,N}(X)\|_{L^2}^2 = \underbrace{\sum_{k=0}^P (u_k - u_k^N)^2}_{\text{intégration}} + \underbrace{\sum_{k=P+1}^{\infty} (u_k)^2}_{\text{troncature}}. \quad (2.20)$$

Modèle régulier Soit le modèle $u(\theta) = \sin(2\pi\theta)$ avec θ suivant une loi uniforme sur $[-1; 1]$.

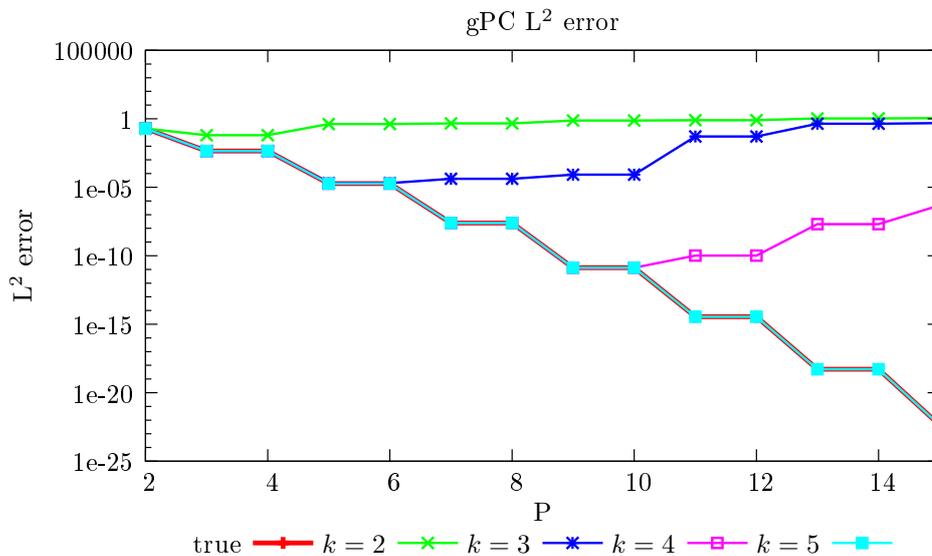


FIGURE 2.12 – Convergence de l'approximation en norme L^2 avec le degré de troncature P pour différents niveaux de quadrature. $u(\theta) = \sin(2\pi\theta)$. Cela met en évidence l'existence d'un degré de troncature polynomial optimal.

La figure 2.12 présente la convergence en norme quadratique de l'approximation gPC correspondant à différents niveaux de quadrature de Clenshaw-Curtis allant de $k = 2$ à $k = 5$. Nous remarquons que sur un modèle continu, l'approximation gPC converge très rapidement. De plus, pour des quadratures de petites dimensions, il apparaît un degré optimal pour la norme L^2 . Ainsi, l'erreur diminue jusqu'à à certain degré puis augmente. Avant cet optimum, l'erreur de troncature diminue plus vite que l'erreur d'intégration augmente. Et après, l'erreur d'intégration prend le pas sur l'erreur de troncature et celle-ci est même amplifiée par le degré polynomial élevé.

La figure 2.13 montre le modèle exacte et les approximations gPC de degré 3 et 5 avec une quadrature de Gauss-Legendre à 16 points.

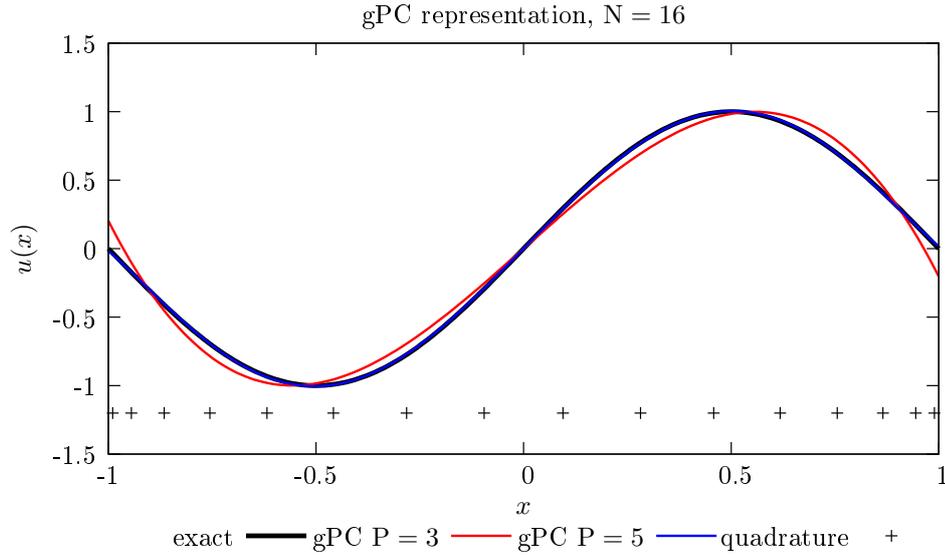


FIGURE 2.13 – Approximations gPC cas sinus pour $P = 3$ et $P = 5$ et une quadrature de Gauss-Legendre de 16 points. Dès $P = 5$, l'approximation est d'une grande précision. $u(\theta) = \sin(2\pi\theta)$.

Modèle discontinu Soit le modèle $u(\theta) = \mathbb{I}\{\theta < 0.5\}$ avec θ suivant une loi uniforme sur $[-1; 1]$. On appelle cette fonction le modèle choc, celle-ci anticipe les difficultés qu'il est possible de rencontrer en considérant des problèmes de dynamique des gaz compressibles par exemple.

La figure 2.14 montre la convergence de l'approximation gPC du modèle choc avec le degré polynomial pour différents niveaux de quadrature. Elle fait apparaître de nouveau l'existence à quadrature fixée d'un degré de troncature optimal.

la figure 2.14 montre les approximations gPC de degré $P = 3$ et $P = 5$. On voit apparaître des oscillations lorsque P augmente. On parle aussi de phénomène de Gibbs.

Nous profitons de ce cas test pour illustrer le compromis intégration troncature à précision fini, c'est-à-dire à nombre de points de quadrature fini. Nous prenons ici 16 points de quadrature et faisons varier le degré polynomial de 1 à 25. Nous étudions l'erreur de troncature, l'erreur d'intégration et l'erreur quadratique (qui est la somme des deux premières).

La figure 2.16 montre l'augmentation de l'erreur d'intégration avec le degré polynomial (courbe bleue), car lorsque P augmente, la fonction à intégrer croît en complexité et en non linéarités. Bien sûr, l'erreur de troncature décroît (courbe rose). Enfin, l'erreur L^2 (courbe rouge) diminue puis, passé un certain P (en l'occurrence $P = 14$), elle augmente.

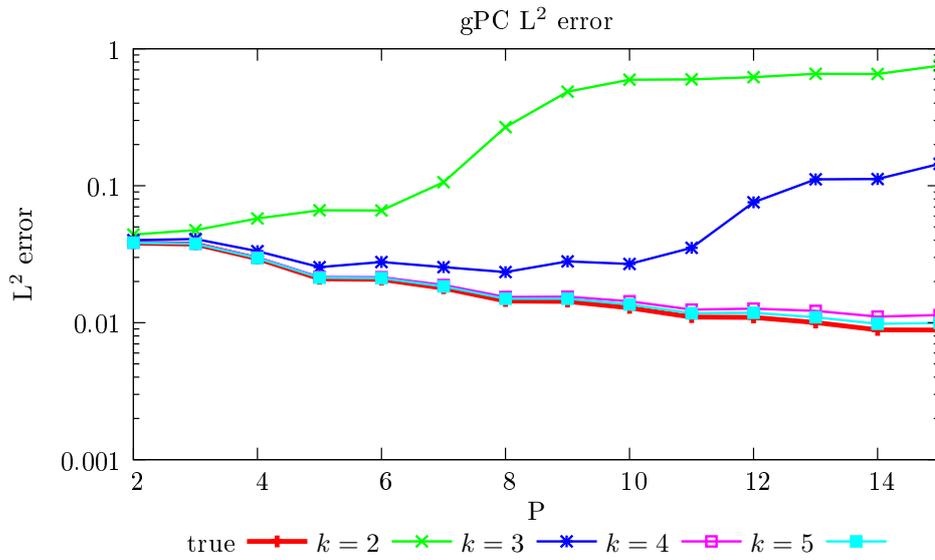


FIGURE 2.14 – Convergence de l’approximation en norme L^2 avec le degré de troncature P pour différents niveaux de quadrature. $u(\theta) = \mathbb{I}\{\theta < 0.5\}$. Cela met en évidence l’existence d’un degré de troncature polynomial optimal.

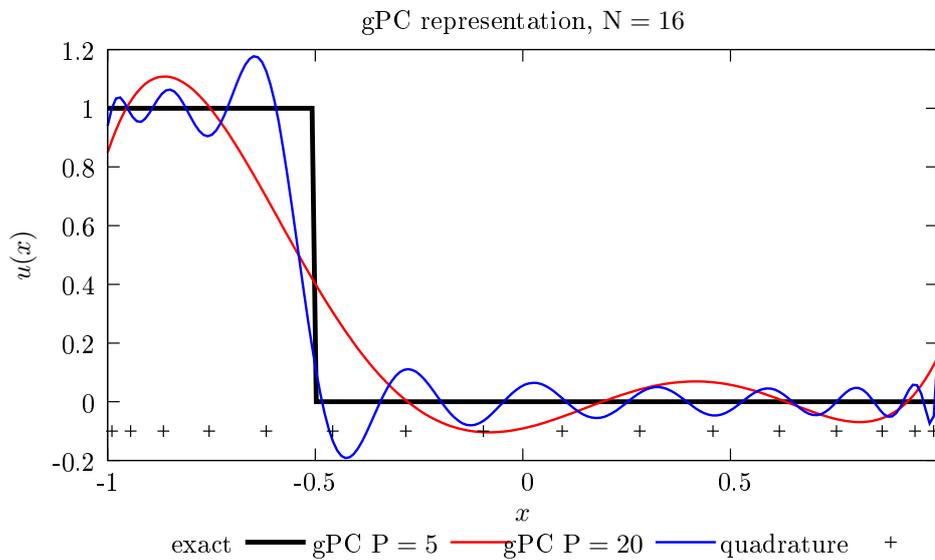


FIGURE 2.15 – Approximations gPC : cas indic pour $P = 5$ et $P = 20$ et une quadrature de Gauss-Legendre à 16 points. Avec P augmentant, il apparaît des oscillations. Il s’agit du phénomène de Gibbs. $u(\theta) = \mathbb{I}\{\theta < 0.5\}$.

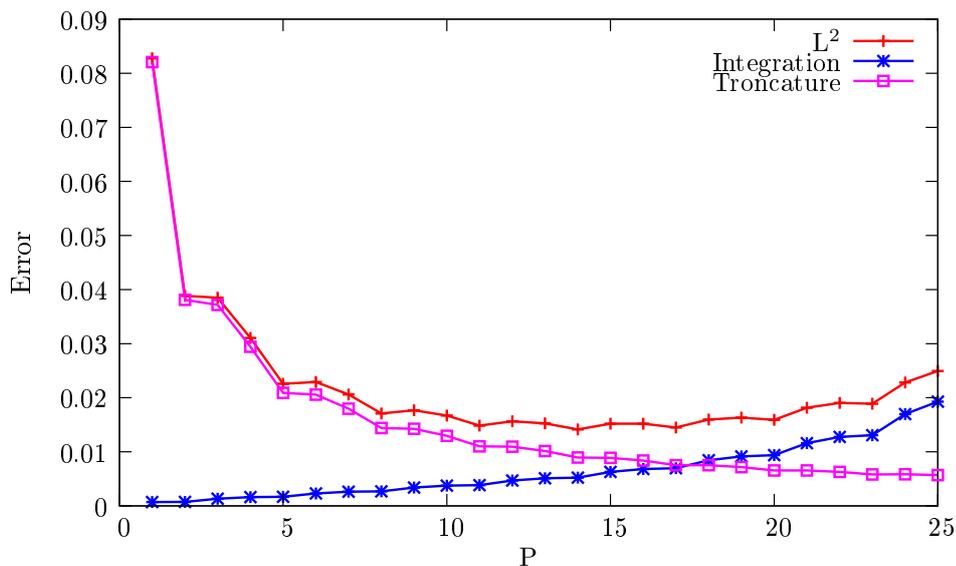


FIGURE 2.16 – Évolution de l’erreur quadratique, de l’erreur d’intégration et de l’erreur de troncature avec le degré polynomial P sur le cas test indicatrice $u(\theta) = \mathbb{I}\{\theta < 0.5\}$.

À partir d’un certain moment, l’augmentation de l’erreur d’intégration prend le pas sur l’erreur de troncature.

Remarque : En pratique, il n’est pas possible (en tout cas dans le cas général de solutions non régulières) d’évaluer les erreurs de troncature et d’intégration afin de déterminer le degré polynomial optimal pour la norme quadratique à précision d’intégration finie. Cependant, dans l’annexe D, nous proposons une approche basée sur la validation croisée. Mais les études menées sur cette méthode ont permis de conclure qu’il ne faut pas l’utiliser en boîte noire mais comme une source d’information quant à la précision de l’approximation gPC et quant au choix du degré de troncature. Nous ne l’utiliserons pas ici de manière systématique par la suite. •

2.3 Chaos polynomial généralisé itératif

Objectifs : Dans cette section nous décrivons l’algorithme d’approximation stochastique i-gPC. Cet algorithme vise à construire une approximation d’une variable aléatoire de variance finie dans un espace probabilité. Il s’agit d’une approche adaptative itérative du polynôme du chaos généralisé vu à la section 2.2, motivée par un besoin d’une meilleure précision numérique et de minimiser l’apparition du phénomène de Gibbs lors de l’application de gPC à des solutions discontinues (notamment pour aborder par la suite des

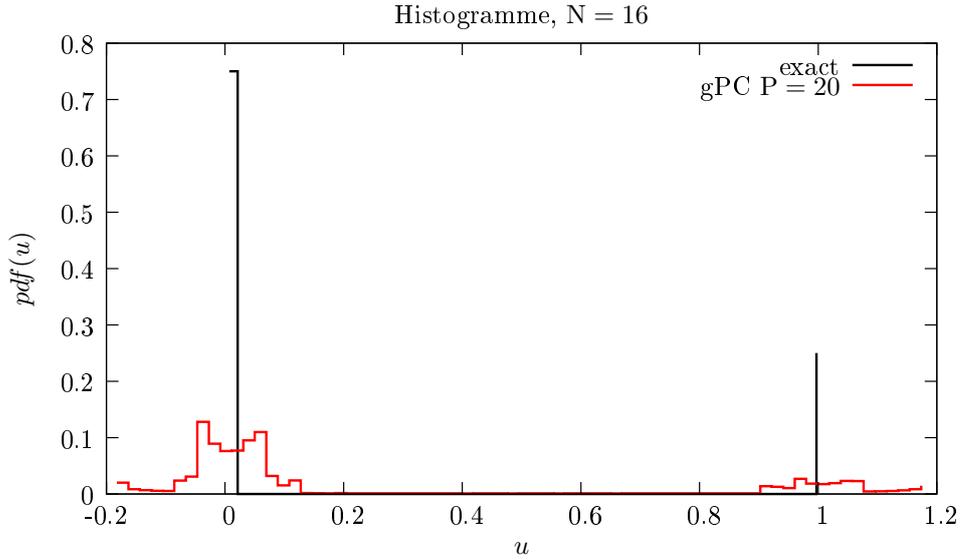


FIGURE 2.17 – Histogramme de la réponse $u(\theta) = \mathbb{I}\{\theta < 0.5\}$ exact et reconstruit avec gPC $P = 20$, 16 points de quadrature de Gauss-Legendre. La réponse exacte est une variable aléatoire discrète ne prenant que deux valeurs. gPC ne parvient pas à restituer ce comportement.

problèmes de type dynamique des gaz compressibles). •

i-gPC [PL11a] constitue un nouvel algorithme d'approximation de variables aléatoires basé sur le polynôme du chaos généralisé et sur la théorie des problèmes aux moments. Nous l'aborderons dans un premier temps sur le plan théorique dans un contexte intégration infinie, c'est-à-dire avec une intégration numérique exacte pour le calcul des coefficients polynomiaux. Dans un second temps, nous l'aborderons sur le plan pratique en tenant compte de la précision finie de l'intégration. Il s'agira d'analyser la stabilité de l'algorithme i-gPC, l'erreur d'intégration et l'erreur de troncature. Nous montrons ici la viabilité de i-gPC en y intégrant un critère d'arrêt basé sur l'existence des bases polynomiales étant donnés ses moments statistiques. L'intérêt de cette méthode réside dans la construction automatique et itérative d'une approximation optimale au sens de la norme L^2 d'une variable aléatoire et ce sans appel supplémentaire au modèle u .

2.3.1 Contexte

Nous nous plaçons de nouveau, comme dans la section 2.2, dans le contexte de la propagation d'incertitudes. Un modèle physique u transforme une entrée X aléatoire en une variable réelle $u(X)$ qu'il s'agit d'approcher.

Dans la littérature il existe de nombreuses bases pour exprimer de façon concise $u(X)$ et en construire une approximation : le polynôme du chaos (PC), le polynôme du chaos généralisé (gPC), gPC par morceaux, les bases d'ondelettes, Le choix de la base dépend fortement de la régularité de la solution. L'algorithme i-gPC est né entre autre de la volonté d'automatiser la procédure de sélection de la meilleure base au sens de la norme L^2 et ce en particulier pour les modèles discontinus. En effet, le choix de la base se révèle très compliqué pour les modèles discontinus pour lesquels on voit apparaître le phénomène de Gibbs. i-gPC peut être vu comme une approche générale pour traiter le phénomène de Gibbs survenant aux discontinuités.

Voici quels étaient les attentes concernant i-gPC :

1. ne pas dégrader la précision de gPC quelque soit la régularité de la quantité d'intérêt ;
2. ne pas réaliser d'évaluation supplémentaire du modèle, i-gPC reste un algorithme de post-traitement ;
3. accroître la précision d'approximation des modèles présentant des discontinuités en norme L^2 .

Nous verrons dans la suite du chapitre comment et en quoi ces attentes ont été satisfaites.

2.3.2 Description de l'algorithme i-gPC

i-gPC, pour iterative generalized Polynomial Chaos, ou polynôme du chaos généralisé itératif, est un algorithme itératif d'approximation de variables aléatoires basé sur gPC (section 2.2). Cet algorithme se fonde sur l'idée simple suivante. Pour toute variable aléatoire réelle U de carré sommable (de variance finie), il existe une variable aléatoire réelle V ainsi que des réels μ et σ tels que

$$U = \mu + \sigma V. \quad (2.21)$$

Pour s'en convaincre, il suffit de choisir $\mu = \mathbb{E}[U]$, $\sigma = \sqrt{\text{Var}[U]}$ et de poser $V = \frac{U - \mu}{\sigma}$: V est en fait la variable aléatoire centrée réduite de U . La relation (2.21) constitue l'expression polynomiale de U dans une base orthonormale en fonction de cette variable aléatoire V , la plus concise possible. Malheureusement, en pratique, nous ne connaissons pas V . Cependant, son existence ouvre la possibilité de rechercher V ou la base polynomiale orthonormale correspondante, c'est-à-dire orthonormale à la distribution de V . Il s'agit de cela que tente de réaliser i-gPC de manière itérative en itérant les deux étapes suivantes :

1. projection du modèle dans une certaine base polynomiale ;
2. construction de la base polynomiale adaptée à cette approximation.

Par adaptée, nous entendons la chose suivante.

Définition 3 (Base polynomiale adaptée à une variable aléatoire) *Soit X une variable aléatoire. La base polynomiale $(\phi_k^X)_{k \in \mathbb{N}}$ est dite adaptée à la variable aléatoire X si elle est orthonormale par rapport à la loi de X.*

$$\forall (k, l) \in \mathbb{N}^2, \int_{\Theta} \phi_k^X(x) \phi_l^X(x) d\mathbb{P}(x) = \delta_{k,l}. \quad (2.22)$$

Le processus est initié par une première approximation gPC. Puis les étapes de construction de la base adaptée qui fera l'objet de la section 2.3.3, et de projection sont itérées jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt soit vérifié. Nous traiterons ce critère d'arrêt dans la section 2.3.8.

Voici l'algorithme i-gPC dont nous détaillerons les étapes dans la suite de ce chapitre.

Étape 0 (gPC) : – Choix du nombre de simulations N.

- Choix du degré polynomial de troncature P.
- Quadrature d'intégration numérique $(X_i, \omega_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$.
- Base polynomiale adaptée à X : $(\phi_k^X)_{k \in \{0, \dots, P\}}$.
- Faire tourner les simulations : $u(X_1), \dots, u(X_N)$ une fois pour toute (il s'agit d'une approche non intrusive dans laquelle le code u considéré comme une boîte noire).
- Calcul des coefficients gPC par intégration numérique par une formule de quadrature :

$$\forall k \in \{0, \dots, Q\}, y_k^X = \mathbb{E} [u(X) \phi_k^X(X_i)] \quad (2.23)$$

$$\simeq \sum_{i=1}^N \omega_i u(X_i) \phi_k^X(X_i). \quad (2.24)$$

- Approximation gPC

$$u(X) \simeq Y_X^P = Z^0 = \sum_{k=0}^Q y_k^X \phi_k^X(X). \quad (2.25)$$

Itération m : Z^m désigne l'approximation après m itérations.

- Calcul des $2P + 2$ premiers moments statistiques de l'approximation Z^m :

$$\forall s \in \{0, 1, \dots, 2P + 1\}, \mu_s^{Z^m} = \sum_{i=1}^N \omega_i (Z^m)^s \quad (2.26)$$

- Calcul de la base polynomiale adaptée à Z^m connaissant ses moments statistiques. $(\phi_k^{Z^m})$ vérifiant

$$\forall (k, l) \in \mathbb{N}^2 : \int \phi_k^{Z^m}(z) \phi_l^{Z^m}(z) d\mathbb{P}^{Z^m}(z) = \delta_{k,l}. \quad (2.27)$$

– Nouvelle approximation par projection dans cette base

$$\forall k \in \{0, \dots, Q\}, y_k^{Z^m} = \mathbb{E} [u \phi_k^{Z^m}(Z^m)] \quad (2.28)$$

$$= \mathbb{E} [u(\mathbf{X}) \phi_k^{Z^m}(Z^m(\mathbf{X}))] \quad (2.29)$$

$$= \sum_{i=1}^N \omega_i u(\mathbf{X}_i) \phi_k^{Z^m}(Z^m(\mathbf{X}_i)) \quad (2.30)$$

$$u(\mathbf{X}) \simeq Y_{Z^m}^P = Z^{m+1} = \sum_{k=0}^Q y_k^{Z^m} \phi_k^{Z^m}(Z^m). \quad (2.31)$$

Critère d'arrêt : le critère d'arrêt de la méthode sera décrit par la suite.

Le diagramme procédurale 2.18 reprend cette description de i-gPC.

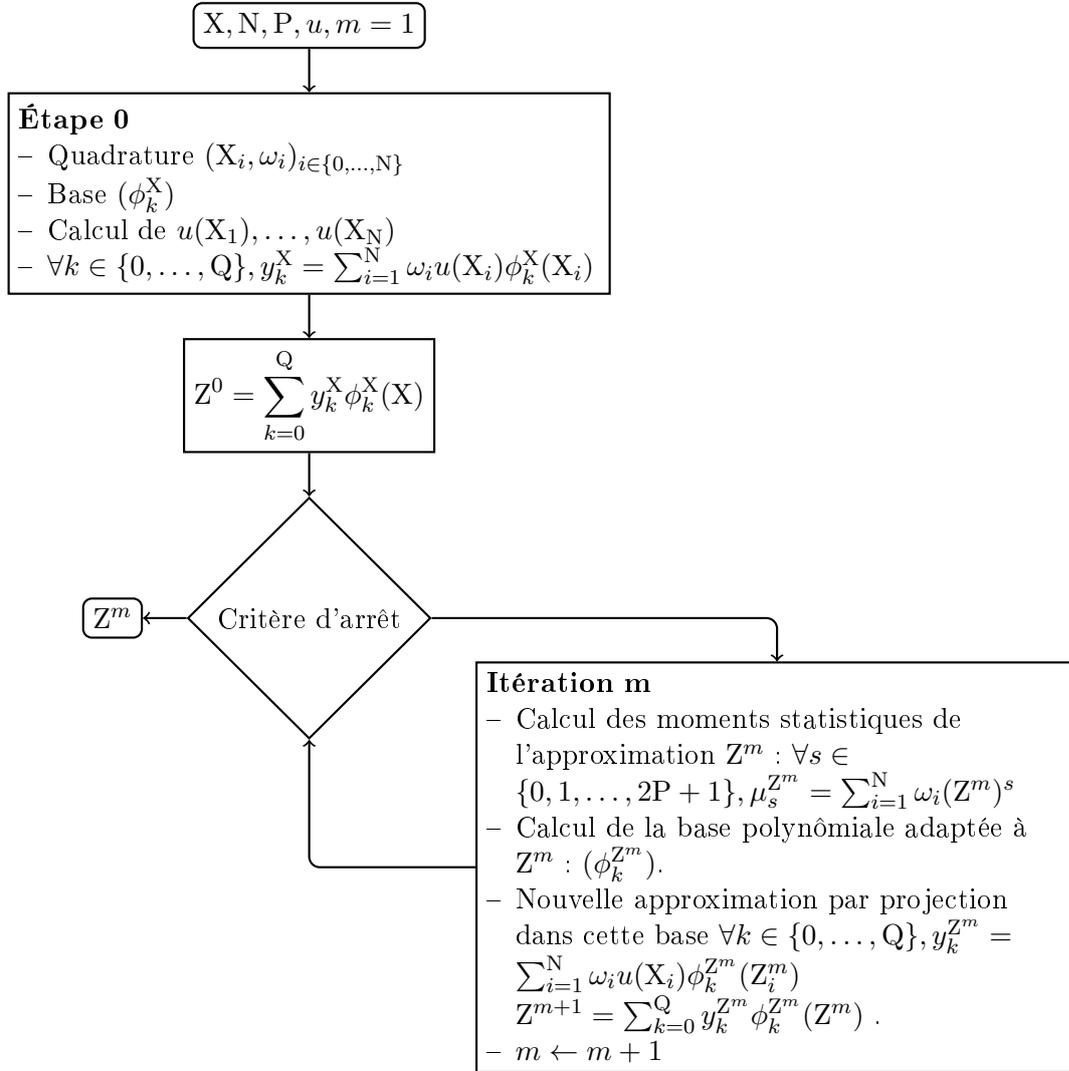


FIGURE 2.18 – Diagramme procédural de l'algorithme i-gPC avec l'étape 0 gPC et les itérations sur la construction de bases polynomiales adaptées à l'approximation précédente

2.3.3 Base polynomiale

Afin de déterminer la base polynomiale adaptée à une variable aléatoire, il existe deux approches : l'une analytique par la formule de Christoffel et l'autre algorithmique par l'algorithme de Chebychev. La première est coûteuse numériquement et en mémoire et instable (voir [Gau04] dans le paragraphe au bas de 54). La seconde est abordable en terme de coût numérique et mémoire et moins instable. Nous opterons donc pour la seconde approche.

2.3.4 Formule de Christoffel

La base orthonormale adaptée à la variable aléatoire X s'exprime par la formule de Christoffel [Sze39] et [Akh65] page 3 à l'aide de ses moments statistiques μ_i définis par

$$\forall i \in \mathbb{N}, \mu_i = \int_{\Theta} x^i d\mathbb{P}(x). \quad (2.32)$$

Pour $n \in \mathbb{N}$, le polynôme de degré n de la base s'exprime ainsi.

$$\phi_n^X(x) = \frac{1}{\sqrt{D_{n-1}D_n}} \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \dots & \mu_n \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_{n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \dots & \mu_{2n} \\ 1 & x & \dots & x^n \end{vmatrix}, \quad (2.33)$$

où $|\cdot|$ désigne le déterminant et D_n le déterminant de la matrice de terme général $\{\mu_{i+j}\}_{(i,j) \in \{0, \dots, n\}^2}$.

$$D_n = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \dots & \mu_n \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_{n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_n & \mu_{n+1} & \dots & \mu_{2n} \end{vmatrix}. \quad (2.34)$$

Cette formule de Christoffel est pratique pour effectuer des développements théoriques mais, faisant intervenir des déterminants, se révèle coûteuse en temps de calcul et en espace mémoire occupé si implémentée. Elle est de plus souvent instable numériquement lorsque les matrices sont mal conditionnées. L'algorithme de Chebychev permet de s'affranchir en partie de ces inconvénients, surtout quant au temps de calcul et à l'occupation mémoire, mais également concernant la stabilité.

2.3.5 Algorithme de Chebychev

Nous décrivons ici l'algorithme de Chebychev permettant de déterminer numériquement la base de polynômes orthogonaux à une mesure de probabilité ($d\lambda$) étant donnée cette

mesure. Il s'agit d'un algorithme plus stable et moins coûteux que la méthode consistant à utiliser directement la formule analytique de Christoffel mettant en jeu un déterminant (relation (2.33)). Il est en effet essentiel, dans les problèmes aux moments qui se caractérise par leur grande sensibilité par rapport aux valeurs des moments, de se concentrer sur la stabilité des algorithmes.

Nous supposons que la mesure de probabilité $d\lambda$ est donnée par ses $2n$ premiers moments statistiques $\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{2n-1}$.

Nous savons que les polynômes π_k d'une base de polynômes orthogonaux et unitaires sont liés par une relation de récurrence de la forme

$$\pi_{k+1}(x) = (1 - \alpha_k)\pi_k(x) - \beta_k\pi_{k-1}(x) \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.35)$$

$$\pi_{-1}(x) = 0 \quad (2.36)$$

$$\pi_0(x) = 1 \quad (2.37)$$

où les coefficients $(\alpha_k, \beta_k)_{k \in \mathbb{N}}$ sont réels [Gau04] (théorème 1.27, chapitre 1, page 10).

Preuve. Démontrons brièvement la relation (2.35). Les polynômes $(\pi_k)_{k \in \mathbb{N}}$ étant unitaires, $\pi_{k+1} - x\pi_k$ est de degré k . Il s'exprime donc dans la base $\pi_0, \pi_1, \dots, \pi_k$. Il existe donc des coefficients α_k, β_k et $\gamma_{k,j}$ pour $0 \leq j \leq k-2$ tels que

$$\pi_{k+1} - x\pi_k = -\alpha_k\pi_k - \beta_k\pi_{k-1} + \sum_{j=0}^{k-2} \gamma_{k,j}\pi_j. \quad (2.38)$$

Par projection de (2.38) sur π_k il vient :

$$\alpha_k = \frac{\langle x\pi_k | \pi_k \rangle}{\langle \pi_k | \pi_k \rangle}. \quad (2.39)$$

De même, par projection de (2.38) sur π_{k-1} il vient :

$$\beta_k = \frac{\langle x\pi_k | \pi_{k-1} \rangle}{\langle \pi_{k-1} | \pi_{k-1} \rangle}. \quad (2.40)$$

Projetons maintenant (2.38) sur π_{j_0} avec $0 \leq j_0 \leq k-2$. Il vient

$$\gamma_{k,j_0} = -\frac{\langle x\pi_k | \pi_{j_0} \rangle}{\langle \pi_{j_0} | \pi_{j_0} \rangle}. \quad (2.41)$$

Or

$$\langle x\pi_k | \pi_{j_0} \rangle = \langle \pi_k | x\pi_{j_0} \rangle. \quad (2.42)$$

De plus, comme $j_0 \leq k-2$, $x\pi_{j_0}$ appartient à $\mathbb{R}_{k-1}[x]$.

Or π_k est orthogonal à $\mathbb{R}_{k-1}[x]$

Donc $\langle \pi_k | x\pi_{j_0} \rangle = 0$. Et donc $\gamma_{k,j_0} = 0$.

Par conséquent, il ne reste que deux termes dans (2.38) ce qui prouve la relation (2.35). 

La connaissance de ces coefficients (α_k, β_k) pour $k \in \mathbb{N}$ rend possible et facile le calcul de manière récursive des valeurs des polynômes π_k pour $k \in \mathbb{N}$.

La connaissance de ces coefficients (α_k, β_k) pour $k \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ rend possible et facile le calcul de manière récursive des valeurs des polynômes $\pi_0, \pi_1, \dots, \pi_n$.

Et une fois que l'on a les polynômes unitaires, il ne reste plus qu'à les normaliser pour obtenir la base orthonormale.

Le problème alors à résoudre consiste à calculer les n premiers coefficients (α_k, β_k) pour $k \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ étant donné les $2n$ premiers moments statistiques de la loi de probabilité $\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{2n-1}$.

Il existe une relation analytique donnant les (α_k, β_k) , « malheureusement, ce problème est extrêmement sensible à une perturbation sur les moments » [Gau82] de sorte que des moments calculés avec une précision finie peuvent conduire à une divergence du résultat numérique, en l'occurrence de la valeur des polynômes orthogonaux. Or nous rencontrons dans nos applications ce problème de la précision finie des moments car nous les calculons par intégration numérique en utilisant une formule de quadrature. C'est pour limiter ce risque que nous utilisons l'algorithme de Chebychev.

L'algorithme de Chebychev calcule les coefficients (α_k, β_k) à partir des quantités $\sigma_{k,l}$

$$\sigma_{k,l} = \int_{\mathbb{R}} \pi_k(x) x^l d\lambda(x) \quad (2.43)$$

avec

$$\alpha_0 = \frac{\sigma_{0,1}}{\sigma_{0,0}} \quad \beta_0 = \sigma_{0,0} \quad (2.44)$$

$$\alpha_k = \frac{\sigma_{k,k+1}}{\sigma_{k,k}} - \frac{\sigma_{k-1,k}}{\sigma_{k-1,k-1}} \quad \beta_k = \frac{\sigma_{k,k}}{\sigma_{k-1,k-1}} \quad (2.45)$$

$$k = 1, 2, \dots \quad (2.46)$$

L'intérêt de passer ainsi pas les $\sigma_{k,l}$ réside dans le fait qu'il s'expriment de manière récursive avec l'indice k en fonction des moments :

$$\sigma_{-1,0} = 0 \quad (2.47)$$

$$\sigma_{0,l} = \mu_l \quad (2.48)$$

$$\sigma_{k,l} = \sigma_{k-1,l+1} - \alpha_{k-1}\sigma_{k-1,l} - \beta_{k-1}\sigma_{k-2,l} \quad (2.49)$$

$$l = k, k+1, \dots, 2n-k-1. \quad (2.50)$$

Preuve. Montrons la relation de récurrence (2.49) en insérant la relation de récurrence

sur la base de polynômes orthogonaux (2.35) dans la définition de $\sigma_{k,l}$ (2.43).

$$\sigma_{k,l} = \int_{\mathbb{R}} \pi_k(x) x^l d\lambda(x) \quad (2.51)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} \left\{ (x - \alpha_{k-1}) \pi_{k-1}(x) - \beta_{k-1} \pi_{k-2}(x) \right\} x^l d\lambda(x) \quad (2.52)$$

$$= \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \pi_{k-1}(x) x^{l+1} d\lambda(x)}_{\sigma_{k-1,l+1}} - \alpha_{k-1} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \pi_{k-1}(x) x^l d\lambda(x)}_{\sigma_{k-1,l}} \quad (2.53)$$

$$- \beta_{k-1} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \pi_{k-2}(x) x^l d\lambda(x)}_{\sigma_{k-2,l}} \quad (2.54)$$

$$\sigma_{k,l} = \sigma_{k-1,l+1} - \alpha_{k-1} \sigma_{k-1,l} - \beta_{k-1} \sigma_{k-2,l}. \quad (2.55)$$

Ce qui prouve la relation (2.49). 👍

Nous utilisons cet algorithme à chaque itération de i-gPC afin de déterminer la base de polynômes orthonormaux par rapport à la mesure de l'approximation précédente.

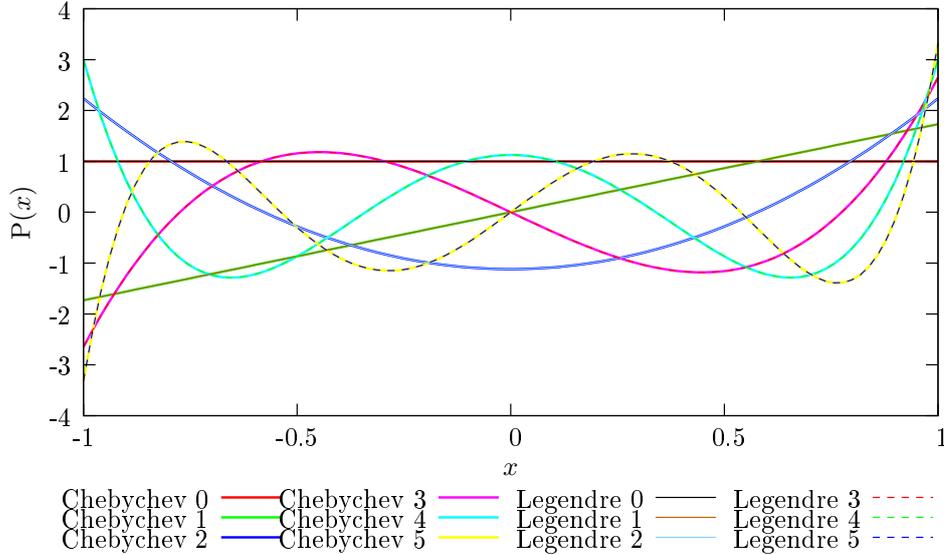


FIGURE 2.19 – Polynômes de Legendre et polynômes donnés par l'algorithme de Chebychev étant donnés les moments exacts de la loi uniforme sur $[-1; 1]$

La figure 2.19 montre les polynômes de Legendre et les polynômes calculés par l'algorithme de Chebychev étant donnés les moments exacts de la loi uniforme sur $[-1; 1]$. On peut voir la parfaite correspondance des deux et donc la très bonne précision de la

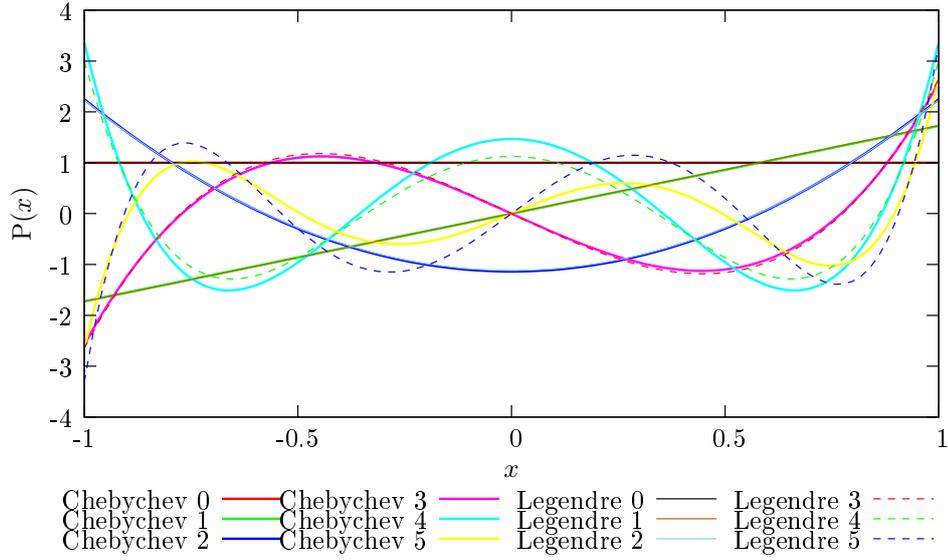


FIGURE 2.20 – Polynômes de Legendre et polynômes donnés par l’algorithme de Chebyshev étant donnés les moments perturbés à 10^{-2} de la loi uniforme sur $[-1; 1]$

méthode de Chebyshev. La figure 2.20 montre l’impact d’une perturbation sur le calcul des moments sur le résultat de l’algorithme de Chebyshev. Il s’agit ici d’une perturbation aléatoire suivant une loi uniforme sur l’intervalle $[-10^{-2}; 10^{-2}]$. Chaque moment est perturbé indépendamment des autres. Les perturbations sont des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées. Plus le degré polynomial augmente et plus la perturbation sur les moments a un impact sur le polynôme calculé par la méthode de Chebyshev.

2.3.6 Convergence théorique

On suppose ici que les coefficients de projection gPC sont exactement calculés à chaque itération de i-gPC. La convergence de i-gPC repose d’une part sur la convergence de gPC, et donc sur le théorème de Cameron-Martin, et sur le théorème suivant d’autre part.

Théorème 5 *En utilisant les mêmes notations que ci-dessus, à chaque itération l’inégalité*

$$\|u - Z^{m+1}\|_{L^2} \leq \|u - Z^m\|_{L^2} \quad (2.56)$$

est vérifiée.

L’inégalité (2.56) n’est pas stricte. Elle n’assure pas d’amélioration stricte à chaque itération. Dépendant de l’application considérée et du point de départ Z^0 , une itération peut être contractante (inégalité stricte) ou pas (inégalité non stricte).

Le théorème 5 assure une amélioration au moins pour les i_0 premières itérations, où i_0 n'est pas connu à l'avance.

Preuve. Développons

$$\|u - Z^{m+1}\|_{L^2}^2 = \|u - Z^m + Z^m - Z^{m+1}\|_{L^2}^2 \quad (2.57)$$

$$= \|u - Z^m\|_{L^2}^2 + \|Z^m - Z^{m+1}\|_{L^2}^2 + 2\mathbb{E}[(u - Z^m)(Z^m - Z^{m+1})] \quad (2.58)$$

$$= \|u - Z^m\|_{L^2}^2 + \|Z^m - Z^{m+1}\|_{L^2}^2 + 2\mathbb{E}[-(u - Z^m)Z^{m+1}] \quad (2.59)$$

$$= \|u - Z^m\|_{L^2}^2 + \|Z^m - Z^{m+1}\|_{L^2}^2 + 2\mathbb{E}[(Z^m - u)Z^{m+1}]. \quad (2.60)$$

En développant le deuxième terme :

$$\|u - Z^{m+1}\|_{L^2}^2 = \|u - Z^m\|_{L^2}^2 + \mathbb{E}[(Z^m)^2] + \mathbb{E}[(Z^{m+1})^2] - 2\mathbb{E}[uZ^{m+1}] \quad (2.61)$$

$$= \|u - Z^m\|_{L^2}^2 + \mathbb{E}[(Z^m)^2] - \mathbb{E}[(Z^{m+1})^2]. \quad (2.62)$$

Car $\mathbb{E}[uZ^{m+1}] = \mathbb{E}[(Z^{m+1})^2]$.

Étudions $\mathbb{E}[(Z^m)^2] - \mathbb{E}[(Z^{m+1})^2]$.

Tous d'abord :

$$\mathbb{E}[(Z^m)^2] = \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^m})^2. \quad (2.63)$$

Et

$$\mathbb{E}[(Z^{m+1})^2] = \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^{m+1}})^2 = (y_0^{Z^{m+1}})^2 + (y_1^{Z^{m+1}})^2 + \sum_{k=2}^P (y_k^{Z^{m+1}})^2. \quad (2.64)$$

Montrons que $y_0^{Z^{m+1}} = y_0^{Z^m}$. En effet, le polynôme ϕ_0^ω vaut 1 pour toute variable aléatoire ω . Ainsi,

$$y_0^{Z^m} = \mathbb{E}[u\phi_0^{Z^{m-1}}(Z^{m-1})] = \mathbb{E}[u] \quad (2.65)$$

$$y_0^{Z^{m+1}} = \mathbb{E}[u\phi_0^{Z^m}(Z^m)] = \mathbb{E}[u] \quad (2.66)$$

$$y_0^{Z^m} = y_0^{Z^{m+1}}. \quad (2.67)$$

Montrons que

$$y_1^{Z^{m+1}} = \sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{Z^m})^2}. \quad (2.68)$$

Par définition,

$$y_1^{Z^{m+1}} = \mathbb{E}[u\phi_1^{Z^m}(Z^m)]. \quad (2.69)$$

Exprimons à l'aide de la formule de Christoffel, le polynôme $\phi_1^{Z^m}(Z^m)$ avec :

$$s_0 = 1 \quad (2.70)$$

$$s_1 = y_0^{Z^m} \quad (2.71)$$

$$s_2 = \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^m})^2 \quad (2.72)$$

$$\phi_1^{Z^m}(Z^m) = \frac{1}{\sqrt{s_0 \begin{vmatrix} s_0 & s_1 \\ s_1 & s_2 \end{vmatrix}}} \begin{vmatrix} s_0 & s_1 \\ 1 & Z^m \end{vmatrix}. \quad (2.73)$$

En développant les déterminants, il vient

$$\phi_1^{Z^m}(Z^m) = \frac{Z^m - y_0^{Z^m}}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{Z^m})^2}}. \quad (2.74)$$

Revenons à la définition de $y_1^{Z^{m+1}}$:

$$y_1^{Z^{m+1}} = \mathbb{E} [u \phi_1^{Z^m}(Z^m)] \quad (2.75)$$

$$y_1^{Z^{m+1}} = \mathbb{E} \left[u \frac{Z^m - y_0^{Z^m}}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{Z^m})^2}} \right] \quad (2.76)$$

$$y_1^{Z^{m+1}} = \mathbb{E} \left[u \frac{\sum_{k=1}^P y_k^{Z^m} \phi_k^{Z^{m-1}}(Z^{m-1})}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{Z^m})^2}} \right] \quad (2.77)$$

$$y_1^{Z^{m+1}} = \frac{\sum_{k=1}^P (y_k^{Z^m})^2}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{Z^m})^2}} \quad (2.78)$$

$$y_1^{Z^{m+1}} = \sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{Z^m})^2}. \quad (2.79)$$

Ce qui prouve le résultat annoncé sur $y_1^{Z^{m+1}}$.

Par conséquent, en utilisant les relations (2.64), (2.67) et (2.79)

$$\mathbb{E} [(Z^{m+1})^2] = \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^m})^2 + \sum_{k=2}^P (y_k^{Z^{m+1}})^2 \quad (2.80)$$

$$\mathbb{E} [(Z^{m+1})^2] = \mathbb{E} [(Z^m)^2] + \sum_{k=2}^P (y_k^{Z^{m+1}})^2 \quad (2.81)$$

$$\text{Donc } \mathbb{E} [(Z^{m+1})^2] - \mathbb{E} [(Z^m)^2] = - \sum_{k=2}^P (y_k^{Z^{m+1}})^2 \leq 0. \quad (2.82)$$

En conclusion, en utilisant l'inégalité (2.62)

$$\|u - Z^{m+1}\|_{L^2}^2 = \|u - Z^m\|_{L^2}^2 - \sum_{k=2}^P (y_k^{Z^{m+1}})^2 \quad (2.83)$$

$$\|u - Z^{m+1}\|_{L^2} \leq \|u - Z^m\|_{L^2} \quad (2.84)$$

Ce qui termine la preuve. 

Du théorème 5 et du théorème de Cameron-Martin, nous en déduisons le théorème de convergence de i-gPC.

Théorème 6 *Si u est une fonction de $L^2(\Omega)$ alors l'approximation i-gPC converge en norme quadratique lorsque le degré polynomial tend vers l'infini :*

$$\|u - u_{i-gPC}^P\|_{L^2} \xrightarrow{P \rightarrow \infty} 0. \quad (2.85)$$

Preuve. Il s'agit d'une conséquence du théorème de Cameron-Martin et de l'inégalité 2.56. En effet, l'inégalité 2.56 nous dit que

$$\|u - u_{i-gPC}^P\|_{L^2} \leq \|u - u_{gPC}^P\|_{L^2}. \quad (2.86)$$

De plus, le théorème de Cameron-Martin assure la convergence du membre de droite vers 0 quand P tend vers $+\infty$.

Nous en déduisons la convergence du membre de gauche vers 0 quand P tend vers $+\infty$. Cela termine la preuve. 

Les théorèmes 5 et 6 sont valables quand le calcul des coefficients polynomiaux est exact, c'est-à-dire quand la précision de l'intégration est infinie. Dans le cas d'une précision d'intégration finie, il en va autrement. Afin de comprendre ce qui se passe à précision d'intégration finie, nous procédons à l'analyse numérique de l'algorithme i-gPC.

2.3.7 Analyse numérique de i-gPC

Dans cette sous section, qui a fait l'objet du papier [LBP13], nous reprenons le théorème 5 de la section précédente dans un contexte de précision finie de l'intégration, c'est-à-dire quand les coefficients polynomiaux sont calculés numériquement avec une précision finie et donc une erreur, ce qui correspond en fait à tous les cas pratiques rencontrés.

Cette analyse est essentielle dans la mesure où les problèmes aux moments peuvent se caractériser par une grande instabilité numérique, cf. [MP84] par exemple. Une petite

variation des moments peut déstabiliser i-gPC. Dans un premier temps notre code ne présentait pas la stabilisation que nous introduisons ici.

Nous commençons par la première étape de i-gPC, à savoir gPC.

La mise en œuvre de gPC nécessite l'utilisation d'une quadrature numérique³ $(\mathbf{X}_1, \omega_1), \dots, (\mathbf{X}_N, \omega_N)$ à N points afin d'intégrer numériquement l'intégrale analytique (2.5) donnant la valeur des coefficients polynomiaux y_k^X définis par la relation (2.3).

$$y_k^X \simeq y_k^{X,N} = \sum_{i=1}^N \omega_i u(\mathbf{X}_i) \phi_k^X(\mathbf{X}_i) \quad (2.87)$$

Les coefficients approchés $y_k^{X,N}$ sont ensuite utilisés pour construire l'approximation polynomiale.

$$u(\mathbf{X}) \simeq y_X^{P,N}(\mathbf{X}) = \sum_{k=0}^P y_k^{X,N} \phi_k^X(\mathbf{X}) \quad (2.88)$$

Chaque coefficient est entaché d'une erreur d'intégration qui se retrouve, avec l'erreur de troncature, dans l'erreur L^2 d'approximation.

$$(e_X^N)^2 = \|u(\mathbf{X}) - y_X^{P,N}(\mathbf{X})\|_{L^2}^2 = \underbrace{\sum_{k=0}^P (y_k^X - y_k^{X,N})^2}_{\text{erreur d'intégration}} + \underbrace{\sum_{k=P+1}^{+\infty} y_k^X}_{\text{erreur de troncature}} \quad (2.89)$$

Il s'agit de trouver le bon compromis erreur d'intégration *vs* erreur de troncature. Nous illustrons ce compromis par une analogie avec l'apprentissage statistique.

Remarque : À quadrature fixée, l'augmentation du degré polynomial P réduit l'erreur de troncature mais augmente l'erreur d'intégration des coefficients d'ordres élevés. Le choix du degré de troncature P s'effectue en théorie de sorte à réaliser le meilleur compromis entre l'erreur de troncature et l'erreur d'intégration. En pratique, il est très compliqué de trouver cet optimum. Nous proposons néanmoins une approche par validation croisée dans l'annexe D. •

Nous passons maintenant à la première itération de i-gPC.

Notons $Z_{P,N}^0 = y_X^{P,N}(\mathbf{X})$. Pour simplifier les écritures, nous noterons souvent Z_N^0 au lieu de $Z_{P,N}^0$. À ce point de l'algorithme, le but est de construire la base polynomiale $(\phi_k^{Z_N^0})$ qui est adaptée à la mesure $\mathbb{P}^{Z_N^0}$ c'est-à-dire vérifiant la relation suivante : $\forall (k, l) \in \mathbb{N}^2$

$$\mathbb{E} \left[\phi_k^{Z_N^0}(Z_N^0) \phi_l^{Z_N^0}(Z_N^0) \right] = \int \phi_k^{Z_N^0}(z) \phi_l^{Z_N^0}(z) d\mathbb{P}^{Z_N^0}(z) = \delta_{k,l}. \quad (2.90)$$

3. dans le cas où les coefficients polynomiaux sont calculés par intégration et non par régression quadratique. Nous ne plaçons pas dans le contexte de la régression mais i-gPC pourrait être utilisé dans ce contexte.

Ce point est un point clé de i-gPC. L'existence de la base $(\phi_k^Z)_{k \in \mathbb{N}}$ à partir de ses moments est évidente car les moments sont calculés à partir de Z . Il n'en est pas de même pour la base $(\phi_k^{Z_N^0})_{k \in \{0, \dots, P\}}$ dont la construction dépend du calcul des moments s_i^Z ,

$$s_i^Z = \mathbb{E} [Z^i] = \int x^i d\mathbb{P}^Z(x) \simeq s_i^{Z_N^0} \simeq \sum_{l=1}^N \omega_l \left(y_X^{P,N}(X_l) \right)^i \quad (2.91)$$

pour $i \in \{1, \dots, 2P + 1\}$.

Ce problème est extrêmement sensible à la précision du calcul des moments $(s_i^{Z_N^0})$ pour $i \in \{1, \dots, 2P + 1\}$ et il est indispensable de vérifier la réalisabilité des moments, c'est-à-dire l'existence de la base polynomiale connaissant les moments. Il se peut en effet qu'étant données les erreurs numériques sur les moments, aucune variable aléatoire ne corresponde aux moments calculés. Dans un premier temps, nous supposons la réalisabilité de ces moments puis reviendrons sur cette hypothèse en introduisant une méthode la vérifier en court d'algorithme.

Hypothèse 1 (Réalisabilité des moments statistiques) *Nous supposons la réalisabilité des moments statistiques ce qui implique l'existence de la base $(\phi_k^{Z_N^0})_{k \in \{1, \dots, P\}}$ sous la contrainte des moments statistiques $s_i^{Z_N^0}$ pour $i \in \{1, \dots, 2P + 1\}$.*

Nous montrerons par la suite comment vérifier numériquement cette hypothèse.

En supposant la réalisabilité des moments, une deuxième approximation Z_N^1 est calculée.

$$Z_N^1 = \sum_{k=0}^P y_k^{Z_N^1} \phi_k^{Z_N^0}(Z_N^0) \quad (2.92)$$

$$y_k^{Z_N^1} = \mathbb{E} \left[u(X) \phi_k^{Z_N^0}(Z_N^0(X)) \right] \quad (2.93)$$

$$y_k^{Z_N^1} \simeq \sum_{i=1}^N u(X_i) \phi_k^{Z_N^0}(Z_N^0(X_i)) \quad (2.94)$$

Nous définissons les erreurs d'approximation L^2 e^0 de la première approximation et e^1 de la deuxième, et les erreurs d'intégration e_1^0 et e_1^1 .

$$e_1^0 = \sum_{k=0}^P \left(y_k^{X,N} - y_k^X \right)^2 \quad (2.95)$$

$$e_1^1 = \sum_{k=0}^P \left(y_k^{Z^0,N} - y_k^{Z^0} \right)^2 \quad (2.96)$$

$$e^0 = \|u - y_X^{P,N}\|_{L^2} \quad (2.97)$$

$$e^1 = \|u - y_{Z^0}^{P,N}\|_{L^2} \quad (2.98)$$

Théorème 7 Avec les notations précédentes et dans un contexte intégration finie,

$$(e^1)^2 - (e^0)^2 = (e_1^1)^2 - (e_1^0)^2 - \sum_{k=2}^P (y_k^{Z^0})^2. \quad (2.99)$$

Démonstration. On note $F = F_X^{-1} \circ F_{Z_N^0}$. L'erreur en norme $L^2(\Omega)$ dans la base $(\phi_k^{Z_N^0})_{k \in \mathbb{N}}$ est définie par :

$$(e_{Z_N^0}^N)^2 = \|u(F(Z_N^0)) - y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0)\|_{L^2}^2 = \mathbb{E} \left[\left(u(F(Z_N^0)) - y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0) \right)^2 \right], \quad (2.100)$$

ce qui est équivalent à,

$$(e_{Z_N^0}^N)^2 = \mathbb{E} \left[\left(u(F(Z_N^0)) - y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) + y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) - y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0) \right)^2 \right]. \quad (2.101)$$

Développons le terme quadratique dans l'expression précédente (2.101) :

$$\begin{aligned} (e_{Z_N^0}^N)^2 &= \mathbb{E} \left[\underbrace{\left(u(X) - y_X^{P,N}(X) \right)^2}_{(e_X^N)^2} \right] + \mathbb{E} \left[\underbrace{\left(y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) - y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0) \right)^2}_{\Delta_1^N} \right] \\ &\quad + 2 \mathbb{E} \left[\underbrace{\left(y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) - y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0) \right) \left(u(F(Z_N^0)) - y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) \right)}_{\Delta_2^N} \right]. \end{aligned} \quad (2.102)$$

$$(e_X^N)^2 = \mathbb{E} \left[\left(u(X) - y_X^{P,N}(X) \right)^2 \right] \quad (2.103)$$

Notons Δ_2^N le terme croisé de (2.102) et en développant le produit il vient :

$$\begin{aligned} \Delta_2^N &= \underbrace{2 \mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) u(F(Z_N^0)) \right) \right]}_{e_1^N} + \underbrace{2 \mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0) \right) \right]}_{e_2^N} \\ &\quad - \underbrace{2 \mathbb{E} \left[\left(y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0) u(F(Z_N^0)) \right) \right]}_{e_3^N} - \underbrace{2 \mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) \right)^2 \right]}_{e_4^N}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Étudions chaque terme dans (2.104). Pour e_1^N et e_4^N , nous avons :

$$e_1^N = 2 \mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) u(F(Z_N^0)) \right) \right] \quad (2.105)$$

$$e_1^N = 2 \sum_{k=0}^P y_k^{X,N} \mathbb{E} \left[\left(\phi_k^X(X) u(X) \right) \right] \quad (2.106)$$

$$e_1^N = 2 \sum_{k=0}^P y_k^X y_k^{X,N} \quad (2.107)$$

$$e_4^N = 2 \mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(X) \right)^2 \right] \quad (2.108)$$

$$e_4^N = 2 \sum_{k=0}^P (y_k^{X,N})^2. \quad (2.109)$$

Pour e_2^N et e_3^N , nous avons par définition de $Z_N^0 = y_X^{P,N}(F(Z_N^0))$ et $(y_k^{Z_N^0,N})_{k \in \{0, \dots, P\}}$

$$e_2^N = 2\mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(F(Z_N^0)) y_{Z_N^0}^{P,N}(Z_N^0) \right) \right], \quad (2.110)$$

$$= 2\mathbb{E} \left[Z \left(\sum_{k=0}^P y_k^Z \phi_k^Z(Z) \right) \right] \quad (2.111)$$

$$e_3^N = 2\mathbb{E} \left[\left(y_{Z_N^0}^{P,N}(Z^N) u(F(Z^N)) \right) \right] \quad (2.112)$$

$$e_3^N = 2 \sum_{k=0}^P y_k^{Z_N^0,N} y_k^{Z_N^0,N}. \quad (2.113)$$

En injectant $\Delta_1^N = \frac{e_4^N}{2} + \sum_{k=0}^P (y_k^{Z_N^0,N})^2 - e_2^N$ et Δ_2^N dans $(e_{Z_N^0}^N)^2$, il vient

$$\begin{aligned} \Delta_1^N &= \mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(F(Z^N)) - y_{Z^N}^{P,N}(Z^N) \right)^2 \right], \\ &= \mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(X) \right)^2 \right] + \mathbb{E} \left[\left(y_{Z^N}^{P,N}(Z^N) \right)^2 \right], \\ &\quad - 2\mathbb{E} \left[\left(y_X^{P,N}(F(Z^N)) y_{Z^N}^{P,N}(Z^N) \right) \right], \\ &= \sum_{k=0}^P (y_k^{X,N})^2 + \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^N,N})^2 - e_2^N, \\ \Delta_1^N &= \frac{e_4^N}{2} + \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^N,N})^2 - e_2^N. \end{aligned} \quad (2.114)$$

$$\begin{aligned} (e_{Z_N^0}^N)^2 &= (e_X^N)^2 + \Delta_1^N + \Delta_2^N \\ &= (e_X^N)^2 + e_1^N + e_2^N - e_3^N - e_4^N + \frac{e_4^N}{2} + \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^N,N})^2 - e_2^N \\ &= (e_X^N)^2 + e_1^N - e_3^N - \frac{e_4^N}{2} + \sum_{k=0}^P (y_k^{Z^N,N})^2 \\ (e_{Z_N^0}^N)^2 &= (e_X^N)^2 + 2 \left(\sum_{k=0}^P y_k^X y_k^{X,N} - \sum_{k=0}^P y_k^{Z_N^0,N} y_k^{Z_N^0,N} \right) \\ &\quad - \sum_{k=0}^P (y_k^{X,N})^2 + \sum_{k=0}^P (y_k^{Z_N^0,N})^2. \end{aligned} \quad (2.115)$$

À partir des premiers moments statistiques $(s_i^{Z_N^0})_{i \in \{0,1,2\}}$ et $(s_i^{Z_N^0,N})_{i \in \{0,1,2\}}$, il vient

$$\left\{ \begin{array}{l} s_0^{Z_N^0} = 1, \\ s_1^{Z_N^0} = y_0^X, \\ s_2^{Z_N^0} = \sum_{k=0}^P (y_k^X)^2 \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} s_0^{Z_N^0,N} = 1, \\ s_1^{Z_N^0,N} = y_0^{X,N}, \\ s_2^{Z_N^0,N} = \sum_{k=0}^P (y_k^{X,N})^2. \end{array} \right. \quad (2.116)$$

De plus, les deux premières composantes de la nouvelle base gPC sont donnée par

$$\begin{aligned}
\phi_0^{Z_N^0}(x) &= 1, \\
\phi_1^{Z_N^0}(x) &= \frac{1}{\sqrt{\begin{vmatrix} s_0^{Z_N^0, N} & s_0^{Z_N^0} & s_1^{Z_N^0} \\ s_1^{Z_N^0, N} & s_1^{Z_N^0} & s_2^{Z_N^0} \end{vmatrix}}} \begin{vmatrix} s_0^{Z_N^0} & s_1^{Z_N^0} \\ 1 & x \end{vmatrix}, \\
\phi_1^{Z_N^0}(x) &= \frac{1}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{X, N})^2}} (x - y_0^{X, N}).
\end{aligned} \tag{2.117}$$

Utilisons le fait que $y_0^{X, N} = y_0^{Z_N^0, N}$ et $y_0^X = y_0^{Z_N^0}$ afin que

$$\begin{aligned}
(e_{Z_N^0}^N)^2 &= (e_X^N)^2 + 2 \sum_{k=1}^P y_k^X y_k^{X, N} - 2 \sum_{k=1}^P y_k^{Z_N^0} y_k^{Z_N^0, N} \\
&\quad - \sum_{k=1}^P (y_k^{X, N})^2 + \sum_{k=1}^P (y_k^{Z_N^0, N})^2.
\end{aligned} \tag{2.118}$$

Étudions $y_1^{Z_N^0, N}$ de la nouvelle base gPC : par définition nous avons

$$\begin{aligned}
y_1^{Z_N^0} &= \mathbb{E} \left[u(X) \phi_1^{Z_N^0} \left(\sum_{k=0}^P y_k^{X, N} \phi_k^X(X) \right) \right], \\
y_1^{Z_N^0, N} &= \sum_{j=1}^N w_j u(X_j) \phi_1^{Z_N^0} \left(\sum_{k=0}^P y_k^{X, N} \phi_k^X(X_j) \right),
\end{aligned} \tag{2.119}$$

approché par intégration numérique, par

$$y_1^{Z_N^0, N} = \sum_{j=1}^N w_j u(X_j) \phi_1^{Z_N^0} \left(\sum_{k=0}^P y_k^{X, N} \phi_k^X(X_j) \right). \tag{2.120}$$

En remplaçant $\phi_1^{Z_N^0}$ par son expression dans (2.119) et (2.120), il vient

$$y_1^{Z_N^0} = \mathbb{E} \left[u(X) \frac{\sum_{k=1}^P y_k^{X, N} \phi_k^X(X)}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{X, N})^2}} \right] = \frac{\sum_{k=1}^P y_k^{X, N} y_k^X}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{X, N})^2}}, \tag{2.121}$$

$$\text{et } y_1^{Z_N^0, N} = \sum_{j=1}^N w_j u(X_j) \frac{\sum_{k=1}^P y_k^{X, N} \phi_k^X(X_j)}{\sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{X, N})^2}} = \sqrt{\sum_{k=1}^P (y_k^{X, N})^2}. \tag{2.122}$$

Revenons à (2.118) utilisant (2.121)

$$(e_{Z_N^0}^N)^2 = (e_X^N)^2 - 2 \sum_{k=2}^P y_k^{Z_N^0} y_k^{Z_N^0, N} + \sum_{k=2}^P (y_k^{Z_N^0, N})^2. \tag{2.123}$$

De plus, l'erreur de projection par rapport à Z_N^0 , dénotée $(e_p^{Z_N^0, N})^2$ est donnée par

$$(e_p^{Z_N^0, N})^2 = \sum_{k=0}^P (y_k^{Z_N^0, N})^2 + \sum_{k=0}^P (y_k^{Z_N^0})^2 - 2 \sum_{k=0}^P y_k^{Z_N^0} y_k^{Z_N^0, N}. \quad (2.124)$$

De sorte que (2.123) devienne

$$\begin{aligned} (e_{Z_0^N}^N)^2 &= (e_X^N)^2 + (e_p^{Z_N^0, N})^2 - (y_0^{Z_N^0, N})^2 - (y_1^{Z_N^0, N})^2 \\ &\quad - \sum_{k=0}^P (y_k^{Z_N^0})^2 + 2 \sum_{k=0}^P u_k^X u_k^{X, N}, \end{aligned} \quad (2.125)$$

Et introduisant l'erreur de projection sur la première base,

$$\begin{aligned} (e_p^{X, N})^2 &= \sum_{k=0}^P (u_k^X - u_k^{X, N})^2 = \sum_{k=0}^P (y_k^{X, N})^2 \\ &\quad + \sum_{k=0}^P (y_k^X)^2 - 2 \sum_{k=0}^P y_k^X y_k^{X, N}, \end{aligned} \quad (2.126)$$

assurant que

$$(e_{Z_0^N}^N)^2 = (e_X^N)^2 + (e_p^{Z_N^0, N})^2 - (e_p^{X, N})^2 - \sum_{k=2}^P (y_k^{Z_N^0})^2, \quad (2.127)$$

Ce qui termine la preuve. 

Donc, cette itération apporte un gain à la condition suivante :

$$(e_1^1)^2 - (e_1^0)^2 + \sum_{k=2}^P (y_k^{Z_0^0})^2 \leq 0. \quad (2.128)$$

À noter que si l'intégration est exacte, nous retrouvons le résultat de la section précédente, puisque e_1^0 et e_1^1 sont nuls et donc chaque itération apporte un gain.

2.3.8 Critère d'arrêt de i-gPC

Au cours de l'algorithme i-gPC, le passage de la variable aléatoire connaissant ses moments statistiques à la base polynomiale orthonormale par rapport à sa mesure de probabilité constitue un problème aux moments. Cette classe de problèmes se caractérise par une grande instabilité numérique. Nous introduisons dans cette section les théorèmes assurant l'existence d'une solution à un problème aux moments ainsi qu'un critère numérique pour le vérifier.

Existence de solution d'un problème aux moments

En général, un problème aux moments se pose de la façon suivante.

Problème 1 (Problème aux moments tronqué) *Trouver la densité de probabilité $f(x)$ connaissant ses $N + 1$ premiers moments statistiques (μ_0, \dots, μ_N) .*

Il existe la version analogue non tronquée, qui se pose théoriquement mais pas dans la pratique car on n'a jamais accès à une infinité de moments.

Problème 2 (Problème aux moments non tronqué) *Trouver la densité de probabilité $f(x)$ connaissant ses moments μ_n pour tout $n \in \mathbb{N}$.*

Nous nous restreignons, ici, à l'étude de variables aléatoires à valeurs dans un intervalle $[a; b]$ et aux problèmes aux moments associés. Ceci reste raisonnable dans les applications physiques que nous traitons (par définition, aucune application physique ne peut avoir l'infini pour résultat ou alors le modèle est par définition mal posé). Étant donné que tout intervalle $[a; b]$ peut être réduit à l'intervalle $[0; 1]$ par une simple transformation linéaire, nous traiterons, sans perte de généralité, des variables aléatoires à valeurs dans $[0; 1]$ et les problèmes aux moments associés. Nous pouvons nous permettre cette restriction dans la mesure où les variables aléatoires *physiques* que nous traitons sont toujours à support borné. Nous n'aborderons pas les autres types de problèmes aux moments (Hamburger, etc.). Dans la littérature, les problèmes aux moments sur supports bornés sont qualifiés de problème aux moments de Hausdorff et sont posés de la façon suivante.

Problème 3 (Problème aux moments de Hausdorff tronqué) *Trouver la densité de probabilité $f(x)$ connaissant ses $N + 1$ premiers moments (μ_0, \dots, μ_N) .*

De nouveau, il existe la version analogue non tronquée, qui se pose théoriquement mais pas dans la pratique car on n'a jamais accès à une infinité de moments.

Problème 4 (Problème aux moments de Hausdorff non tronqué) *Trouver la densité de probabilité $f(x)$ connaissant ses moments μ_n pour tout $n \in \mathbb{N}$.*

Face à ces problèmes de Hausdorff, la question qui se pose en premier lieu concerne l'existence d'une solution et si oui est-elle unique. On trouve dans la littérature mathématique [KS51] des conditions portant sur la séquence des moments $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}}$ pour le problème non tronqué et sur (μ_0, \dots, μ_N) pour le problème tronqué.

Concernant l'existence d'une solution au problème aux moments de Hausdorff non tronqué, c'est à dire connaissant une infinité de moments.

Théorème 8 *Connaissant μ_n pour tout $n \in \mathbb{N}$, le problème aux moments de Hausdorff*

admet une solution si et seulement si

$$\forall (k, n) \in \mathbb{N}^2, \sum_{i=0}^k (-1)^k \binom{k}{i} \mu_{i+n} \geq 0. \quad (2.129)$$

De plus, s'il existe une solution, elle est unique.

Ce théorème, aussi pertinent soit-il sur le plan théorique, ne présente pas d'intérêt pratique dans la mesure où il implique une infinité de moments statistiques et que en général, seulement un nombre fini de moments sont connus. Le théorème suivant portant sur la positivité des déterminants de Hankel introduit les conditions pour que le problème de Hausdorff tronqué admette une solution. Afin de caractériser l'existence de solution du problème de Hausdorff tronqué, commençons par définir les déterminants de Hankel.

Définition 4 (Déterminant de Hankel, cf. [KS51]) *Les déterminants de Hankel sont définis par :*

$$\underline{H}_{2m} = \begin{vmatrix} \mu_0 & \cdots & \mu_m \\ \vdots & & \vdots \\ \mu_m & \cdots & \mu_{2m} \end{vmatrix} \quad (2.130)$$

$$\underline{H}_{2m+1} = \begin{vmatrix} \mu_1 & \cdots & \mu_{m+1} \\ \vdots & & \vdots \\ \mu_{m+1} & \cdots & \mu_{2m+1} \end{vmatrix} \quad (2.131)$$

$$\overline{H}_{2m} = \begin{vmatrix} \mu_1 - \mu_2 & \cdots & \mu_m - \mu_{m+1} \\ \vdots & & \vdots \\ \mu_m - \mu_{m+1} & \cdots & \mu_{2m-1} - \mu_{2m} \end{vmatrix} \quad (2.132)$$

$$\overline{H}_{2m+1} = \begin{vmatrix} \mu_0 - \mu_1 & \cdots & \mu_m - \mu_{m+1} \\ \vdots & & \vdots \\ \mu_m - \mu_{m+1} & \cdots & \mu_{2m} - \mu_{2m+1} \end{vmatrix}. \quad (2.133)$$

Remarque : À noter que nous avons deux définitions pour les déterminants de Hankel associés aux moments statistiques d'une distribution :

- la définition 2 tirée de [Gau04] semble très utilisée dans les ouvrages traitant de l'existence d'une base polynomiale orthogonale par rapport à une distribution donnée.
- La définition 4 est plus communément répandues dans les écrits concernant les moments (cf. par exemple [KS51, AG02]).

Nous n'avons jamais vu les deux définitions côte-à-côte dans le même ouvrage mais nous souhaitons ici mettre en évidence le fait que selon la définition, les hypothèses dans les théorèmes présetés dans cette thèse peuvent différer. •

Les déterminants de Hankel étant définis, nous pouvons énoncer le théorème suivant.

- Théorème 9** 1. Le problème de Hausdorff défini par les $N + 1$ moments (μ_0, \dots, μ_N) possède une solution si et seulement si pour tout n dans $\{1, \dots, N\}$, \underline{H}_n et \overline{H}_n sont positifs ou nuls.
2. De plus, si les déterminants de Hankel \underline{H}_n et \overline{H}_n sont strictement positifs pour tout n dans $\{1, \dots, N\}$, alors le problème possède une infinité de solutions.
3. Enfin, s'il existe k tel que $1 < k < N$ tel que \underline{H}_l et \overline{H}_l sont strictement positifs pour tout l dans $\{1, \dots, k - 1\}$ et tel que $\underline{H}_k = 0$ ou $\overline{H}_k = 0$, alors, il existe une unique solution, la solution est déterminée par les moments (μ_0, \dots, μ_k) , et les déterminants \underline{H}_l et \overline{H}_l sont nuls pour tout l dans $\{k, \dots, N\}$

Nous nous basons sur ce théorème 9 pour introduire un critère de sortie de l'algorithme i-gPC.

Critère d'arrêt de l'algorithme i-gPC

Au cours d'une itération de i-gPC, nous résolvons le problème aux moments de Hausdorff tronqué défini par les moments (μ_1, \dots, μ_{2P}) en déterminant une base polynomiale orthonormale de degré P par rapport à une variable aléatoire ayant pour moments statistiques (μ_1, \dots, μ_{2P}) . Trois cas de figure sont à considérer :

1. Si la condition 1 du théorème 9 n'est pas vérifiée, alors, le problème aux moments à résoudre ne présente pas de solution. L'algorithme i-gPC s'arrête.
2. Si nous sommes dans le cas de la condition 2 du théorème 9, alors, il existe une solution au problème et i-gPC se poursuit.
3. Si nous sommes dans le cas de la condition 3 du théorème 9, alors, il existe une solution au problème, mais celle-ci ne dépend que des k premiers moments. Nous éliminons les suivants qui pourraient introduire une instabilité numérique, et nous trouvons la base polynomiale adaptée à ces k moments (μ_1, \dots, μ_k) . Cependant, nous devons modifier le degré de la base polynomiale car, avec k moments, le degré maximal des polynômes de la base est $\lfloor \frac{k}{2} \rfloor$ (formule de Christoffel). Puis l'algorithme se poursuit en ayant modifié le degré de troncature polynomial.

Ainsi, il s'agit non seulement d'un critère de sortie de l'algorithme itératif i-gPC, mais également d'un critère de modification du degré de troncature polynomial lors de chacune des itérations. En terme de stabilité numérique de i-gPC, ceci n'est pas anecdotique, comme nous le verrons dans la section 2.3.7.

2.3.9 Exemple d'applications numériques

Dans cette sous section, nous illustrons le comportement de i-gPC sur des cas test continus et discontinus en dimension stochastique un et deux. Cependant, afin de couvrir la plus large diversité de situations possibles, nous présentons deux cas discontinus issus de la

dynamique des fluides et un cas continu. Ce cas continu illustre le fait que si i-gPC se comporte très bien sur les cas discontinus, il se comporte également au moins aussi bien que gPC dans ces situations grâce à l'introduction du critère d'arrêt. Nous montrons sur le cas « Legendre » ce qui pouvait se produire avant l'introduction du critère d'arrêt.

Nous nous plaçons dans une situation réaliste concernant le nombre de points d'intégration, c'est-à-dire le nombre d'appels au modèle. Nous prenons une quadrature de Gauss-Legendre comprenant 32 points.

Nous étudions dans les trois situations suivantes l'évolution de l'approximation de i-gPC au cours des itérations de l'algorithme, la précision en norme L^1 et en norme L^2 , la troncature polynomiale opérée automatiquement par i-gPC.

Choc Le modèle à approcher est :

$$u(x) = \mathbb{I}\{x \leq -0.5\}, \quad (2.134)$$

où x suit une loi uniforme sur $[-1, 1]$.

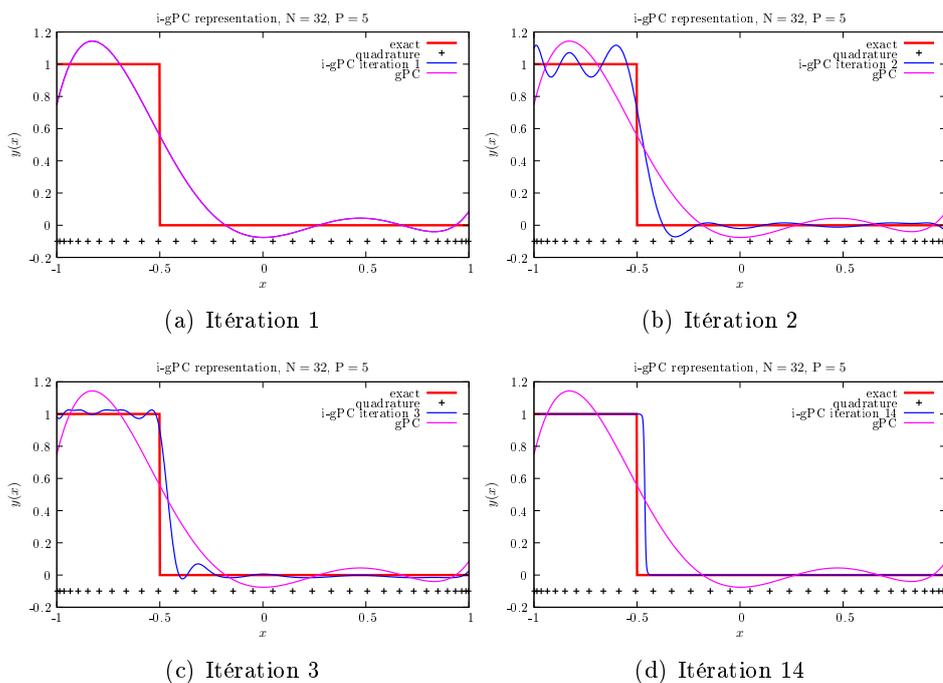


FIGURE 2.21 – Approximation i-gPC du cas choc au cours des itérations 1, 2, 3 et 14. On voit la discontinuité de mieux en mieux captée et les oscillations se réduire.

Les figures 2.21 présentent les approximations i-gPC aux itérations 1, 2, 3 et 14. On voit se réduire les oscillations et les deux plateaux mieux captés par i-gPC. La figure 2.22

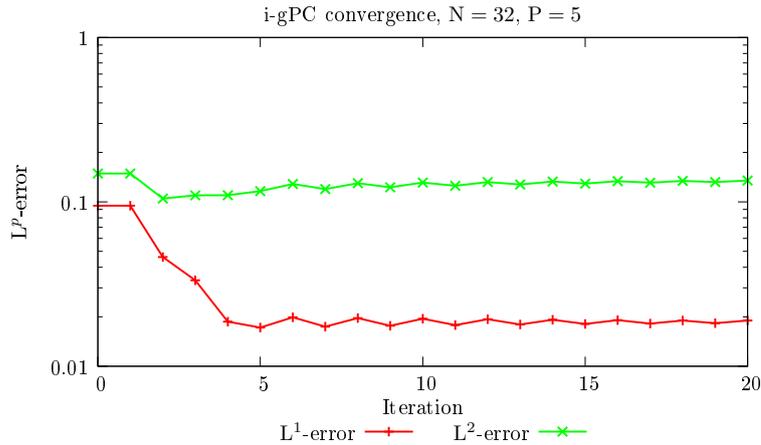


FIGURE 2.22 – Convergence L^1 et L^2 de l’approximation i-gPC du cas choc. i-gPC permet un gain en norme L^1 ainsi qu’en norme L^2 . Le gain est nettement plus conséquent en norme L^1 .

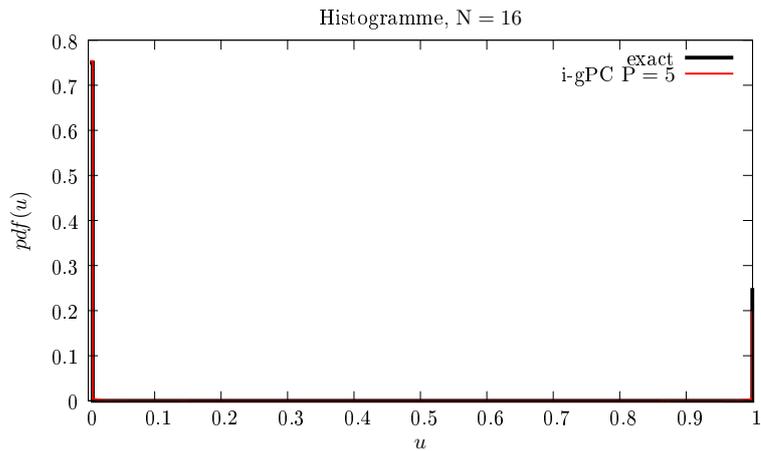


FIGURE 2.23 – Histogramme i-gPC du cas choc, $P = 5$, 16 itérations, quadrature de Gauss-Legendre à 16 points.

montre la convergence de i-gPC pour $P = 5$ au cours des itérations en norme L^1 et L^2 . On constate que le gain est bien plus remarquable en norme L^1 . Comme le montre la figure 2.23, le gain est également significatif pour les lois de probabilité : i-gPC permet de retrouver les deux Dirac. On représente, par ailleurs, sur la figure 2.24, l’évolution du degré de troncature polynomial au cours de l’algorithme i-gPC sur le cas choc lorsque l’on fait appel au critère d’arrêt à chaque itération : celui est activé dès l’itération deux pour limiter l’ordre de troncature de manière à avoir un problème aux moments bien posé.

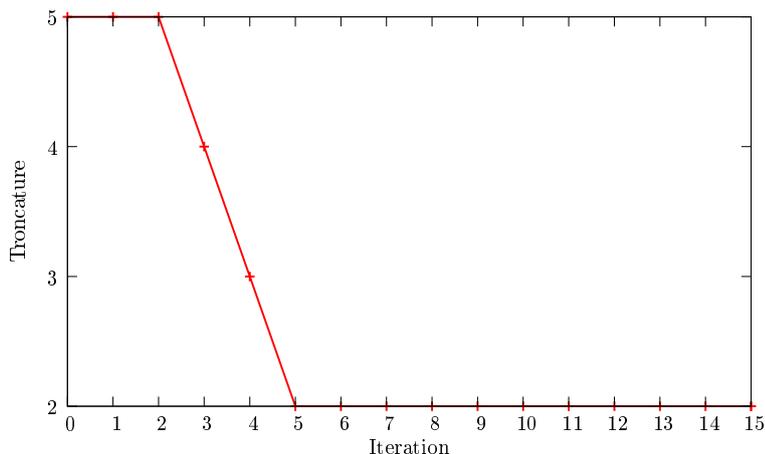


FIGURE 2.24 – Évolution du degré de troncature i-gPC du cas choc, $P = 5$, 16 itérations, quadrature de Gauss-Legendre à 16 points. L’algorithme i-gPC limite le degré de troncature lorsque la précision d’intégration n’est pas suffisante.

Sur ce cas test discontinu le plus basique possible, on constate que i-gPC se comporte très bien. On observe une accélération de la convergence en normes L^1 et L^2 avec un gain bien plus important en norme L^1 . De plus, les oscillations autour de la discontinuité ont été gommées par i-gPC.

Bichoc Le modèle à approcher est :

$$u(x) = 2 \mathbb{I}\{x \leq -0.5\} + \mathbb{I}\{-0.5 < x \leq 0.5\}, \quad (2.135)$$

où x suit une loi uniforme sur $[-1, 1]$.

Les figures 2.25 montrent les approximations i-gPC sur cette double discontinuité aux itérations 1, 2, 3 et 9. Comme pour la simple discontinuité précédente, on remarque l’atténuation des oscillations avec les itérations. La figure 2.26 montre le gain permis par l’utilisation de i-gPC, aussi bien en norme L^1 qu’en norme L^2 , bien qu’il soit plus important en norme L^1 .

Legendre Le modèle à approcher est :

$$u(x) = \phi_0^L(x) + \phi_3^L(x) + \phi_{10}^L(x), \quad (2.136)$$

où x suit une loi uniforme sur $[-1, 1]$ et où les ϕ_k^L désignent les polynômes de Legendre, c’est-à-dire adaptés à la mesure uniforme sur $[-1; 1]$. Ce modèle contient donc un nombre fini de modes dans son développement gPC.

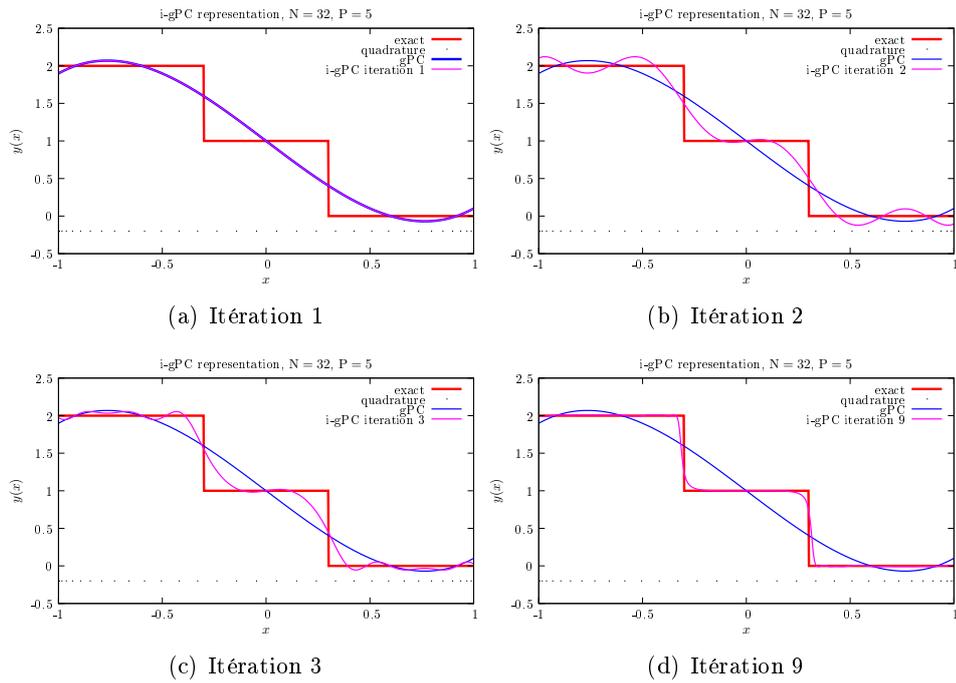


FIGURE 2.25 – Approximation i-gPC du cas bichoc pour différentes itérations (1,2,3 et 9). Les deux discontinuités sont de mieux en mieux captées et les oscillation se réduisent.

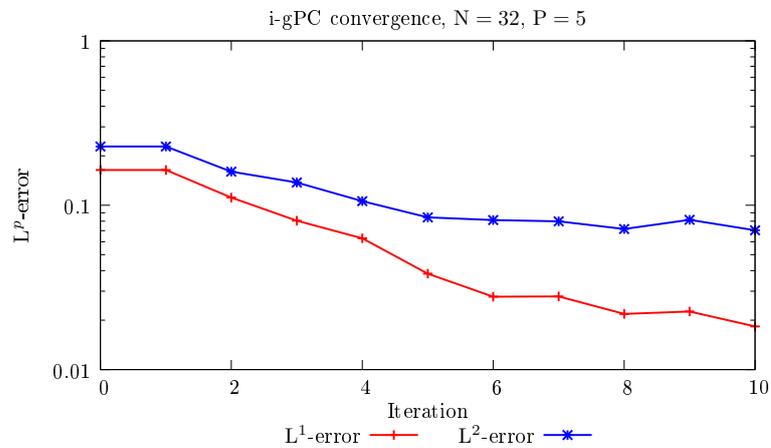


FIGURE 2.26 – Convergence en norme L^2 de l'approximation i-gPC au cours des itérations du cas bichoc

La figure 2.29 montre le gain minime en normes, L^1 et L^2 , de i-gPC sur le cas Legendre à la première itération puis la stagnation aux itérations suivantes. Sur les figures 2.28, on

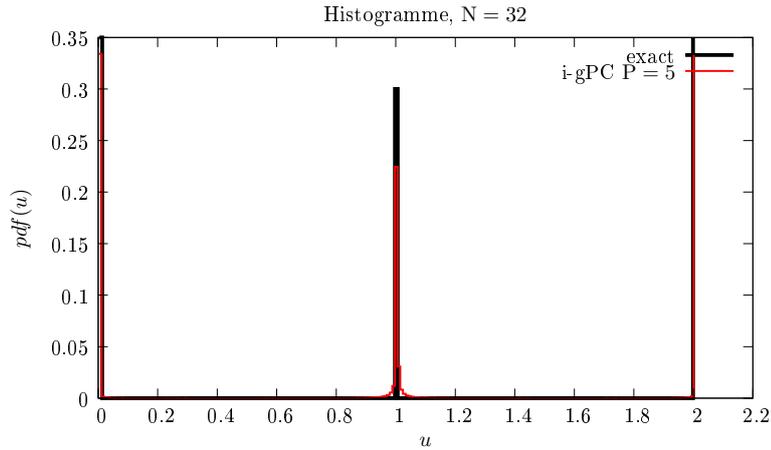


FIGURE 2.27 – Histogramme i-gPC du cas bichoc, $P = 5$, 16 itérations, quadrature de Gauss-Legendre à 16 points. i-gPC saisi correctement les trois paliers.

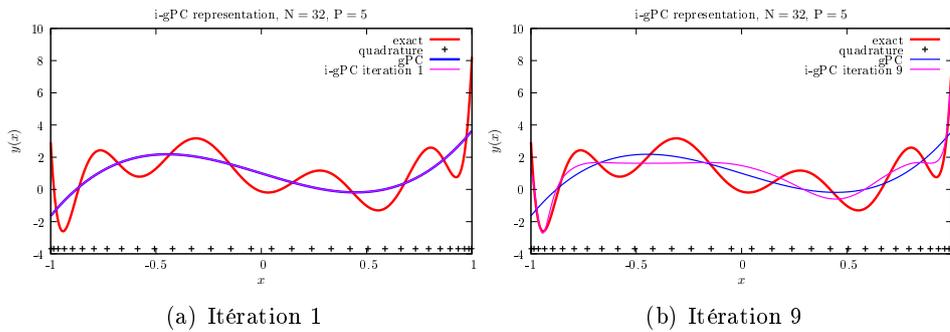


FIGURE 2.28 – Approximation i-gPC du cas Legendre

peut visualiser ce gain, en particulier aux bords du domaine. Ce cas illustre les limites de i-gPC dans certains cas, principalement continus. Cependant, on retient que i-gPC ne dégrade pas la précision de l'approximation dans tous les cas. Ainsi, étant donné que le coût numérique de i-gPC est nul devant le coût de résolution du modèle u , autant utiliser i-gPC à la place de gPC. Au mieux on gagne et au pire on ne perd rien.

Nous souhaitons illustrer ce qui peut se passer sans l'introduction du critère d'arrêt. Nous utilisons 16 points de quadrature de Gauss-Legendre et $P = 5$. Pour cela, nous présentons dans la figure 2.30 les approximations successives de i-gPC au cours des itérations sans critère d'arrêt et de limitation du degré polynomial. On remarque l'explosion de l'algorithme avec certains points d'approximation partant à l'infini. Ceci est confirmé par la figure 2.31 montrant la divergence des normes L^1 et L^2 . En comparant les convergences des figures 2.31 et 2.32 réalisées exactement dans les mêmes conditions mise à part le

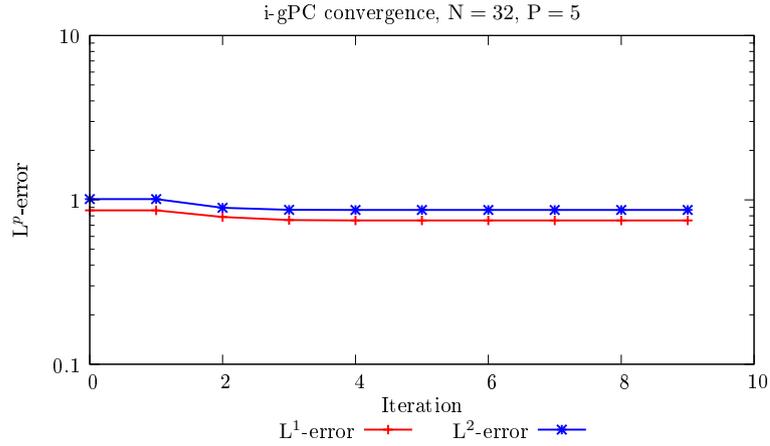


FIGURE 2.29 – Convergence L^1 et L^2 de l’approximation i-gPC du cas Legendre

critère d’arrêt, on comprend la pertinence du critère introduit.

Différentes loi de probabilité en entrée Nous reprenons ici l’exemple de la section 2.2.4 en ajoutant l’utilisation de i-gPC.

Sur la figure 2.33 la courbe numéro 2 (magenta) correspond à une loi de probabilité concentrant toute la masse autour de 0. Cela implique une grande précision au niveau de la discontinuité et une moins grande aux bords. Ces trois exemples illustrent le fait que l’on peut appliquer i-gPC pour n’importe quelle loi de probabilité en entrée. Les oscillations sont dans les trois cas éliminées, la discontinuité bien captée et l’erreur quadratique est réduite par rapport à celle faite par gPC.

i	$y_i^{\text{gPC}}(X_i)$	$y_i^{\text{i-gPC}}(X_i)$	$y_1^{\text{i-gPC}}(X_i)$
1	0.0093	0.0015	–
2	0.0066	0.0007	0.0010
3	0.0395	0.0026	0.012

TABLE 2.3 – Erreur quadratique de y_i dans l’espace stochastique associé à X_i pour gPC et i-gPC et différentes lois de probabilité en entrée. Il y a un gain de 6 à 15 en norme L^2 grâce à i-gPC. On calcule aussi l’erreur en norme L^2 de $y_1^{\text{i-gPC}}$ dans les espaces stochastiques associés à X_2 et X_3 .

Le tableau 2.3 résume le gain apporté par i-gPC par rapport à gPC. On gagne un facteur de 6 à 15 sur l’erreur L^2 . On calcule aussi pour le modèle i-gPC $y_1^{\text{i-gPC}}$ construit comme si la loi de l’entrée était une uniforme, l’erreur L^2 dans l’espace stochastique associé à X_2

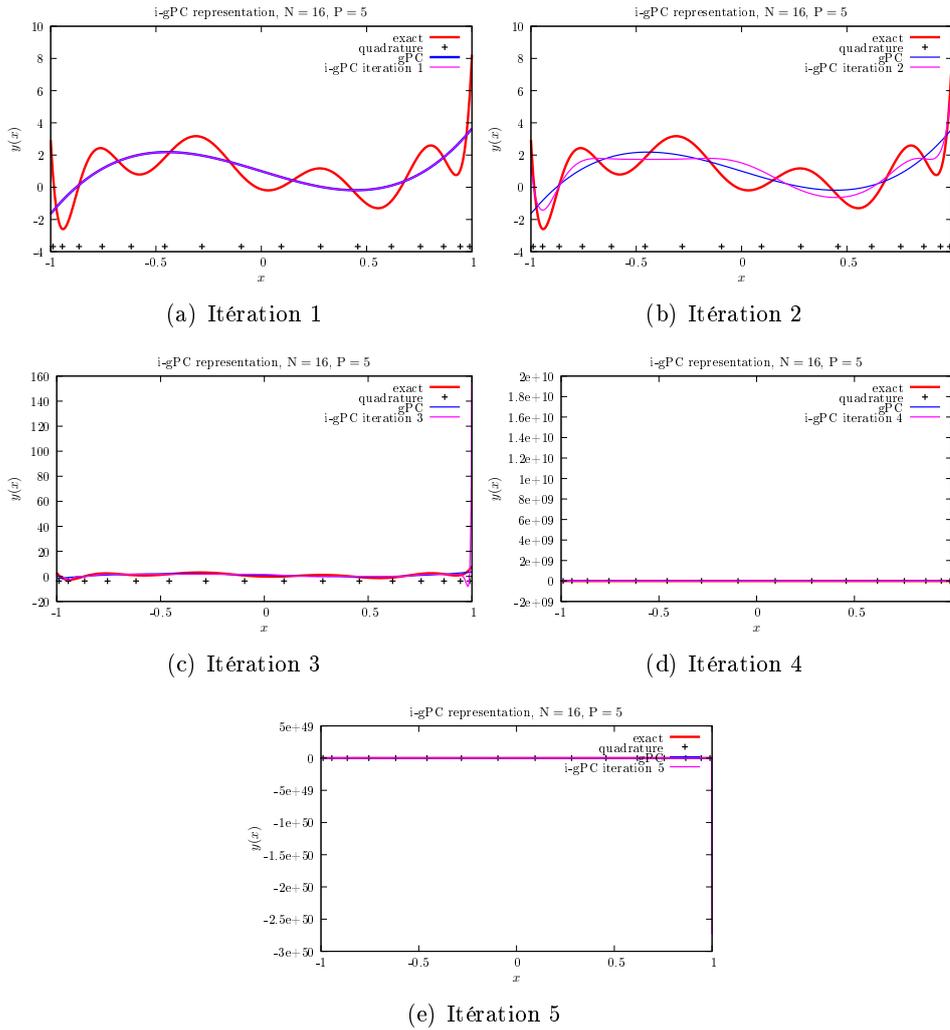


FIGURE 2.30 – Approximation i-gPC du cas Legendre sans critère d’arrêt et de limitation de degré polynomial

et dans celui associé X_3 .

Cette exemple, mettant en évidence le fait que la variable aléatoire de sortie dépend fortement de la variable aléatoire d’entrée simule le fait qu’une légère erreur la loi de l’entrée peut avoir un impact important sur la variable aléatoire de sortie. Cet exemple permet d’introduire le travail effectué dans le chapitre suivant, utilisant l’approche bayésienne pour mieux connaître la loi des paramètres d’entrée en comparant la sortie de notre système dynamiques à des résultats d’expériences.

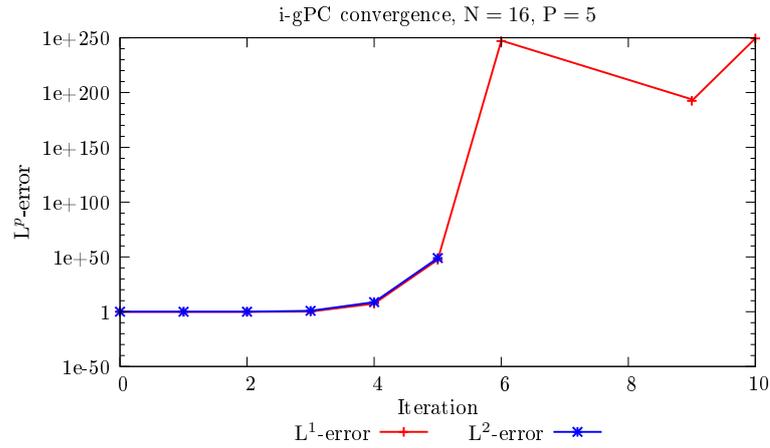


FIGURE 2.31 – Convergence L^1 et L^2 de l’approximation i-gPC du cas Legendre sans critère d’arrêt et de limitation de degré polynomial

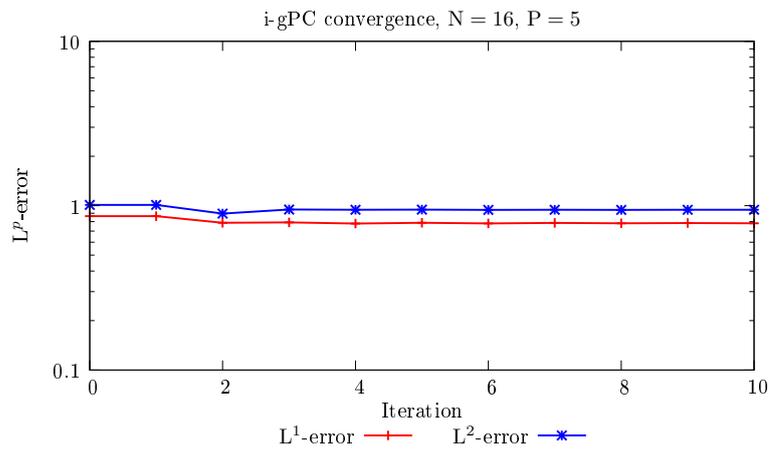


FIGURE 2.32 – Convergence L^1 et L^2 de l’approximation i-gPC du cas Legendre avec critère d’arrêt et de limitation de degré polynomial

2.3.10 Coût numérique de i-gPC

Nous terminons cette description de i-gPC par son coût numérique. i-gPC s’utilise en post-traitement tout comme gPC. Un lancement de i-gPC prend au maximum quelques secondes. La durée de post-traitement i-gPC reste négligeable devant la durée des simulations du modèle qui nécessitent quelques heures voir quelques jours. On peut considérer que le coût numérique de i-gPC est nul et donc que nous n’avons rien à perdre à utiliser i-gPC au lieu de gPC d’autant plus que i-gPC est au moins aussi précis que gPC.

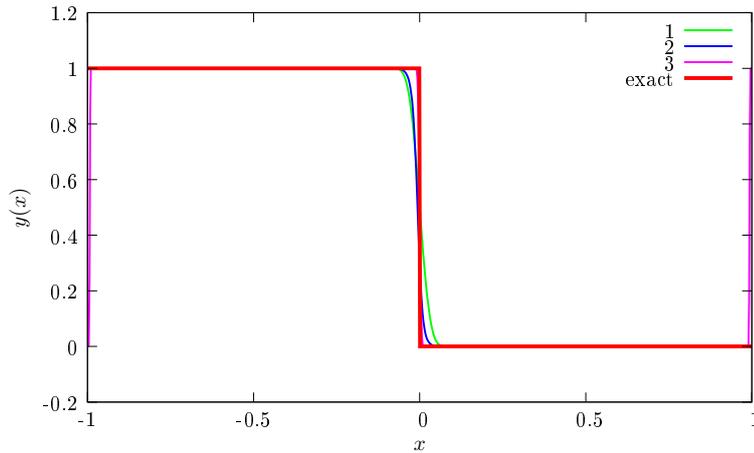


FIGURE 2.33 – Les trois approximations i-gPC correspondant aux trois lois d’entrée. On peut utiliser i-gPC avec une loi en entrée quelconque.

Dans cette section, nous avons considéré un certain nombre de cas-tests dits analytiques, dans le sens où ceux-ci ne nécessitent pas la résolution d’un code complexe, transformant (de façon non linéaire) une variable aléatoire en une autre par une transformation plus ou moins non linéaire. Avant d’aborder le chapitre suivant, nous voulons attirer l’attention du lecteur sur un problème intervenant lors de la résolution d’un problème instationnaire ayant une dépendance temporelle de plus en plus non linéaire. Ce problème, couramment appelé “long-time integration”, touche toutes les méthodes numériques en général mais il a été particulièrement analysé dans [GvdSVK10b, MB10, MB12]. Dans ce cas, la complexité (et le contenu spectral) de la solution ne cesse de croître au cours du temps au fur et à mesure que la dépendance en la variable aléatoire du système devient de plus en plus non linéaire. Une discrétisation standard (d’ordre constant) s’avère inefficace et ne converge plus pour un temps suffisamment long choisi par rapport au problème considéré.

En adaptant la base polynomiale, i-gPC permet de réduire l’effet de l’apparition de non linéarités en temps long, ou “*long term integration*” (section 4.3 [PL11b]).

2.4 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons dans un premier temps abordé le problème de la propagation d’incertitudes dans les systèmes complexes. Nous avons effectué un état de l’art sur les méthodes spectrales dites par Chaos Polynomial généralisé (approche non intrusive) en précisant les conditions de mise en œuvre sur la loi d’entrée et sur le modèle. Nous avons montré la pertinence de soigner le choix de la base de projection. Nous avons illustré son application sur des exemples simples mais permettant d’anticiper les problèmes

intervenant notamment en dynamique des gaz compressibles, physique qui motive les travaux de ce mémoire. Nous avons effectué l'analyse numérique complète de la méthode et étudié des problèmes académiques simples pour mettre en évidence les avantages et les inconvénients du Chaos Polynomial généralisé en application non intrusive (i.e. utilisant un code en boîte noire comme les méthodes Monte-Carlo). L'approche comporte deux principaux inconvénients : la forte dépendance de la complexité du problème au nombre de dimension stochastique du problème (appelé fléau de la dimension dans les ouvrages de la littérature) ainsi que sa sensibilité au phénomène de Gibbs dès lors que la solution présente de forts gradients dans l'espace des paramètres incertains. Concernant la première difficulté, nous n'avons pas apporté de contributions à la discipline, en effet nous avons pu dans cette thèse nous limiter à des dimensions relativement faibles pour les études effectuées. Concernant le second point, à savoir la sensibilité au phénomène de Gibbs et aux transformations non linéaires en général, nous avons proposé une nouvelle méthode basée à la fois sur le Chaos Polynomial généralisé et les méthodes aux moments. La méthode, appelée i-gPC pour iterative-generalized Polynomial Chaos, assure une meilleure approximation que le Chaos Polynomial généralisé classique et présente un intérêt en particulier sur les solutions présentant de forts gradients par rapport aux variables de l'espace stochastique. L'analyse numérique de cette nouvelle méthode a fait l'objet d'une publication soumise à SIAM numerical analysis dont nous attendons le retour des rapporteurs.

Chapitre 3

Problème inverse, inférence bayésienne et son accélération

Objectifs : Dans ce chapitre, nous exposons les bases de la théorie des probabilités bayésiennes, la résolution bayésienne des problèmes inverses et leur accélération lorsque des modèles complexes sont mis en jeu. Nous illustrons notre approche sur des résultats de simulations. Ce chapitre a fait l'objet d'une publication *acceptée* dans *Communication in Computational Physics* [LBP12]. •

La théorie des probabilités bayésiennes constitue bien plus qu'une théorie. Il s'agit d'une philosophie et d'une manière d'appréhender les problèmes. Avant d'introduire en détails cette théorie, un bref aperçu historique s'impose.

La théorie des probabilités bayésiennes naît au XVIII^e siècle avec Thomas Bayes¹ [Bay64] et Pierre-Simon de Laplace² dans son « Mémoire sur la probabilité des causes par les événements » en 1774 [Lap74]. Elle fut ensuite oubliée, supplantée par le point de vue statistique de Ronald Aylmer Fisher³ et de ses successeurs. Puis, elle revint au XX^e siècle à partir des années 1950 sous l'impulsion de Leonard Jimmie Savage [Sav72]. Elle connaît, aujourd'hui, une large diffusion dans les communautés statistique, médicale, biologique, géologique, industrielle, et même politique et judiciaire, et bien d'autres.

Nous nous plaçons dans cadre d'inférence. Un phénomène aléatoire et observable X est lié à un paramètre θ . Il s'agit d'inférer sur θ à partir d'observation concernant X .

Commençons par effectuer quelques rappels sur la théorie bayésienne et le théorème de Bayes.

1. Thomas Bayes (1702-1761) est un mathématicien britannique et pasteur de l'Église presbytérienne.

2. Pierre-Simon de Laplace (1749-1827) est un mathématicien, astronome et physicien français.

3. Sir Ronald Aylmer Fisher (1890-1962) était un biologiste et statisticien britannique

3.1 Théorème de Bayes

Le théorème de Bayes⁴, ou formule de Bayes, est une formule d'inversion d'une probabilité conditionnelle. Il fournit une expression de la probabilité conditionnelle de l'événement A sachant l'événement B en fonction des probabilités des événements A, B et B sachant A.

Théorème 10 (Bayes) *Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé. Soient A et B deux évènements de Ω tels que $\mathbb{P}(A) > 0$ et $\mathbb{P}(B) > 0$. Alors,*

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(B|A) \mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(B)}. \quad (3.1)$$

Ce théorème porte le nom du révérend anglais Thomas Bayes (1702-1761) [OR] qui introduisit cette relation pour un cas particulier dans [Bay64]⁵. Elle fut ensuite généralisée par Pierre-Simon de Laplace (1749-1827) dans [Lap74].

Preuve. Le théorème de Bayes découle directement de la définition de la notion de probabilité conditionnelle. En effet, soient A et B deux évènements de l'espace des évènements Ω tels que $\mathbb{P}(B) > 0$ et $\mathbb{P}(A) > 0$. Alors par définition :

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A, B)}{\mathbb{P}(B)} \quad (3.2)$$

$$\mathbb{P}(B|A) = \frac{\mathbb{P}(A, B)}{\mathbb{P}(A)} \quad (3.3)$$

En combinant ces deux équations, il vient :

$$\mathbb{P}(A|B) \mathbb{P}(B) = \mathbb{P}(B|A) \mathbb{P}(A) \quad (3.4)$$

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(B|A) \mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(B)} \quad (3.5)$$

ce qui prouve l'équation (3.1). 

Dans la section suivante, nous appliquons le théorème de bayes au cas particulier d'un problème d'inférence, ce qui nous intéressera par la suite.

3.2 Inférence bayésienne

L'inférence bayésienne consiste à déduire des mesures expérimentales d'un phénomène aléatoire X, une information sur le paramètre θ jouant un rôle sur la réalisation de X.

4. également dénommé loi de Bayes ou règle de Bayes

5. L'article de Bayes introduit un a priori uniforme sur le paramètre d'une loi binomiale.

Précisément, X présente une dépendance en θ , $X(\theta)$, et par l'intermédiaire de réalisations de $X(\theta)$, on cherche à remonter aux valeurs de θ probables connaissant les observations. La relation de Bayes permet de réaliser une synthèse (a posteriori) entre l'information déjà acquise (a priori) et la nouvelle information contenue dans les données expérimentales.

Nous disposons d'une information initiale, contenue dans la loi a priori du paramètre θ notée $\pi_{\text{pr}}(\theta)$. On suppose que la loi de probabilité $\mathbb{P}(X|\theta)$ de X sachant θ est connue. Cette loi est appelée la vraisemblance⁶ de θ et mesure la confiance dans les mesures.

Nous distinguons deux types de relations entre X et θ .

Pour le premier type, la variable aléatoire X suit la loi de probabilité $f(x|\theta)$, où nous supposons la fonction f connue.

$$X \sim f(x|\theta) \tag{3.6}$$

où $f(x|\theta)$ correspond à la vraisemblance de θ , $\mathbb{P}(x|\theta) = f(x|\theta)$.

Dans le second type, une relation additive impliquant le modèle u et l'erreur ε relie X et θ :

$$X = u(\theta) + \varepsilon, \tag{3.7}$$

où l'erreur de mesure ε suit la loi π_ε supposée connue et donnée par le dispositif expérimental et par les expérimentateurs. La vraisemblance est alors

$$\mathbb{P}(X|\theta) = \pi_\varepsilon(X - u(\theta)). \tag{3.8}$$

Nous reviendrons sur la résolution numérique de tels problèmes dans la section 3.4 traitant de l'accélération des problèmes inverses stochastiques.

Pratiquement, nous disposons de n mesures expérimentales de X : (x_1, \dots, x_n) .

Nous désirons mettre à jour notre information initiale sur θ connaissant ces mesures empiriques. Cette mise à jour sera contenue dans la loi a posteriori de θ notée :

$$\pi_{\text{post}}(\theta) = \mathbb{P}(\theta|x_1, \dots, x_n). \tag{3.9}$$

Nous appliquons le théorème de Bayes aux événements $A = \theta$ et $B = (X = x_1, \dots, X = x_n)$. Nous obtenons alors, en supposant les mesures indépendantes, la relation de proportionnalité suivante :

$$\pi_{\text{post}}(\theta) \propto \pi_{\text{pr}}(\theta) \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(x_i|\theta). \tag{3.10}$$

Pour trouver la constante de proportionnalité C , il suffit d'assurer que la densité a pos-

6. On emploie parfois le terme anglo-saxon de likelihood

teriori somme à un :

$$\int_{\Theta} \pi_{\text{post}}(\theta) \, d\theta = 1 \quad (3.11)$$

$$\int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(x_i|\theta) \, d\theta = C. \quad (3.12)$$

Le processus d'inférence bayésienne comporte quatre étapes. Il s'agit, tout d'abord, de choisir le modèle de vraisemblance $\mathbb{P}(x|\theta)$. La deuxième étape consiste à choisir la loi a priori sur θ à partir d'un avis d'expert ou de résultats précédemment. La troisième phase correspond au calcul de la loi a posteriori. Il n'est pas nécessaire en général de connaître de manière explicite cette loi a posteriori. Au lieu de cela, nous préférons être capable d'échantillonner θ suivant cet a posteriori. Enfin, on estime la valeur a posteriori de θ en utilisant un estimateur. Les plus couramment utilisés sont le maximum a posteriori (θ_{map} c'est-à-dire le paramètre le plus probable a posteriori), et l'espérance a posteriori (θ_{eap}).

$$\theta_{\text{map}} = \arg \max_{\Theta} \pi_{\text{post}}(\theta) \quad (3.13)$$

$$\theta_{\text{eap}} = \int_{\Theta} \theta \pi_{\text{post}}(\theta) \, d\theta \quad (3.14)$$

Pour résumer, l'inférence bayésienne nécessite :

- un modèle $X|\theta \sim \mathbb{P}(x|\theta)$;
- une connaissance a priori $\pi_{\text{pr}}(\theta)$;
- des mesures (x_1, \dots, x_n) ;
- une méthode d'échantillonnage de la variable aléatoire suivant l'a posteriori $\pi_{\text{post}}(\theta)$;
- un estimateur a posteriori.

Dans ce chapitre, nous ne développons pas l'aspect sélection du modèle de vraisemblance. Dans la section suivante, nous nous focalisons sur la construction de la loi a priori.

3.3 Généralités sur le choix de la distribution A priori

La loi a priori sur le paramètre θ résume l'information à notre disposition avant exploitation des données. On distingue classiquement l'a priori informatif et l'a priori non informatif.

3.3.1 A priori informatif

L'a priori informatif correspond aux études pour lesquelles nous disposons d'une information initiale. Celle-ci peut provenir de l'a posteriori d'une inférence antérieure. Il se

peut également que nous connaissions certains moments de la variable aléatoire θ .

L'a posteriori correspond à une loi de probabilité en adéquation avec ces informations. Typiquement, on choisit la fonction g de Θ sur \mathbb{R}^+ minimisant l'entropie de Shannon S (équation (3.15)) sous la contrainte de ne pas violer l'information initiale [Jay80, Jay89].

$$S(g) = - \int_{\Theta} g(\theta) \log(g(\theta)) d\theta \quad (3.15)$$

Par exemple, concernant une variable aléatoire réelle :

- si son support est connu, on optera pour une loi uniforme sur le support ;
- si sa moyenne et sa variance sont connues, on optera pour une loi gaussienne ;
- si le support et le point le plus probable sont connus, on optera pour une loi triangulaire d'extrémités les bornes du support et de sommet le point le plus probable.

Cependant, parfois aucune information initiale n'est disponible. Il faut alors opter pour un a priori non informatif.

3.3.2 A priori non informatif

Un a priori non informatif est utilisé lorsque aucune connaissance a priori n'est disponible. Il peut s'agir d'un a priori uniforme sur tout \mathbb{R}^d bien que sous une telle loi l'espace stochastique ne soit plus de mesure 1.

Pour davantage de précisions sur la sélection d'a priori nous renvoyons le lecteur à [Jay68, BBS09, YB96] et au chapitre 3 de [Rob07]

Nous abordons maintenant la section centrale de ce chapitre concernant l'accélération de l'inférence bayésienne par polynômes du chaos et polynôme du chaos itératif. la section suivante a fait l'objet de la publication suivante [LBP12].

3.4 Accélération des problèmes inverses stochastiques

Dans la littérature, de nombreux travaux tentent d'accélérer l'inférence bayésienne de problèmes inverses stochastiques. Dans ce but, les méthodes spectrales stochastiques ont été récemment introduites afin d'approcher le modèle direct observable sur le support de la loi a priori [MX09b]. Ces représentations permettent de tirer des échantillons important de la loi a posteriori à un coût numérique raisonnable. Afin de ne pas faire un calcul coûteux du modèle pour chaque calcul de l'a posteriori. Malheureusement, ces méthodes ne se comportent pas très bien sur des modèles présentant de fortes non linéarités avec le paramètre d'entrée, ce qui est bien souvent le cas en hydrodynamique. Nous illustrerons cela dans la suite de ce chapitre.

Nous introduisons ici l'algorithme i-gPC, présenté au chapitre 2 section 2.3, pour traiter efficacement les solutions bayésiennes des problèmes inverses impliquant un modèle direct fortement non linéaire ou discontinu. Ce traitement efficace de l'a posteriori vient de l'amélioration de l'approximation du modèle direct qui est approchée de manière adaptative par i-gPC. Nous montrons la convergence théorique de l'a posteriori approché par gPC et i-gPC. Nous illustrons numériquement le gain en convergence permis par i-gPC devant gPC en utilisant des cas test non linéaires et discontinus représentatifs des problèmes hydrodynamiques régis par des lois de conservation hyperboliques dans lesquels des discontinuités peuvent apparaître en temps fini.

Actuellement, le développement d'outils numériques efficaces et fiables comme aide à la prise de décision et concernant l'analyse des risques en conditions incertaines constitue un enjeu crucial tant sur le plan industriel que sur celui des théories scientifiques.

Un problème inverse correspond à l'estimation de paramètres du modèle ou des entrées à partir d'observations indirectes. Tandis que la résolution du modèle direct permet de prédire la réponse du système étant donnés les entrées, la résolution du problème inverse tente d'inverser cette relation en cherchant à calibrer des entrées incertaines à partir de mesures expérimentales ou d'observations.

Un problème inverse peut être traité de façon déterministe ou de façon probabiliste. Nous préférons dans ce document le traitement probabiliste, pour son interprétation, et plus précisément le traitement bayésien. Suivant la version déterministe, le problème inverse se formule comme un problème non linéaire d'optimisation sous contraintes afin de minimiser l'écart dans une certaine norme, la norme L^1 ou L^2 , entre les observations et les prédictions du modèle. Les contraintes correspondant à des caractéristiques souhaitées des paramètres à calibrer [Tar87, KS05]. Ainsi une seule solution minimisant le problème d'optimisation pénalisé est obtenue. Même s'il en existe plusieurs, le programme cherchant numériquement une solution n'en fournit qu'une. Cependant, la précision d'une telle procédure repose sur la disponibilité d'un échantillon important de mesures et sur la précision de ces mesures. En pratique, les mesures sont disponibles en nombre limité et elles sont entachées d'un bruit de mesure. Il semble alors pertinent de chercher la distribution statistique des entrées qui soit la plus pertinente avec le savoir initial et avec les mesures expérimentales. L'inférence bayésienne permet cela en synthétisant l'information initiale (l'a priori) et l'information de mesure pour former l'information finale (l'a posteriori) sous la forme d'une densité de probabilité a posteriori qui représente le degré de confiance en les valeurs de l'entrée [Tar05, KS05].

Les problèmes inverses de grandes dimensions nécessitent de faire appel au modèle direct un très grand nombre de fois. Grâce aux méthodes MCMC les échantillonnages de Metropolis, d'Hastings, et de Gibbs, cette classe de problèmes est maintenant plus abordable [MRR⁺53, GG84, GS90, GRS95, RC04a]. Une autre classe de problèmes inverses délicats est constituée de ceux présentant un modèle direct dont la simulation requière une puissance de calcul conséquente. C'est cette classe de problèmes que nous aborderons.

Afin de permettre la résolution de ces problèmes, des travaux récents ont exploré l'utilisation de méta-modèle du modèle direct afin d'accélérer la convergence de l'optimisation (par exemple dans [LEJS07]) ou de l'inférence bayésienne (comme dans [MNR07b, GFWG10]). En particulier, Marzouk et al. [MNR07b, MX09b, MN09b] ont introduit les méthodes spectrales de représentation pour la propagation de l'incertitude à travers le modèle direct dans le champs des problèmes inverses. Ils ont montré la pertinence du polynôme du chaos généralisé afin d'accélérer la résolution des problèmes inverses et rendre solvable de nouveaux problèmes plus complexes. Mais ils ont aussi illustré les limites de gPC sur les modèles discontinus dans l'espace physique ou stochastique, également abordées dans [LRN⁺04, WK06, AGSX09]. En effet, les faibles performances de gPC sur le problème très irréguliers se propagent et sont amplifiées sur la distribution a posteriori des paramètres d'entrée.

Pour des problèmes hyperboliques fortement non linéaires tels qu'en dynamique des fluides compressibles, écoulement réactif ou multi-phase, la reconstruction gPC du modèle direct échoue à cause de l'apparition du phénomène de Gibbs (oscillations) sur les discontinuités, déjà évoqués au chapitre 2 (cf. figure 3.5 par exemple).

Afin de remédier à cela, on peut envisager une méthode adaptative pour l'approximation du modèle direct. La première tentative de méta-modèles adaptatifs remonte aux méthodes multi-échelle utilisant des ondelettes [LKNG04], et aux méthodes de partitionnement aléatoire faisant appel à des critères heuristiques de convergence de l'a posteriori [WK05b]. Des approches telles que le partitionnement de l'espace stochastique ont été ensuite proposée [Kee05, MM06, WK09] et des approches par plan d'expériences adaptatif pour l'interpolation [MZ09], d'arbres binaires [Try10] ont également été explorées. L'article [PL11b] montre le gain apporté par l'algorithme adaptatif itérative-gPC (i-gPC, voir le chapitre 2 section 2.3), constituant une approche itérative des méthodes de projection spectrale, en particulier lorsque des transformations non linéaires de variables aléatoires sont en jeu. Nous illustrons ici l'intérêt pour l'inférence bayésienne d'utiliser cet algorithme sur des cas test de différentes dimensions et de complexité variées étant pertinent compte tenu de nos motivations hydrodynamiques et de l'étude des lois de conservation hyperboliques pouvant développer des discontinuités en temps fini.

Dans le cadre des problèmes inverses stochastiques, on souhaite inférer sur le paramètre d'intérêt θ connaissant les mesures expérimentales m . Nous voulons donc calculer l'a posteriori $\mathbb{P}(\theta|m)$. En modifiant les notations du théorème de Bayes, l'a posteriori est donné par la relation suivante :

$$\mathbb{P}(\theta|m) \propto \mathbb{P}(\theta) \mathbb{P}(m|\theta). \quad (3.16)$$

Comme au début de ce chapitre on utilisera la notation $\pi_{\text{post}}(\theta)$ pour l'a posteriori $\mathbb{P}(\theta|m)$ et $\pi_{\text{pr}}(\theta)$ pour l'a priori $\mathbb{P}(\theta)$. Afin de pouvoir calculer la vraisemblance, nous devons faire une hypothèse sur la forme de $\mathbb{P}(m|\theta)$ qui désigne la confiance dans les mesures sachant la valeur du paramètre.

Nous considérons une relation additive entre la mesure m_x au point x , le modèle direct $u(x; \theta)$ sachant θ , et l'erreur de mesure ε ,

$$m_x = u(x; \theta) + \varepsilon, \quad (3.17)$$

avec ε suivant la pdf π_ε , indépendante de x et supposée connue. Cette hypothèse est largement répandue dans la littérature, par exemple dans [HKC⁺04, KO01]. Dans ce cas, l'erreur de mesure est supposée gaussienne $\pi_\varepsilon = \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ avec un écart-type σ donné par le dispositif expérimental et par les expérimentateurs. Ce choix de l'erreur gaussienne se justifie de plusieurs manières. Tout d'abord cela facilite bien souvent les calculs théoriques. De plus, d'un point de vue physique, on peut dire que l'erreur est la somme d'erreurs dues à chacun des composants du dispositif. Par le théorème Central limite, cette somme peut-être remplacée par une loi gaussienne.

À partir de l'équation (3.17), on obtient le modèle pour la vraisemblance $\mathbb{P}(m|\theta)$:

$$\mathbb{P}(m|\theta) = \pi_\varepsilon(m - u(x; \theta)). \quad (3.18)$$

L'information initiale sur θ est traduite en une distribution a priori π_{pr} .

Nous utiliserons principalement des a priori uniformes. Cependant, toutes les méthodes présentées sont applicables pour des a priori à support bornés quelconques.

Nous supposons disposer de N mesures indépendantes, $\{m_{x_1}, \dots, m_{x_N}\}$ aux points $\{x_1, \dots, x_N\}$.

En utilisant les équations (3.18) et (3.16), nous obtenons la distribution a posteriori

$$\pi_{\text{post}}(\theta) = \frac{1}{\gamma} \pi_{\text{pr}}(\theta) \prod_{i=1}^N \pi_\varepsilon(m_{x_i} - u(x_i; \theta)), \quad (3.19)$$

avec la constante de normalisation

$$\gamma = \int_{\theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \prod_{i=1}^N \pi_\varepsilon(m_{x_i} - u(x_i; \theta)) \, d\theta. \quad (3.20)$$

La distribution de probabilité a posteriori π_{post} contient toute l'information dont nous disposons, provenant à la fois des mesures expérimentales et du savoir initial. Elle représente l'état de notre connaissance.

La détermination de π_{post} nécessite de nombreuses évaluations de u ce qui est problématique quand la résolution numérique du modèle direct est coûteuse [MNR07a, MX09a, MN09a, MN09b].

Dans la majorité des situations pratiques, comme les simulations de mécanique des fluides, la résolution numérique du modèle direct u est trop compliquée pour permettre l'utilisation de la formule de l'a posteriori (3.19). Cela a été mis en valeur dans ces

différents articles [MNR07a, MX09a, MN09a, MN09b]. Ils suggèrent l'utilisation d'un méta-modèle, afin de remplacer pour chaque mesure i , $\theta \mapsto u(x_i; \theta) \triangleq u_i(\theta)$ est remplacé par un méta-modèle (en l'occurrence un polynôme du chaos) $\theta \mapsto \tilde{u}_i(\theta)$. En introduisant le méta-modèle dans l'a posteriori nous obtenons une approximation de l'a posteriori

$$\tilde{\pi}_{\text{post}}(\theta) = \frac{1}{\gamma_n} \pi_{\text{pr}}(\theta) \prod_{i=1}^N \pi_{\varepsilon}(m_{x_i} - \tilde{u}_{n,i}(\theta)), \quad (3.21)$$

avec

$$\gamma_n = \int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \prod_{i=1}^N \pi_{\varepsilon}(m_{x_i} - \tilde{u}_{n,i}(\theta)) \, d\theta. \quad (3.22)$$

Nous avons opté pour le polynôme du chaos et le polynôme du chaos itératif comme méthode d'approximation du modèle direct. Dans la section suivante, nous introduisons les performances de cette stratégie de méta-modèle polynômes du chaos et polynômes du chaos itératif. Nous nous intéresserons à un modèle direct discontinu.

Nous commençons par énoncer le principal résultat théorique de cette section, à savoir nous montrons la convergence théorique de cette approche.

3.5 Convergence de la distribution a posteriori

Une question pertinente concerne l'impact de la convergence en moyenne quadratique de l'approximation du modèle direct sur la convergence de l'a posteriori inféré. Marzouk et al. dans [MX09b] ont montré que si l'approximation du modèle direct converge au sens de la norme L^2 alors l'approximation de la densité a posteriori converge au sens de la divergence de Kullback-Leibler. Cela se résume par la proposition suivante :

Proposition 1 Soient $\{u_i = u(x_i, \cdot)\}_{i \in \{1, \dots, N\}}$ un ensemble de N échantillon du modèle direct et $\tilde{u}_{n,i}$ son modèle approché construit avec $n < N$ évaluations du modèle direct exacte. Nous supposons que l'erreur de mesure est Gaussienne, centrée, d'écart-type σ connu. Soit π_{pr} l'a priori sur θ dans Θ . Soit π_{post} l'a posteriori exacte et $\tilde{\pi}_{\text{post}}^n$ l'a posteriori approché. Alors, il existe une constante réelle C strictement positive telle que

$$\mathbf{D}_{\text{KL}}(\pi_{\text{post}} \parallel \tilde{\pi}_{\text{post}}^n) \leq C \sum_{i=1}^N \|\tilde{u}_{n,i} - u_i\|_{L^2(\Theta)}. \quad (3.23)$$

Dans leur étude, ils montrent que le taux de convergence de l'a posteriori est supérieur au taux de convergence de un du modèle direct. Dans cette section, nous proposons de montrer que si l'approximation du modèle direct converge en norme L^2 et que l'a priori est telle qu'il existe une constante K_{pr} telle que $\pi_{\text{pr}}(\theta) K_{\text{pr}} \geq 1$. alors l'approximation de

l'a posteriori converge au sens de la divergence de Kullback-Leibler au moins deux fois plus vite.

Proposition 2 Soient, pour $i \in \{1, \dots, N\}$, $u_i = u(x_i, \cdot)$ le modèle direct exact au point x_i et $\tilde{u}_{n,i}$ son modèle approché construit avec n évaluations du modèle direct. Nous supposons que l'erreur de mesure est Gaussienne, centré, avec un écart-type connu. Nous supposons que l'a priori est telle qu'il existe une constante K_{pr} telle que $\pi_{pr}(\theta)K_{pr} \geq 1$ Soient π_{post} l'a posteriori exact et $\tilde{\pi}_{post}^n$ l'a posteriori approché. Alors, il existe une constante réelle C strictement positive telle que

$$\mathbb{D}_{KL}(\pi_{post} \parallel \tilde{\pi}_{post}^n) \leq C \left\{ \sum_{i=1}^N \|\tilde{u}_{n,i} - u_i\|_{L^2(\Theta)} \right\}^2. \quad (3.24)$$

Afin de démontrer cette proposition, nous introduisons d'abord la divergence de Kullback-Leibler, la notion de variation totale, et l'inégalité de Pinsker.

3.5.1 Divergence de Kullback-Leibler

Dans la théorie des probabilités et de l'information, la divergence de Kullback-Leibler (\mathbb{D}_{KL}) [KL51] quantifie la dissimilarité entre deux mesures de probabilité. Cette f -divergence [LV06] n'est pas une distance sur l'espace des densités de probabilité car elle ne respecte pas l'inégalité triangulaire. \mathbb{D}_{KL} est nulle si et seulement si les deux mesures sont identiques. La divergence de Kullback-Leibler est particulièrement intéressante (par rapport aux autres mesures de dissimilarité) pour son interprétation probabiliste et son caractère informatif.

Définition 5 (Divergence de Kullback-Leibler) Soient Θ un ensemble inclus dans \mathbb{R}^d et (p, q) deux distributions de probabilité dans Θ telles que presque partout $q(\theta) > 0$ ($\mathbb{P}(q(\theta) > 0) = 1$). La divergence de Kullback-Leibler entre p et q est définie par

$$\mathbb{D}_{KL}(p \parallel q) = \int_{\Theta} p(\theta) \log \left(\frac{p(\theta)}{q(\theta)} \right) d\theta. \quad (3.25)$$

Numériquement, la divergence de Kullback-Leibler \mathbb{D}_{KL} peut être approchée par intégration Monte-Carlo en utilisant n échantillons $\theta_1, \dots, \theta_n$ uniformément distribués sur Θ :

$$\mathbb{D}_{KL}(p \parallel q) \simeq \sum_{i=1}^n p(\theta_i) \log \left(\frac{p(\theta_i)}{q(\theta_i)} \right). \quad (3.26)$$

Il est aussi possible de choisir les $\theta_1, \dots, \theta_n$ distribués selon p et d'approcher la divergence de Kullback par :

$$\mathbb{D}_{KL}(p \parallel q) \simeq \sum_{i=1}^n \log \left(\frac{p(\theta_i)}{q(\theta_i)} \right). \quad (3.27)$$

Il est possible de définir une version symétrique de la divergence de Kullback-Leibler, également appelée divergence de Jeffrey.

Définition 6 (Divergence Kullback-Leibler symétrique ou divergence de Jeffrey) *Soient Θ un ensemble inclus dans \mathbb{R}^d et (p, q) deux distributions de probabilité sur Θ telles que presque partout $q(\theta) > 0$ ($\mathbb{P}(q(\theta) > 0) = 1$). et $p(\theta) > 0$ ($\mathbb{P}(p(\theta) > 0) = 1$). La divergence de Kullback-Leibler symétrique entre p et q est définie par*

$$D_{KL}^s(p\|q) = D_{KL}(p\|q) + D_{KL}(q\|p) \quad (3.28)$$

$$= \int_{\Theta} \{p(\theta) - q(\theta)\} \log \left(\frac{p(\theta)}{q(\theta)} \right) d\theta. \quad (3.29)$$

Nous introduisons maintenant la variation totale entre deux mesures de probabilité. Elle sera utile afin de montrer la proposition principale de cette section.

3.5.2 Variation totale

La Variation Totale (TV) est une distance entre deux mesures de probabilité. Il s'agit également d'une mesure de dissimilarité mais elle ne présente pas la même interprétation informative que D_{KL} . Elle est définie comme suit.

Définition 7 (Variation totale) *Soient Θ in ensemble inclus dans \mathbb{R}^d muni de la σ -algèbre des boréliens \mathcal{B} et (p, q) deux distributions de probabilité sur Θ . La variation totale variation entre p et q est*

$$\text{TV}(p, q) = \sup_{A \in \mathcal{B}} |p(A) - q(A)|. \quad (3.30)$$

L'inégalité de Pinsker relie la variation totale et la divergence de Kullback-Leibler

3.5.3 Inégalité de Pinsker

L'inégalité de Pinsker, introduit par Pinsker en 1964 dans [Pin60] affirme que la variation totale entre deux distributions de probabilité est bornée par la racine carrée de leur divergence de Kullback-Leibler.

Théorème 11 (Inégalité de Pinsker) *Soit Θ un ensemble muni d'une σ -algèbre \mathcal{B} . Soient (p, q) deux distributions de probabilité sur Θ . Alors,*

$$\boxed{\text{TV}(p, q) \leq \sqrt{\frac{1}{2} D_{KL}(p\|q)}}. \quad (3.31)$$

Pour la preuve de l'inégalité de Pinsker, voir [Pin60].

En choisissant la tribu des Boréliens comme σ -algèbre, ce théorème a le corollaire suivant.

Corollaire 11.1 *Soient Θ un ensemble inclus dans \mathbb{R}^d muni de la σ -algèbre des boréliens \mathcal{B} et (p, q) deux distributions de probabilité sur Θ . Alors,*

$$\sup_{\theta \in \Theta} |p(\theta) - q(\theta)| \leq \sqrt{\frac{1}{2} \mathcal{D}_{KL}(p||q)}. \quad (3.32)$$

Preuve. Pour $\theta \in \Theta$, le singleton $\{\theta\}$ est dans la σ -algèbre \mathcal{B} . Alors, l'ensemble des singletons est inclus dans \mathcal{B} . Alors,

$$\sup_{\theta \in \Theta} |p(\theta) - q(\theta)| \leq \sup_{A \in \mathcal{B}} |p(A) - q(A)|. \quad (3.33)$$

Finalement, en appliquant l'inégalité de Pinsker (théorème 11), nous concluons que

$$\sup_{\theta \in \Theta} |p(\theta) - q(\theta)| \leq \sqrt{\frac{1}{2} \mathcal{D}_{KL}(p||q)}. \quad (3.34)$$



Maintenant que nous disposons des outils pour l'étude de la convergence de l'a posteriori, nous montrons le résultat théorique principal de cette section (inégalité (3.24)).

3.5.4 Preuve de la proposition 2

Afin de montrer l'inégalité (3.24), nous introduisons quelques lemmes intermédiaires.

Lemme 12 *La fonction $x \mapsto e^{-x}$ est uniformément Lipschitz sur $[0, +\infty]$. c'est-à-dire, il existe une constante Λ strictement positive telle que pour tout $x \geq 0$ et pour tout $y \geq 0$: $|e^{-x} - e^{-y}| \leq \Lambda|x - y|$.*

Lemme 13 *Avec les notations de la sections précédente, il existe une constante réelle C_1 strictement positive telle que*

$$|\gamma_n - \gamma| \leq C_1 \sum_{i=1}^N \|\tilde{u}_{n,i} - u_i\|_{L^2(\Theta)}. \quad (3.35)$$

Preuve. Pour commencer, pour chaque point de mesure i , le modèle approché $\tilde{u}_{n,i}$ converge en norme L^2 vers u_i . Par conséquent, $(\tilde{u}_{n,i})_{n \in \mathbb{R}}$ est borné en norme L^2 .

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} : \|\tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \leq \max_{1 \leq i \leq N} \sup_{n \in \mathbb{R}} \|\tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} = C_N \quad (3.36)$$

Alors, par définition de γ_n (3.22) et γ (3.20)

$$\gamma_n - \gamma = \int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \left[\prod_{i=1}^N \pi_{\varepsilon}(\tilde{u}_{n,i}(\theta) - m_i) - \prod_{i=1}^N \pi_{\varepsilon}(u_i(\theta) - m_i) \right] d\theta. \quad (3.37)$$

Utilisant l'hypothèse d'erreur de mesure Gaussienne,

$$|\gamma_n - \gamma| \leq \int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \left| e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (\tilde{u}_{n,i}(\theta) - m_i)^2} - e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (u_i(\theta) - m_i)^2} \right| d\theta. \quad (3.38)$$

Utilisant le lemme 12,

$$|\gamma_n - \gamma| \leq \Lambda \int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \left| -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (\tilde{u}_{n,i}(\theta) - m_i)^2 - -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (u_i(\theta) - m_i)^2 \right| d\theta \quad (3.39)$$

$$|\gamma_n - \gamma| \leq \frac{\Lambda}{2\sigma^2} \int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \left| \sum_{i=1}^N (u_i(\theta) - m_i)^2 - (\tilde{u}_{n,i}(\theta) - m_i)^2 \right| d\theta \quad (3.40)$$

$$|\gamma_n - \gamma| \leq \frac{\Lambda}{2\sigma^2} \int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) \left| \sum_{i=1}^N (u_i(\theta) - \tilde{u}_{n,i}(\theta)) (u_i(\theta) + \tilde{u}_{n,i}(\theta) - 2m_i) \right| d\theta \quad (3.41)$$

$$|\gamma_n - \gamma| \leq \frac{\Lambda}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N \int_{\Theta} \pi_{\text{pr}}(\theta) |u_i(\theta) - \tilde{u}_{n,i}(\theta)| |u_i(\theta) + \tilde{u}_{n,i}(\theta) - 2m_i| d\theta \quad (3.42)$$

Appliquant l'inégalité Hölder pour chaque intégrale dans la somme,

$$|\gamma_n - \gamma| \leq \frac{\Lambda}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \|u_i + \tilde{u}_{n,i} - 2m_i\|_{L^2(\Theta)}. \quad (3.43)$$

Par l'inégalité (3.36),

$$|\gamma_n - \gamma| \leq \left(\max_i \|u_i\|_{L^2(\Theta)} + 2 \max_i |m_i| + C_N \right) \frac{\Lambda}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)}. \quad (3.44)$$

Introduisant

$$C_1 = \left(\max_i \|u_i\|_{L^2(\Theta)} + 2 \max_i |m_i| + C_N \right) \frac{\Lambda}{2\sigma^2}, \quad (3.45)$$

nous obtenons :

$$|\gamma_n - \gamma| \leq C_1 \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)}. \quad (3.46)$$



Lemme 14 Soient $(a_k)_{k \in \mathbb{R}}$ et $(b_k)_{k \in \mathbb{R}}$ deux suites réelles strictement positives et $a \in \mathbb{R}_+$ tel que $\forall k \in \mathbb{R}$

$$|a_k - a| \leq b_k \text{ et } \lim_{k \rightarrow +\infty} b_k = 0. \quad (3.47)$$

Alors, il existe une constante réelle $M > 0$ telle que $\forall k \in \mathbb{R}$

$$\left| \log \left(\frac{a_k}{a} \right) \right| \leq Mb_k. \quad (3.48)$$

Preuve. par hypothèse,

$$\forall n \in \mathbb{R} : |a_k - a| \leq b_k. \quad (3.49)$$

et de manière équivalente,

$$\forall k \in \mathbb{R} : -b_k \leq a_k - a \leq b_k. \quad (3.50)$$

ce qui conduit à,

$$\forall k \in \mathbb{R} : 1 - \frac{b_k}{a} \leq \frac{a_k}{a} \leq 1 + \frac{b_k}{a}. \quad (3.51)$$

Nous remarquons que pour $k_0 \in \mathbb{N}$ donné, $1 - \frac{b_{k_0}}{a} > 0$. Alors,

$$\forall k > k_0 : \log \left(1 - \frac{b_k}{a} \right) \leq \log \left(\frac{a_k}{a} \right) \leq \log \left(1 + \frac{b_k}{a} \right) \leq \frac{b_k}{a}, \quad (3.52)$$

$$\text{Alors } \forall k > k_0 : \left| \log \left(\frac{a_k}{a} \right) \right| \leq \max \left\{ -\log \left(1 - \frac{b_k}{a} \right), \frac{b_k}{a} \right\}. \quad (3.53)$$

Le terme dominant à droite est $\frac{b_k}{a}$ quand $k \rightarrow +\infty$. Alors, $\left| \log \left(\frac{a_k}{a} \right) \right|$ est de l'ordre de $\mathcal{O}(b_k)$. Alors, il existe une constante réelle C telle que

$$\forall k > k_0 : \left| \log \left(\frac{a_k}{a} \right) \right| \leq Cb_k. \quad (3.54)$$

Enfin, posant $M = \max \left\{ C, \frac{|\log(\frac{a_0}{a})|}{b_0}, \dots, \frac{|\log(\frac{a_{k_0}}{a})|}{b_{k_0}} \right\}$, nous concluons que

$$\forall k \in \mathbb{R} : \left| \log \left(\frac{a_k}{a} \right) \right| \leq Mb_k, \quad (3.55)$$

ce qui termine la preuve. 

Lemme 15 Il existe une constante $C_2 > 0$ telle que :

$$\boxed{\left| \log \left(\frac{\gamma_n}{\gamma} \right) \right| \leq C_2 \sum_{i=1}^N \|\tilde{u}_{n,i} - u_i\|_{L^2(\Theta)}. \quad (3.56)}$$

Preuve. Nous appliquons les lemmes 14 et 13 avec

$$a_n = \gamma_n \quad (3.57)$$

$$b_n = \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0 \text{ (cf. théorème de Cameron-Martin [CM47b])}. \quad (3.58)$$



Preuve de la proposition 2. Pour commencer, nous remarquons que D_{KL} est inférieure que la divergence de Kullback-Leibler symétrique D_{KL}^{s} .

$$0 \leq D_{\text{KL}}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n) \leq D_{\text{KL}}^{\text{s}}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n) \quad (3.59)$$

Nous définissons

$$\Delta_n \equiv D_{\text{KL}}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n). \quad (3.60)$$

De l'inégalité (3.59), il vient

$$\Delta_n \leq D_{\text{KL}}^{\text{s}}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n). \quad (3.61)$$

Supposons qu'il existe une constante $m \in \mathbb{R}^*$ telle que $\forall \theta \in \Theta, \pi_{\text{pr}}(\theta) K_{\text{pr}} \geq 1$ (ce qui est vrai pour une distribution uniforme, il y a même dans ce cas égalité) et utilisant la définition de la divergence de Jeffrey (définition 6), il vient

$$\Delta_n \leq K_{\text{pr}} \int_{\Theta} \{ \pi_{\text{post}}(\theta) - \tilde{\pi}_{\text{post}}^n(\theta) \} \log \left(\frac{\pi_{\text{post}}(\theta)}{\tilde{\pi}_{\text{post}}^n(\theta)} \right) \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta. \quad (3.62)$$

qui peut être bornée comme suit

$$\Delta_n \leq K_{\text{pr}} \sup_{\theta \in \Theta} | \pi_{\text{post}}(\theta) - \tilde{\pi}_{\text{post}}^n(\theta) | \int_{\Theta} \left| \log \left(\frac{\pi_{\text{post}}(\theta)}{\tilde{\pi}_{\text{post}}^n(\theta)} \right) \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta. \quad (3.63)$$

Selon le corollaire 11.1 de l'inégalité de Pinsker,

$$\Delta_n \leq K_{\text{pr}} \sqrt{\frac{1}{2} \Delta_n} \int_{\Theta} \left| \log \left(\frac{\pi_{\text{post}}(\theta)}{\tilde{\pi}_{\text{post}}^n(\theta)} \right) \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta. \quad (3.64)$$

ce qui conduit à :

$$\Delta_n^2 \leq K_{\text{pr}}^2 \frac{1}{2} \Delta_n \left\{ \int_{\Theta} \left| \log \left(\frac{\pi_{\text{post}}(\theta)}{\tilde{\pi}_{\text{post}}^n(\theta)} \right) \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta \right\}^2. \quad (3.65)$$

et

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{2} \left\{ \int_{\Theta} \left| \log \left(\frac{\pi_{\text{post}}(\theta)}{\tilde{\pi}_{\text{post}}^n(\theta)} \right) \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta \right\}^2 \quad (3.66)$$

En introduisant la fonction de vraisemblance l^7 et la vraisemblance approchée l_n^8 ,

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{2} \left\{ \log \left(\frac{\gamma_n}{\gamma} \right) + \int_{\Theta} \left| \log \left(\frac{l(\theta)}{l_n(\theta)} \right) \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta \right\}^2 \quad (3.67)$$

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{4\sigma^2} \left\{ \log \left(\frac{\gamma_n}{\gamma} \right) + \int_{\Theta} \left| \sum_{i=1}^N (u_i(\theta) - m_i)^2 - (\tilde{u}_{n,i}(\theta) - m_i)^2 \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta \right\}^2 \quad (3.68)$$

7. $l = \prod_{i=1}^N \pi_{\varepsilon}(u_i(\theta) - m_i)$

8. $l_n = \prod_{i=1}^N \pi_{\varepsilon}(\tilde{u}_{n,i}(\theta) - m_i)$

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{4\sigma^2} \left\{ \log \left(\frac{\gamma_n}{\gamma} \right) + \sum_{i=1}^N \int_{\Theta} \left| (u_i(\theta) - m_i)^2 - (\tilde{u}_{n,i}(\theta) - m_i)^2 \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta \right\}^2 \quad (3.69)$$

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{4\sigma^2} \left\{ \log \left(\frac{\gamma_n}{\gamma} \right) + \sum_{i=1}^N \int_{\Theta} \left| u_i(\theta) - \tilde{u}_{n,i}(\theta) \right| \left| u_i(\theta) + \tilde{u}_{n,i}(\theta) - 2m_i \right| \pi_{\text{pr}}(\theta) \, d\theta \right\}^2. \quad (3.70)$$

Appliquant l'inégalité de Hölder à chaque intégrale dans la somme, il vient

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{4\sigma^2} \left\{ \log \left(\frac{\gamma_n}{\gamma} \right) + \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \|u_i + \tilde{u}_{n,i} - 2m_i\|_{L^2(\Theta)} \right\}^2. \quad (3.71)$$

Par le lemme 13 :

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{4\sigma^2} \left\{ C_2 \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} + \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \|u_i + \tilde{u}_{n,i} - 2m_i\|_{L^2(\Theta)} \right\}^2. \quad (3.72)$$

Nous définissons C_3 par

$$C_3 \equiv \left(\max_i \|u_i\|_{L^2(\Theta)} + 2 \max_i |m_i| + \sup_{n,i} \|\tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \right) \quad (3.73)$$

qui existe car les u_i sont dans L^2 , que nous avons un nombre fini de mesures et que tous les $\tilde{u}_{n,i}$ convergent dans L^2 .

Alors,

$$\Delta_n \leq \frac{K_{\text{pr}}^2}{4\sigma^2} \left\{ C_2 \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} + C_3 \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \right\}^2. \quad (3.74)$$

Finalement, introduisant $C \equiv \frac{K_{\text{pr}}^2}{4\sigma^2} (C_2 + C_3)^2$, nous terminons la preuve par :

$$\Delta_n \leq C \left\{ \sum_{i=1}^N \|u_i - \tilde{u}_{n,i}\|_{L^2(\Theta)} \right\}^2. \quad (3.75)$$



Soulignons à nouveau que l'inégalité (3.23) est intéressante car elle assure que, si nous disposons d'une méthode pour construire des modèles approchés qui convergent en norme L^2 , alors, l'a posteriori converge au sens de la divergence de Kullback-Leibler.

De plus, dans le cas d'un a priori uniforme, ou vérifiant $\pi_{\text{pr}}(\theta)K_{\text{pr}} \geq 1$ $K_{\text{pr}} > 0$, l'inégalité (3.24) nous dit que la convergence est deux fois plus rapide. Alors, le Chaos Polynomial, qui converge en norme L^2 [CM47b], est cohérent avec l'approximation de a posteriori bayésien et l'accélération de l'inférence. Cela est également vrai pour la version itérative de gPC.

3.6 Exemples d'applications numériques

Dans cette section, nous illustrons le taux de convergence de l'a posteriori obtenu par inférence bayésienne pour des problèmes inverses de régularités diverses.

Pour des modèles directs fortement non linéaires ou discontinus, nous utilisons la nouvelle représentation adaptative i-gPC du modèle direct. Nous comparons les taux de convergence des approximations des modèles directs (en norme L^2) et des a posteriori (en divergence de Kullback-Leibler) pour les approches gPC et i-gPC.

Les cas test employés ici sont non linéaires et (à l'exception du premier) issus de problèmes hyperboliques en hydrodynamique. Nous avons fait ce choix de manière cohérente avec les motivations de ces travaux à savoir une étude de l'interface entre deux fluides dans le cadre des instabilités de Rychtmyer-Meshkov ou de Rayleigh-Taylor. De plus, l'approche adaptative i-gPC a été spécifiquement élaborée pour traiter des problèmes discontinus. Il reste néanmoins possible d'appliquer notre approche à d'autres types de problèmes mais la méthode n'ayant pas été conçue pour les résoudre, les résultats de seront pas aussi spectaculaires que pour les systèmes hyperboliques de loi de conservation.

3.6.1 Fonction marche

Dans cette section, nous reprenons le cas test introduit par Marzouk et Xiu dans [MX09a] et impliquant une discontinuité. La fonction fonction marche ou seuil (step function) du modèle direct peut être interprétée de la manière suivante. Considérons une problème d'advection linéaire défini sur $\Theta = [-1; 1]$, avec une condition initiale $u_0(x)$ représentative d'un phénomène physique présentant un choc :

$$u_0(x) = \mathbb{I}_{[x < 0]}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.76)$$

Au cours du temps, le choc sera advecté à la vitesse v constante et la solution s'écrira pour $t > 0$ $u(x, t) = u_0(x - vt)$. L'objectif ici est d'inférer sur la vitesse du choc v à partir d'une seule observation m par un détecteur de précision finie placé en $(x = 0, t = 1)$. Avec les notations des sections précédentes, la vitesse $v = \theta$ correspond au paramètre inconnu. Le cas test étant théorique, la mesure n'est pas réellement faite. $m = u(v_{\text{true}}) + \eta$ c'est-à-dire que la solution analytique est perturbée par un bruit gaussien $\eta \sim \mathcal{N}(0, \nu^2)$ avec un écart-type $\nu = 0.1$. Nous considérons que la loi de l'erreur de mesure dans le formalisme bayésien est connue et vaut $\varepsilon \sim \eta \sim \mathcal{N}(0, \nu^2)$. De plus, nous supposons que nous ne disposons pas de savoir initial sur v . Cette absence de connaissance est modélisée pas un a priori uniforme sur tout le domaine $[-1; 1]$. Nous prenons $v_{\text{true}} = 0.2$ comme vraie valeur de la vitesse du choc.

Ensuite, nous menons la résolution bayésienne du problème et son accélération comme

décrite dans la section 3.4. Les figures 3.4(a) et 3.4(b) montrent les résultats de ce problème inverse correspondant à la solution exacte, l'accélération gPC et à l'accélération i-gPC. La figure 3.4(a) montre les approximations du modèle direct tandis que la figure 3.4(b) montre les approximations de la distribution de probabilité a posteriori de v .

Pour les différentes approximations, nous utilisons une base polynomiale de Legendre (adaptée à la mesure uniforme a priori) de degré $P = 8$ et une quadrature numérique d'intégration de Clenshaw-Curtis de niveau $l = 8$ c'est-à-dire contenant $2^{l-1} + 1 = 129$ points (donc 129 évaluations du modèle direct).

L'inférence bayésienne réalisée avec gPC fournit ici de mauvais résultats du fait de l'amplification des oscillations de l'approximation du modèle par les non linéarités de la densité gaussienne du bruit de mesure ε . Ainsi, avec les oscillations de \tilde{u}_n^{gPC} , elle attribue artificiellement une probabilité élevée à certaines zones. En revanche, l'utilisation de i-gPC pour l'accélération du calcul de l'a posteriori permet d'éviter l'apparition des oscillations dans l'approximation du modèle direct et par voie de conséquence de générer un a posteriori bien mieux représentatif de ce qu'est notre véritable niveau de connaissance de la valeur du paramètre v .

Pour un niveau de quadrature suffisant pour garantir une bonne précision d'intégration, l'inférence peut être conduite pour différents degrés polynomiaux. Nous réalisons ici une étude de convergence des quantités définies par :

$$\pi_{\text{post}}^{n,\text{gPC}}(v) \propto \pi_{\text{pr}}(v) \pi_{\varepsilon}(\tilde{u}_n^{\text{gPC}}(v) - m), \quad (3.77)$$

$$\pi_{\text{post}}^{n,\text{i-gPC}}(v) \propto \pi_{\text{pr}}(v) \pi_{\varepsilon}(\tilde{u}_n^{\text{i-gPC}}(v) - m) \quad (3.78)$$

$$\text{par rapport à } \pi_{\text{post}}(v) \propto \pi_{\text{pr}}(v) \pi_{\varepsilon}(u(v) - m), \quad (3.79)$$

La figure 3.1 valide les résultats théoriques de la section 3.5. Elle montre les taux de convergence de la représentation gPC dans un graphique log – log.

La courbe du bas montre la convergence de l'approximation gPC du modèle direct $\|\tilde{u}_{n,i} - u_i\|_{L^2(\Theta)}$ (FM_{L^2}) tandis que la courbe du haut confirme que la divergence de Kullback-Leibler de l'a posteriori $\text{D}_{\text{KL}}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n)$ (D_{KL}) décroît deux fois plus rapidement, comme prédit par la théorie (cf. proposition 2) et également observé pour l'interpolation stochastique dans [MX09a].

L'étude est également menée pour la représentation i-gPC avec la même quadrature numérique (donc pas d'appel au modèle supplémentaire).

La divergence de Kullback-Leibler est bien plus basse avec i-gPC, cf. Figure 3.2, ce qui traduit la plus grande précision de l'a posteriori i-gPC par rapport à l'a posteriori gPC. De plus dans le cas de i-gPC, le degré de troncature P ne semble plus être le facteur limitant la précision.

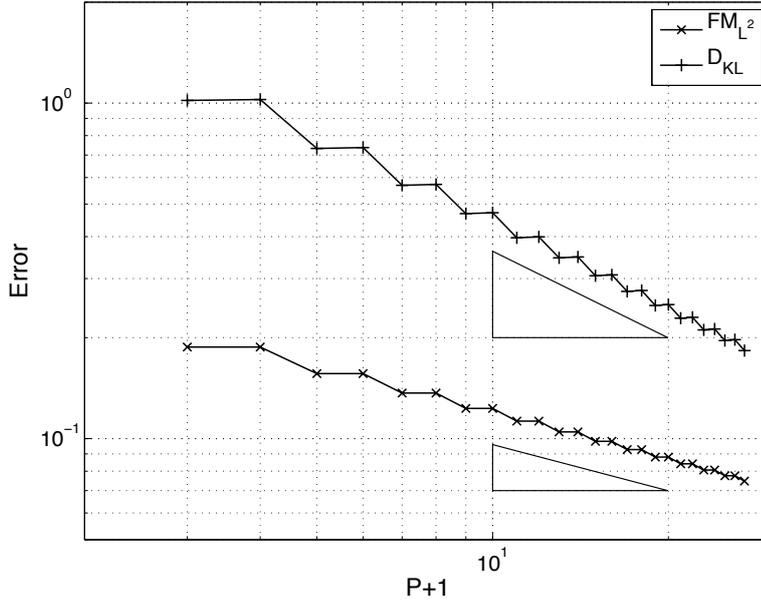


FIGURE 3.1 – Fonction marche : étude de convergence par rapport au degré de troncature gPC P de l’erreur l’approximation du modèle direct $\|\tilde{u}_{n,i} - u_i\|_{L^2(\Theta)}$ (FM_{L^2}) et de la divergence de Kullback-Leibler de l’a posteriori $D_{KL}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n)$ (D_{KL}).

Dans ce cas, l’erreur due à la précision de la quadrature semble être le facteur important. Cela est confirmé par les erreurs des approximations gPC et i-gPC du modèle direct en norme L^1 sur la figure 3.3. On remarque sur cette figure que la précision du modèle i-gPC est bornée par la résolution maximale entre deux points voisins de la quadrature.

La figure 3.5 montre les résultats correspondant à une base polynomiale d’approximation de Legendre de degré $P = 4$ et à une quadrature de Clenshaw-Curtis de niveau $l = 6$, soit $2^{l-1} + 1 = 33$ points. Le nombre d’évaluations du modèle étant faible, l’erreur de projection est grande. Cependant, i-gPC est quand même capable de se comporter mieux que gPC, de capturer convenablement la discontinuité et d’éviter l’apparition d’oscillations.

Dans la section suivante, nous considérons un problème non linéaire dépendant du temps et de dimension stochastique deux afin d’illustrer la possibilité de mettre en œuvre l’approche proposée en dimension stochastique supérieure à un. Il s’agit de l’Équation de Burgers non visqueuse.

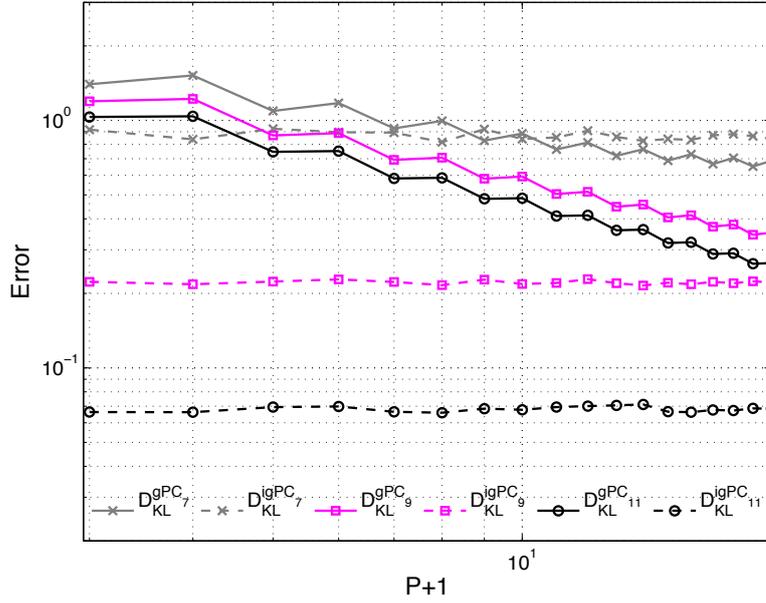


FIGURE 3.2 – Fonction marche : comparaison entre les divergences de Kullback-Leibler des a posteriori $D_{\text{KL}}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n)$ obtenus avec gPC ($D_{\text{KL}}^{\text{gPC}}$) et i-gPC ($D_{\text{KL}}^{\text{i-gPC}}$) pour différents niveaux de quadrature. i-gPC est contraint par la quadrature à la différence de gPC pour lequel P est la facteur contraignant de la précision de l'approximation.

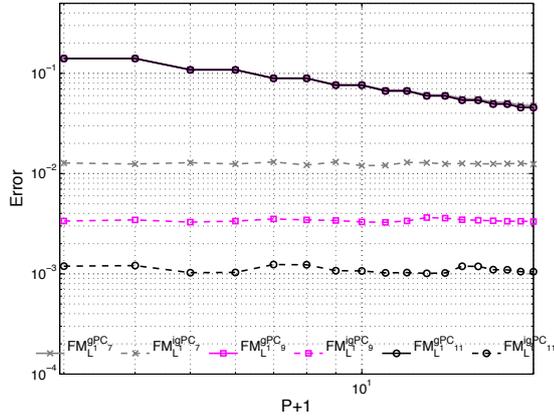


FIGURE 3.3 – Fonction marche : comparaison entre les erreurs L^1 des approximations gPC ($FM_{L^1}^{\text{gPC}}$) et i-gPC ($FM_{L^1}^{\text{i-gPC}}$) pour différents niveaux de quadrature.

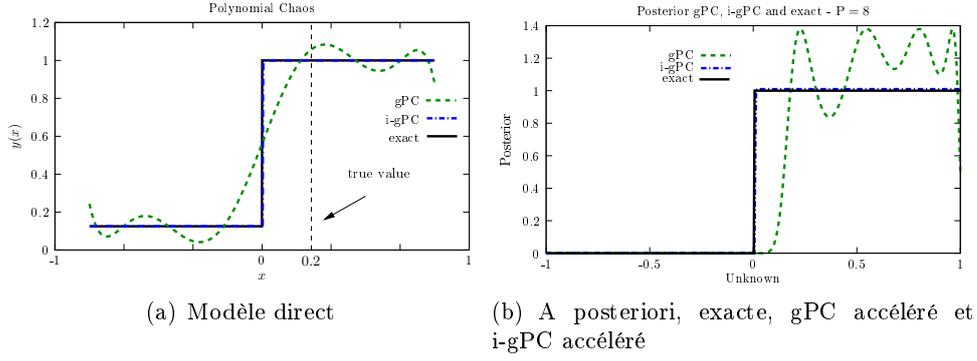


FIGURE 3.4 – Modèle direct exact, approximation gPC du modèle direct avec un degré polynomial $P = 8$, approximation i-gPC du modèle direct avec un degré polynomial $P = 8$. i-gPC capture les discontinuités à la différence de gPC.

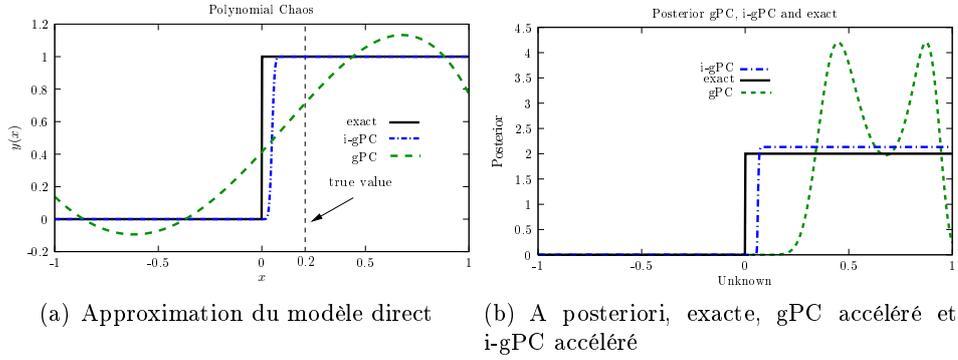


FIGURE 3.5 – Un exemple réaliste : niveau de quadrature $l = 6$, $P = 4$

3.6.2 Équation de Burgers non visqueuse

Dans cette section, nous montrons comment notre approche de l'accélération de l'inférence bayésienne se comporte en dimension stochastique plus grande.

Nous considérons la plus simple des équations hyperboliques non linéaires : l'équation de Burgers [D⁺10] :

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t, \theta) + \partial_x \frac{u^2(x, t, \theta)}{2} = 0, \\ u_0(x, \theta) = u(x, 0, \theta), \end{cases} \quad (3.80)$$

avec une condition initiale incertaine et présentant des chocs. Nous avons ici deux chocs situés à des positions incertaines dans un certain intervalle borné.

$\theta = (\theta_0, \theta_1)$ sont les paramètres inconnus liés à la condition initiale u_0 telle que

$$u_0(x, \theta) = \begin{cases} u_1, & \text{si } x \leq x_0 + \sigma_0\theta_0, \\ u_2, & \text{si } x_0 + \sigma_0\theta_0 \leq x \leq x_1 + \sigma_1\theta_1, \\ u_3, & \text{si } x \geq x_1 + \sigma_1\theta_1. \end{cases} \quad (3.81)$$

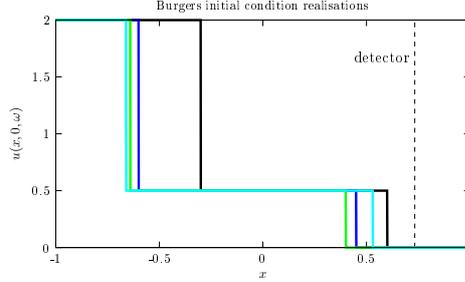


FIGURE 3.6 – Distribution de quelques réalisations de la condition initiale incertaine

Pour notre exemple, nous choisissons les valeurs des paramètres suivant : $u_1 = 2$, $u_2 = \frac{1}{2}$, $u_3 = 0$, $x_0 = -0.5$, $x_1 = 0.5$, $\sigma_0 = 0.2$ et $\sigma_1 = 0.1$. Comme précédemment, nous construisons un cas test pour lequel nous connaissons la vraie valeur de l'inconnue. Ici, il s'agit de $\theta_{true} = (0.5, 0.5)$.

Nous considérons un savoir a priori étant une distribution uniforme sur $[-1; 1]^2$.

La figure 3.6 montre quelques réalisations de la condition initiale correspondant à différentes réalisations le paramètre θ inconnu. Le système est ensuite intégré en temps. Le premier choc (à gauche sur la figure) se déplace vers la droite plus rapidement que le second (à droite) pour finalement le rattraper.

Pour ce problème, nous disposons d'une solution analytique donnée au temps t et à position x par :

$$u(x, t, \theta) = \begin{cases} u_1, & \text{si } x \leq x_0 + \sigma_0\theta_0 + v_0t \\ u_2, & \text{si } x_0 + \sigma_0\theta_0 + v_0t < x \text{ et } x \leq x_1 + \sigma_1\theta_1 + v_1t, \\ u_3, & \text{si } x > x_1 + \sigma_1\theta_1 + v_1t. \end{cases} \quad (3.82)$$

$$v_0 = (u_1 + u_2)/2 \text{ et } v_1 = (u_2 + u_3)/2.$$

Nous plaçons un détecteur au temps $t = 1$ et à la position $x = 0.75$. À ce temps à cette position, la réponse est une variable aléatoire discrète avec trois Dirac de poids u_0 , u_1 et u_2 . La figure 3.7 montre la solution analytique à $x = 0.75$ et $t = 1$ correspondant à différentes conditions initiales (c'est-à-dire différentes réalisations du paramètre aléatoire θ).

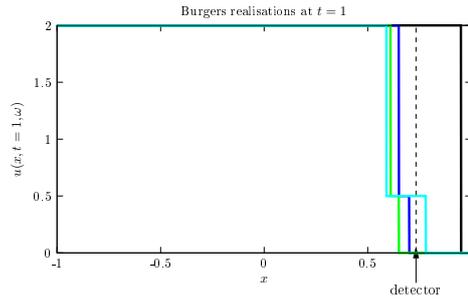


FIGURE 3.7 – Burgers réalisations à $t = 1$

Les modèles approchés gPC et i-gPC sont construits en utilisant une quadrature d'intégration 2D pleine de Clenshaw-Curtis de niveau 5, soit 289 calculs du modèle direct.

La figure 3.8 présente l'a posteriori exact, l'a posteriori construit avec l'approximation gPC et l'a posteriori construit avec l'approximation i-gPC. Nous remarquons que les discontinuités sont bien mieux saisies par i-gPC que par gPC et que les oscillations sont réduites par i-gPC (se référer à l'échelle des figures). L'approximation i-gPC permet de retrouver la distribution uniforme du paramètre dans la région de probabilité maximale tandis que gPC a tendance à d'une part mal évaluer le support des zones de probabilité non nulle : le support prédit est plus réduit que celui attendu, et à d'autre part attribuer une très faible probabilité à une valeur en fait tout à fait probable.

Supposons que les paramètres de grande probabilité correspondent à des situations de mise en défaut d'une installation. Dans ce cas, on ne voudrait pas les manquer. Cela pourrait être le cas avec gPC mais i-gPC comble ces lacunes. De plus, gPC étant très oscillant, il fait apparaître des paramètres plus probables que d'autres parmi les valeurs théoriquement les plus probables alors que en théorie elles sont toutes équiprochantes : i-gPC permet de retrouver la distribution uniforme (le plateau de l'a posteriori) attendu.

La figure 3.9 montre la convergence de l'a posteriori gPC au sens de la divergence de Kullback-Leibler et la convergence de l'approximation gPC du modèle direct au sens de la norme L^2 . Le résultat demeure cohérent avec la proposition 2.

3.6.3 Équation de Burgers non visqueuse et inférence sur 3 paramètres

Dans cette section, nous proposons un exemple en dimension stochastique plus grande. Nous considérons la même équation que dans la section précédente. À présent, on souhaite inférer sur le niveau des paliers et non plus sur leurs positions. Le paramètre inconnue

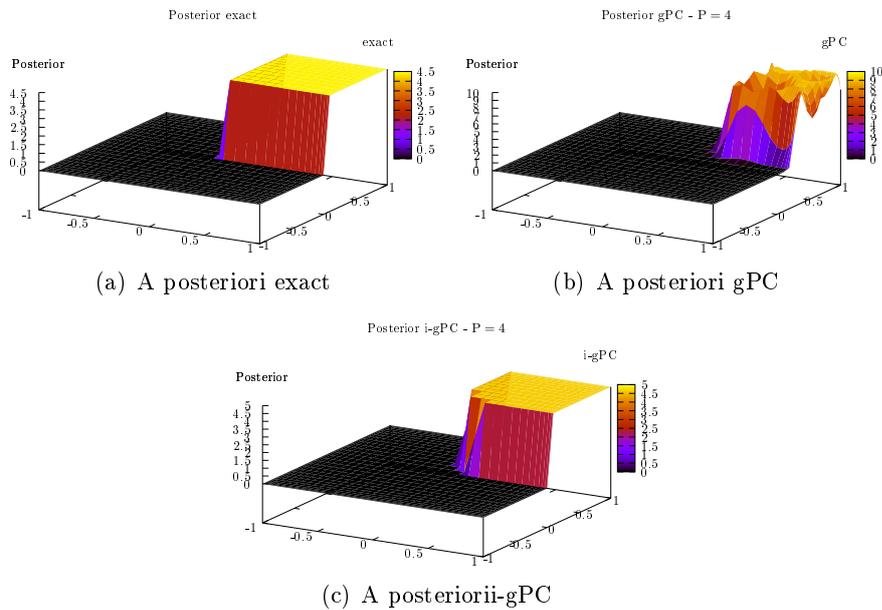


FIGURE 3.8 – A posteriori exact, a posteriori gPC et a posteriori i-gPC. $P = 4$ et la quadrature de Clenshaw-Curtis est de niveau 5. Les oscillations gPC nous donne l’illusion que certains paramètres, parmi les positifs, sont moins probables que d’autres. Au contraire, avec i-gPC, nous obtenons une région d’équi-probabilité tout comme l’a posteriori exact. De plus, i-gPC se comporte mieux sur les discontinuités.

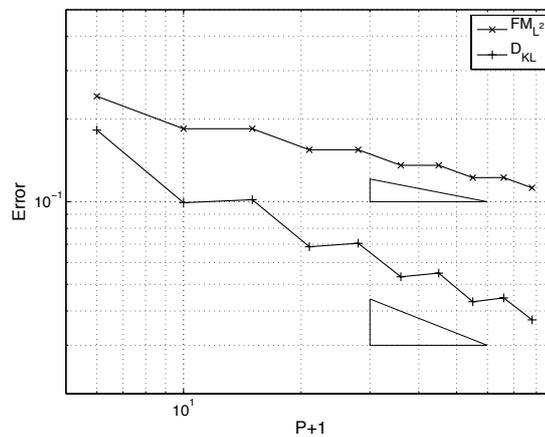


FIGURE 3.9 – Burgers non visqueux 2D : étude de convergence par rapport au degré de troncature polynomial P de l’erreur d’approximation du modèle direct $\|\tilde{u}_{n,i} - u_i\|_{L^2(\Theta)}$ (FM_{L^2}) et de la divergence de Kullback-Leibler de l’a posteriori $D_{KL}(\pi_{\text{post}} \|\tilde{\pi}_{\text{post}}^n)$ (D_{KL}).

$\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ est lié à la condition initiale de la manière suivante :

$$u_0(x, \theta) = \begin{cases} \theta_1 & \text{si } x \leq x_0 \\ \theta_2 & \text{si } x_0 < x \leq x_1 \\ \theta_3 & \text{si } x > x_1 \end{cases} \quad (3.83)$$

Pour une réalisation de la condition initiale, nous connaissons la solution analytique :

$$u_0(x, t, \theta) = \begin{cases} \text{si } t < t^* & \begin{cases} \theta_1 & \text{si } x \leq x_0 + v_0 t \\ \theta_2 & \text{si } x_0 + v_0 t < x \leq x_1 + v_1 t \\ \theta_3 & \text{si } x > x_1 + v_1 t \end{cases} \\ \text{si } t > t^* & \begin{cases} \theta_1 & \text{si } x \leq x^* + v_2(t - t^*) \\ \theta_3 & \text{sinon} \end{cases} \end{cases} \quad (3.84)$$

$v_0 = (\theta_1 + \theta_2)/2$ et $v_1 = (\theta_2 + \theta_3)/2$ sont les vitesses des chocs. Au temps t^* le choc rapide rattrape de choc le plus lent avec $t^* = 2 \frac{x_0 - x_1}{\theta_3 - \theta_1}$. Après t^* , il ne reste plus qu'un seul choc se propageant à la vitesse $v_2 = (\theta_3 + \theta_1)/2$. Ce cas test est intéressant dans la mesure où la position des détecteurs influencera les quantités sur lesquelles on pourra inférer. Par exemple, le deuxième palier ayant une durée de vie très courte ($[0; t^*]$ dépendant de θ), si les détecteurs sont hors de cet intervalle pour tout θ , on ne pourra rien dire de la valeur de θ_2 .

Comme précédemment, nous construisons un cas pour le quel nous connaissons la valeur du paramètre inconnu : $\theta = (2, 0.5, 0)$. Les observations sont artificiellement bruitées avec un bruit gaussien centré d'écart-type 0.1. L'a priori est choisi uniforme sur $[1.8; 2.2] \times [0.3; 0.7] \times [-0.2; 0.2]$.

La figure 3.10 présente quelques réalisations de la condition initiale et de la solution au temps $t = 0.8$.

Nous utilisons une quadrature 3D pleine de niveau 4 (17^3 points) avec un degré polynomial $P = 6$ dans chaque direction.

Nous considérons un problème d'inférence bayésienne avec 5 observations $x_1 = -0.75, t_1 = 0, x_2 = 0, t_2 = 0.5$ et $x_3 = 0.65, t_3 = 0.97$. La figure 3.11 présente les trois marginales de θ_1, θ_2 et θ_3 . Les barres verticales pointillées représentent les vraies valeurs des paramètres. La marginale par rapport à θ_3 montre des comportements similaires. Considérons la marginale par rapport à θ_2 . Elle ne fournit pas d'information par rapport à la vraie valeur de θ_2 . En revanche, le comportement de gPC nous laisse penser que si. Au contraire i-gPC restitue bien ce comportement. Pour la marginale de θ_1 , i-gPC apporte de nouveau un gain par rapport à gPC exactement dans les mêmes conditions.

Dans la section suivante, nous considérerons le système d'équations d'Euler pour la dynamique des fluides compressibles.

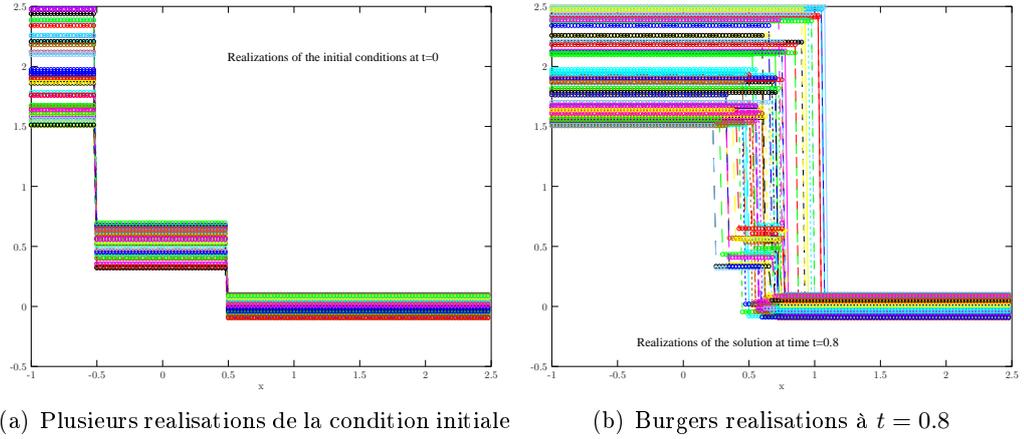


FIGURE 3.10 – Plusieurs realisations de la condition initiale et de la solution au temps final pour le problème de Burgers à trois dimensions stochastiques.

3.6.4 Système des équations d'Euler : Problème de Riemann stochastique

Dans cette section, nous inférons sur l'abscisse de la position initiale de l'interface pour un écoulement 1D pour lequel un choc rencontre l'interface entre deux fluides de densités différentes.

Il s'agit d'un problème hydrodynamique sensible aux conditions initiales pour lequel l'incertitude porte sur l'abscisse de l'interface initiale entre le fluide lourd et le fluide léger. Il s'agit d'un premier pas vers l'étude 2D de l'interface pour un tube à choc que nous traiterons dans le chapitre 4. Nous connaissons en outre sa solution analytique ce qui en facilite le traitement.

Considérons les équations d'Euler 1D suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) & = 0 \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) & = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \partial_x(\rho e u + p u) & = 0, \end{cases} \quad (3.85)$$

où la première équation correspond à la conservation de la masse, ρ est la densité de masse, u la vitesse. La deuxième équation correspond à la conservation de la quantité de mouvement, p est la pression donnée par l'équation d'état des gaz parfaits. La dernière équation correspond à la conservation de l'énergie totale, e est l'énergie spécifique totale.

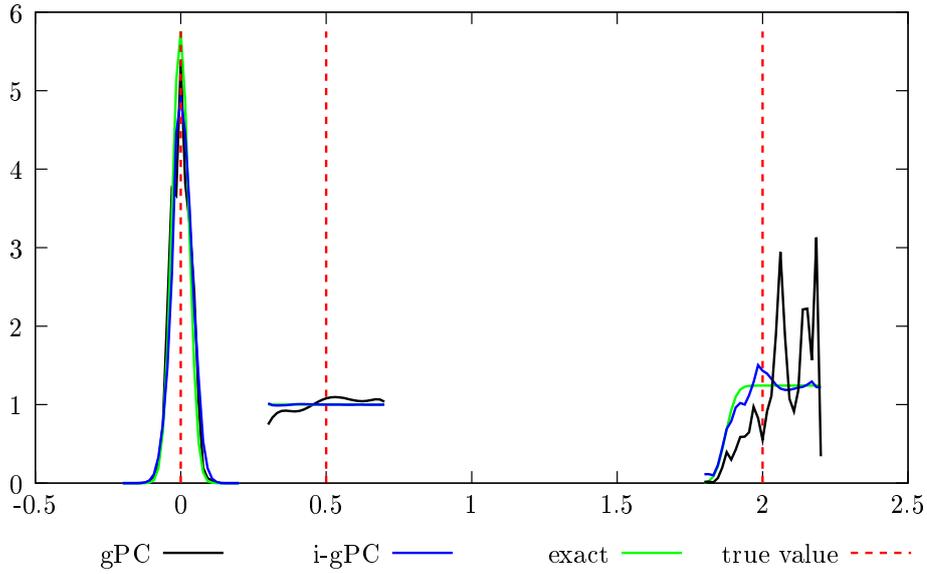


FIGURE 3.11 – 3D Burgers non visqueux cas test, marginales par rapport à θ_i

Nous considérons pour cette équation une équation d'état de type gaz parfait :

$$p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon \quad (3.86)$$

$$\varepsilon = e - \frac{u^2}{2} \quad (3.87)$$

Considérons le problème de Riemann suivant (voir par exemple [Tor97, Ser96a, Ser96b]) : initialement, le problème consiste en deux états constant, un fluide léger et un fluide lourd séparés par une interface dont l'interface est incertaine. La condition initiale est donnée par

$$u(x, 0, \theta) = \begin{cases} \rho(x, 0, \theta) & = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq \theta, \\ 0.125 & \text{sinon,} \end{cases} \\ \rho u(x, 0, \theta) & = 0, \\ \rho e(x, 0, \theta) & = \begin{cases} 2.5 & \text{si } x \leq \theta, \\ 0.25 & \text{sinon.} \end{cases} \end{cases} \quad (3.88)$$

θ correspond à l'abscisse initiale de l'interface. Sa vraie valeur est fixée à 1 et nous souhaitons retrouver cette valeur à travers une inférence bayésienne « artificiellement » bruitée.

L'a posteriori sur θ est uniforme dans $[0.95; 1.05]$ et les lois de l'erreur de mesure et de bruitage des mesures sont des gaussiennes centrées d'écart-type $\sigma = 0.1$.

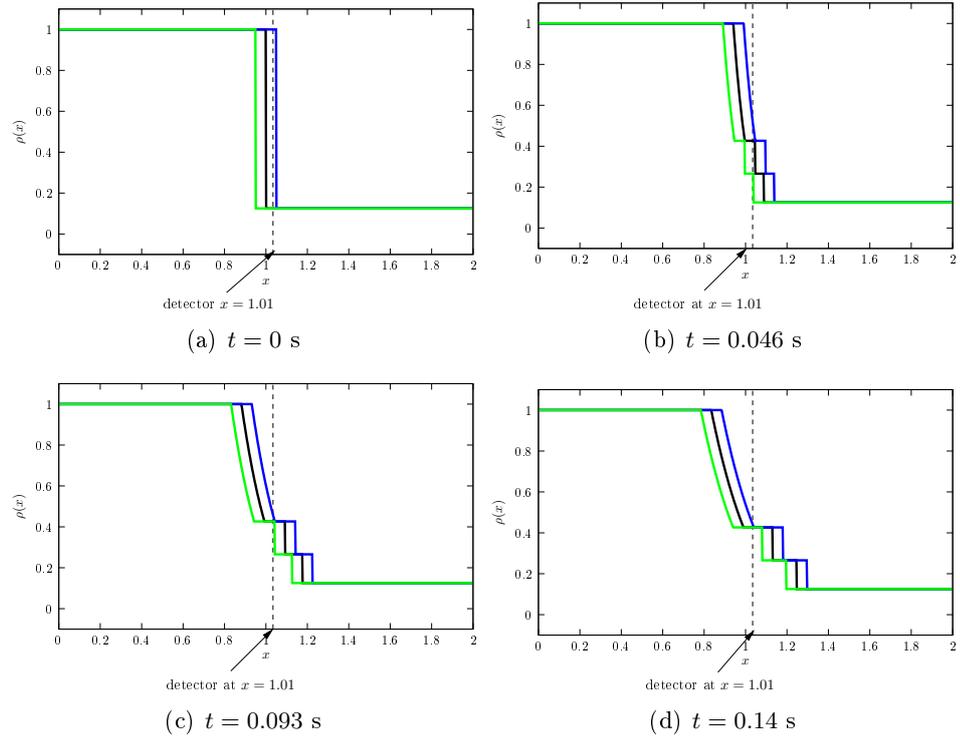


FIGURE 3.12 – Densité de masse à quatre temps différents correspondant à différentes réalisations de l’abscisse de l’interface initiale : moyenne en noir, maximum en bleu, minimum en vert.

Nous plaçons un capteur en $x = 1.01$ (pour de vraies expériences, ce capteur correspond à un appareil photo ou à un appareil équivalent, voir [PTR98, VS95] par exemple), et considérons quatre mesures aux temps 0 , $\frac{t_m}{3}$, $\frac{2t_m}{3}$ et $t_m = 0.14$.

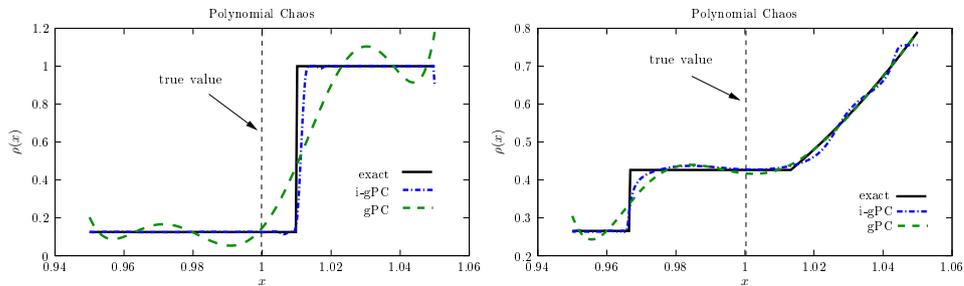
La figure 3.12 présente trois réalisations de l’a priori uniforme à différents temps avec la position du détecteur. Pour une réalisation, quand le temps s’écoule, trois ondes se développent et se propagent. Une détente dans le fluide lourd (à gauche), une discontinuité de contact au milieu et un choc dans le fluide léger (à droite).

Dans un premier temps, considérons les différentes approximations aux différents points de mesure. Nous avons recouru, pour construire les différentes approximations, à gPC non intrusif et à i-gPC avec une base polynomiale de Legendre et une quadrature d’intégration de Clenshaw-Curtis de niveau 6 (c’est-à-dire de $2^{6-1} + 1 = 33$ points) et de niveau 8 (c’est-à-dire $2^{8-1} + 1 = 129$ points) avec $P = 7$.

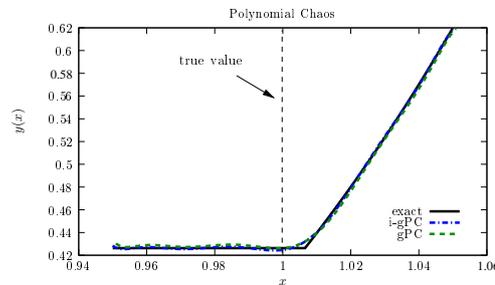
La figure 3.13 présente la solution analytique et les approximations gPC et i-gPC en trois points de mesure ($t = 0$, $t = 0.046$ et $t = 0.14$). Considérons la dynamique de

l'écoulement et la solution analytique. Nous pouvons remarquer les différents comportement de la solution analytique aux points de mesure avec le temps : la solution présente une discontinuité lorsque le choc passe à travers le détecteur, voir figure 3.13(a). Ensuite, le capteur saisit la discontinuité de contact et la détente, voir figure 3.13(c). Enfin, le capteur détecte seulement la détente, voir figure 3.13(b).

Regardons maintenant le comportement des différentes approximations aux trois points de mesure. Au point de mesure un, i-gPC permet de retrouver le comportement discontinu du choc passant à travers le détecteur. À l'inverse, l'approximation gPC génère des oscillations (figure 3.13(a)). Pour la troisième mesure, gPC et i-gPC donnent des résultats satisfaisant (figure 3.13(c)). Au niveau de la deuxième mesure, pour laquelle nous observons la discontinuité de contact et la détente, i-gPC permet un gain net au niveau de la discontinuité (figure 3.13(b)). i-gPC adapte donc l'approximation par rapport à la solution en adaptant la base polynomiale de projection.



(a) Reconstruction polynomiale mesure 1 : choc, $t = 0$ (b) Reconstruction polynomiale mesure 3 : choc et détente, $t = 0.046$

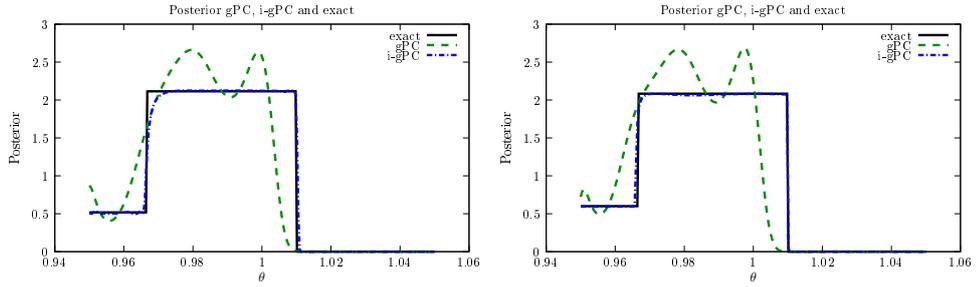


(c) Reconstruction polynomiale mesure 2 : détente, $t = 0.14$

FIGURE 3.13 – Adaptation de la base polynomiale i-gPC à la solution

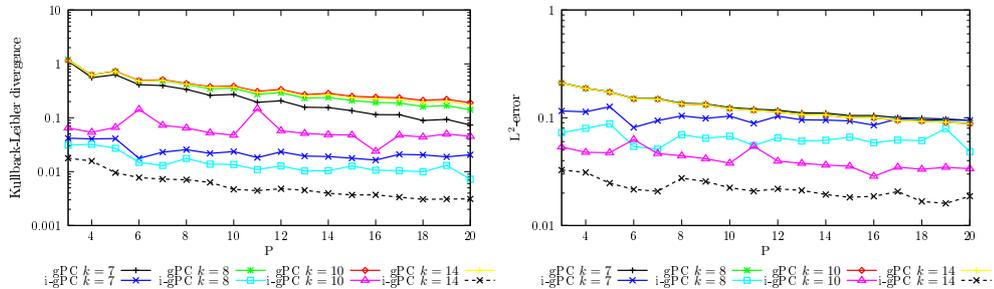
Calculons maintenant la densité de probabilité a posteriori en utilisant la formule analytique, l'accélération gPC et l'accélération i-gPC.

Les figures 3.14(a) et 3.14(b) présentent les a posteriori exacts, approché par gPC et



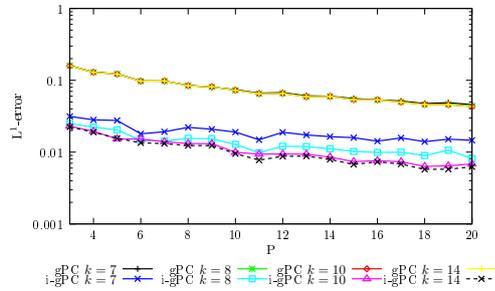
(a) Quadrature de Gauss-Legendre niveau 6 (33 points). Degré polynomial 7. (b) Quadrature de Gauss-Legendre niveau 8 (129 points). Degré polynomial 7.

FIGURE 3.14 – Problème de Riemann de la dynamique des fluides 1D : a posteriori de l'abscisse de l'interface initial accéléré par gPC, accéléré par i-gPC et exact.



(a) Divergence de Kullback-Leibler

(b) L^2 -error



(c) L^1 -error

FIGURE 3.15 – Problème de Riemann : convergence de la divergence de Kullback-Leibler, de l'erreur L^2 et de l'erreur L^1 par rapport au degré polynomial P pour différents niveaux d'intégration k de 6 à 14. Nous remarquons le comportement étrange de la divergence de Kullback-Leibler qui augmente avec le niveau d'intégration à P fixé (3.15(a)) ce qui devrait être l'inverse comme pour les erreurs L^1 et L^2 (3.15(b)). L'utilisation de i-gPC améliore la convergence de la divergence de Kullback-Leibler, de la norme L^1 et de la norme L^2 .

par i-gPC. L'a posteriori analytique révèle la présence d'un comportement discontinu à seuil. De nouveau, l'utilisation de gPC peut conduire à une mauvaise interprétation de l'inférence. Par exemple, en se référant à l'a posteriori gPC, la valeur du paramètre $\theta = 1.01$, où le détecteur est placé, n'est pas estimé pertinent alors qu'il l'est en réalité comme on peut le voir sur l'a posteriori exact. À l'inverse, l'a posteriori accéléré par i-gPC donne à cette région l'importance qu'elle mérite. De plus, de par la présence d'oscillation, l'a posteriori gPC donne à tort davantage de poids à certaines valeurs du paramètre alors que ce n'est pas le cas de i-gPC.

Finalement, la figure 3.15 présente, sur ce problème sensible, la convergence de la divergence de Kullback-Leibler, de la norme L^1 et de la norme L^2 , des approximations gPC et i-gPC par rapport au degré polynomial P pour différents nombres de points d'intégration $2^{k-1} + 1$.

Considérons la courbe de convergence de la divergence de Kullback-Leibler de l'approximation gPC (figure 3.15(a)) : lorsque le nombre de points d'intégration augmente, la vitesse de convergence diminue. Cela est dû au comportement particulier des approximations gPC pour la divergence de Kullback-Leibler sur des modèles discontinus. À P fixé, pour de telles solutions, la divergence de Kullback-Leibler peut augmenter tandis que l'erreur L^2 diminue.

Commentons maintenant le comportement de i-gPC dans le même contexte. La précision de i-gPC à P et k fixés est meilleure que celle de gPC. La conclusion est qu'il est toujours mieux d'utiliser i-gPC que gPC pour la divergence de Kullback-Leibler, la norme L^1 et la norme L^2 .

3.7 Conclusion du chapitre

Nous avons traité dans ce chapitre la résolution de problèmes inverses impliquant des modèles fortement non linéaires ou discontinus, en particulier des systèmes de loi de conservation (du type de celui gouvernant la dynamique des fluides compressibles).

Nous avons dans un premier temps lié la convergence en norme L^2 de l'approximation du modèle direct à la convergence dans la divergence de Kullback-Leibler de l'approximation de l'a posteriori. En particulier, nous avons posé les conditions pour que la convergence de l'a posteriori au sens de la divergence de Kullback-Leibler soit au moins deux fois plus rapide que la convergence du modèle direct en norme L^2 .

Nous avons alors mis en œuvre l'inférence bayésienne dans ce cadre d'approximation stochastique spectrale. Les taux de convergence théoriques ont été illustrés sur des problèmes inverses non linéaires de régularités diverses.

Nous avons en outre proposé une approche numérique efficace adaptée aux problèmes

inverses fortement non linéaires. Il s'agit de l'amélioration de l'approximation du modèle direct en utilisant l'algorithme auto adaptatif i-gPC. Nous avons montré que l'approche i-gPC pour les problèmes inverses apporte un gain par rapport à l'approche gPC et nous avons ainsi accéléré la convergence de l'inférence bayésienne. Nous avons démontré l'efficacité de l'approche i-gPC dans un contexte de quadrature numérique finie présentant peu de points.

Les résultats de ce chapitre constituent une première étape vers l'inférence bayésienne sur l'interface initiale de séparation entre deux fluides en hydrodynamique et en particulier au niveau des instabilités de Richtmyer-Meshkov et de Rayleigh-Taylor. La prochaine étape de l'étude sera de considérer le système d'Euler de la dynamique des fluides en dimension deux d'espace en regardant deux fluides séparés par une interface initiale inconnue modélisée par un processus stochastique comme dans [GDH11]. Il s'agira alors de mettre en œuvre l'approche introduite dans ce chapitre afin d'inférer sur les caractéristiques de cette interface à partir de données expérimentales d'évolutions de zones de mélanges au cours du temps.

Dans le chapitre suivant, nous considérerons le système d'équations d'Euler pour la dynamique des fluides compressibles dans une configuration de type tube à choc de Richtmyer-Meshkov.

Chapitre 4

Dynamique des gaz compressibles, propagation d'incertitudes, analyse numérique, résolution d'un problème inverse

Objectifs : Dans ce chapitre, nous présentons les principaux résultats hydrodynamiques de cette thèse. Ils concernent les expériences de tubes à chocs et les instabilités de Richtmyer-Meshkov se développant lorsqu'un fluide vient choquer un autre fluide. Nous commençons par rappeler certains résultats [JMCR04, JC06, Jao07] sur l'utilisation des méthodes perturbatives (cf. C.2) pour l'étude d'instabilités hydrodynamiques et approfondissons certains résultats de [Poe09] sur les parallèles existants entre méthodes perturbatives et méthodes par Chaos Polynomial : les solutions de systèmes d'EDP construits par approche perturbative sont limites des solutions des systèmes d'EDP obtenus par Chaos Polynomial. Ce résultat motive les développements effectués dans la suite du chapitre afin d'étendre à des régimes faiblement non linéaires voire non linéaires les résultats obtenus par approche perturbative pour l'étude d'instabilités hydrodynamiques, travaux initiés dans [GDH11]. L'objectif de ce chapitre est également de pousser les études effectuées dans [GDH11] ayant à disposition une puissance de calcul plus importante que précédemment (passage de Tera10 à Tera100) ainsi que de nouveaux outils mathématiques (résolution de problème inverse par inférence bayésienne) et algorithmes (i-gPC par exemple). Nous présentons alors des résultats sur un problème de propagation d'incertitudes hydrodynamique 2D (tube à choc) avant de terminer sur une étude de calibration bayésienne sur les paramètres de l'interface initiale du tube à choc en nous comparant à des résultats expérimentaux [PTR98, VS95]. •

4.1 Parallèle entre méthodes perturbatives et méthodes par Chaos Polynomial généralisé

Objectifs : Dans cette section, nous effectuons un parallèle entre les méthodes perturbatives (cf. annexe C.2) et les méthodes de propagation d'incertitudes par Chaos Polynomial généralisé. L'idée est inspirée des travaux de [JMCR04, JC06, Jao07] sur les méthodes par perturbations. •

Nous commençons par un bref rappel sur les travaux de [JMCR04, JC06, Jao07].

4.1.1 Motivations : rappels sur les travaux de S. Jaouen

Objectifs : Nous présentons les travaux de [JMCR04, JC06, Jao07] sur la prise en compte de perturbations tridimensionnelles d'un écoulement de base monodimensionnel. Ces travaux sont basées sur une approche par perturbations (cf. annexe C.2). monodimensionnel. •

Dans [JMCR04, JC06, Jao07], les auteurs appliquent l'approche par perturbations décrite annexe C.2 au système d'Euler en coordonnées lagrangiennes en trois dimensions d'espace. Sous certaines hypothèses, rappelées plus tard dans le document, il en résulte *un modèle prenant en compte des perturbations transverses d'un écoulement unidirectionnel prédictif dans la phase linéaire de l'écoulement et considérablement moins coûteux qu'une simulation tridimensionnelle*. Nous rappelons brièvement le principe d'application de la méthode avant d'aborder un parallèle entre méthodes perturbatives et par gPC. Ces résultats sont appliqués au système d'Euler en coordonnées eulériennes.

Soit le système d'Euler en coordonnées cartésiennes, en trois dimensions d'espace :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u_x) + \partial_y(\rho u_y) + \partial_z(\rho u_z) & = 0, \\ \partial_t(\rho u_x) + \partial_x(\rho u_x^2 + p) + \partial_y(\rho u_x u_y) + \partial_z(\rho u_x u_z) & = 0, \\ \partial_t(\rho u_y) + \partial_x(\rho u_y u_x) + \partial_y(\rho u_y^2 + p) + \partial_z(\rho u_y u_z) & = 0, \\ \partial_t(\rho u_z) + \partial_x(\rho u_x u_z) + \partial_y(\rho u_z u_y) + \partial_z(\rho u_z^2 + p) & = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \partial_x(\rho u_x e + p u_x) + \partial_y(\rho u_y e + p u_y) + \partial_z(\rho u_z e + p u_z) & = 0, \end{cases} \quad (4.1)$$

où ρ désigne la densité de masse, le vecteur vitesse est noté $u = (u_x, u_y, u_z)^t$ et e désigne la densité d'énergie totale : $e = \varepsilon + \frac{\|u\|^2}{2}$, où ε est l'énergie interne spécifique du fluide. Le système est fermé par la donnée d'une loi de pression $p(\rho, \varepsilon)$. On considère une fermeture de type gaz parfait : $p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon$. On suppose les inconnues du système dépendant de x, y, z, t ainsi que d'une variable aléatoire Ξ modélisant l'incertitude, par exemple sur la condition initiale.

On propose d'appliquer la méthode par perturbation au système (4.1). On note $U = (\rho, \rho u_x, \rho u_y, \rho u_z, \rho e)^t$ et on considère une perturbation infinitésimale de U autour d'un écoulement dit de base :

$$U^\varepsilon(x, y, z, t) = U^0(x, y, z, t) + \varepsilon U^1(x, y, z, t) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (4.2)$$

Le paramètre ε désigne une perturbation de la variable aléatoire d'entrée Ξ autour de sa moyenne (cf. annexe C.2).

L'écoulement satisfait par U^0 est appelé *écoulement de base*. L'écoulement satisfait par U^1 est l'*écoulement linéarisé*. Les vecteurs U^0 et U^1 satisfont deux nouveaux systèmes d'équations : ces systèmes sont obtenus par identification des coefficients de ε en considérant que U^ε satisfait (4.1).

Nous faisons l'hypothèse que l'écoulement de base est unidirectionnel selon l'axe des abscisses :

$$U^0(x, y, z, t) = U^0(x, t) = \begin{pmatrix} \rho^0 \\ \rho^0 u_x^0 \\ \rho^0 u_y^0 \\ \rho^0 u_z^0 \\ \rho^0 e^0 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Ceci implique que $u_y = \text{constante} = u_z$: on suppose, sans perte en généralité, que les vitesses transverses pour l'écoulement de base sont nulles : $u_y^0 = \text{constante} = 0 = u_z^0$. Le système satisfait par un tel U^0 est donné par ¹

$$\begin{cases} \partial_t \rho^0 + \partial_x(\rho^0 u_x^0) & = 0, \\ \partial_t(\rho^0 u_x^0) + \partial_x(\rho^0 (u_x^0)^2 + p^0) & = 0, \\ \partial_y p^0 & = 0, \\ \partial_z p^0 & = 0, \\ \partial_t(\rho^0 e^0) + \partial_x(\rho^0 u_x^0 e^0 + p^0 u_x^0) & = 0. \end{cases} \quad (4.4)$$

Le système est fermé en définissant la loi de pression satisfaite par p^0 : au premier ordre

$$p^0 = (\gamma - 1)\rho^0 \left(e^0 + \frac{(u_x^0)^2}{2} \right). \quad (4.5)$$

Ceci détermine complètement l'écoulement de base.

Nous nous intéressons maintenant à l'écoulement linéarisé U^1 . On souhaite prendre en compte des perturbations transverses de U^0 , par conséquent

$$U^1 = U^1(x, y, z, t). \quad (4.6)$$

1. En remarquant qu'au premier ordre $(fg)^0 = f^0 g^0$, pour toutes fonctions f et g .

En considérant que $U^0 = U^0(x, t)$, que $u_y^0 = 0 = u_z^0$ et après calculs, l'écoulement linéarisé satisfait le système

$$\begin{cases} \partial_t \rho^1 + \partial_x(\rho u)^1 + \rho^0(\partial_y v^1 + \partial_z w^1) & = 0, \\ \partial_t(\rho u)^1 + u^0 \partial_x(\rho u)^1 + u^1 \partial_x(\rho u)^0 + \partial_x p^1 + \rho^0 u^0(\partial_y v^1 + \partial_z w^1) & = 0, \\ \partial_t(\rho v)^1 + u^0 \partial_x(\rho v)^1 + \partial_y p^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho w)^1 + u^0 \partial_x(\rho w)^1 + \partial_z p^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho e)^1 + u^0 \partial_x(\rho e)^1 + u^1 \partial_x(\rho e)^0 + \partial_x(pu)^1 + (\rho^0 e^0 + p^0)(\partial_y v^1 + \partial_z w^1) & = 0, \end{cases} \quad (4.7)$$

où on aura utilisé le fait que $(fg)^1 = f^1 g^0 + f^0 g^1$ pour toutes fonctions f et g (développement au premier ordre). On introduit la divergence transverse de la vitesse linéarisée

$$\Omega^1 = \partial_y u_y^1 + \partial_z u_z^1. \quad (4.8)$$

En dérivant les troisième et quatrième équations de (4.7) par rapport à, respectivement, y et z et en sommant les deux équations obtenues, on obtient l'équation satisfaite par la divergence transverse Ω_1 . Le système satisfait par U^1 s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t \rho^1 + \partial_x(\rho u_x)^1 + \rho^0 \Omega^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho u_x)^1 + \partial_x(\rho u_x^2)^1 + \partial_x p^1 + \rho^0 u_x^0 \Omega^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho^0 \Omega^1) + \partial_x(\rho^0 u_x^0 \Omega^1) + \Delta_{\perp} p^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho e)^1 + \partial_x(\rho u_x e)^1 + \partial_x(pu_x)^1 + (\rho^0 e^0 + p^0) \Omega^1 & = 0, \end{cases} \quad (4.9)$$

où Δ_{\perp} désigne le Laplacien transverse défini par $\Delta_{\perp} \cdot = \partial_{yy}^2 \cdot + \partial_{zz}^2 \cdot$. On note $(P_{k,l})_{k,l \in \mathbb{Z}}$ les composantes de la base de Fourier dans les directions transverses à l'écoulement : $\forall k, l \in \mathbb{Z}$

$$P_{k,l}(y, z) = e^{i(ky + lz)}. \quad (4.10)$$

et on considère le développement sur cette base de U^0 et U^1 . Chaque quantité linéarisée s'écrit

$$f^1(x, y, z, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} f_{k,l}^1(x, t) P_{k,l}(y, z), \quad (4.11)$$

avec $\forall k, l \in \mathbb{Z}$

$$f_{k,l}^1(x, t) = \int \int f^1(x, y, z, t) P_{k,l}(y, z) dy dz. \quad (4.12)$$

Considérons un mode (k, l) quelconque de l'écoulement linéarisé, alors pour toute fonction, on a $f^1(x, y, z, t) = f_{k,l}^1(x, t) P_{k,l}(y, z)$ et en particulier, en notant $\omega = \sqrt{k^2 + l^2}$, on obtient $\Delta_{\perp} f^1 = -(k^2 + l^2) f^1 = -\omega^2 f^1$.

Considérons les solutions de (4.4)-(4.9) selon le mode associé à la pulsation ω , ces solutions

satisfont (4.4) ainsi que (4.13) donnée par

$$\begin{cases} \partial_t \rho^1 + \partial_x(\rho u_x)^1 + \rho^0 \Omega^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho u_x)^1 + \partial_x(\rho u_x^2)^1 + \partial_x p^1 + \rho^0 u_x^0 \Omega^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho^0 \Omega^1) + \partial_x(\rho^0 u_x^0 \Omega^1) - \omega^2 p^1 & = 0, \\ \partial_t(\rho e)^1 + \partial_x(\rho u_x e)^1 + \partial_x(p u_x)^1 + (\rho^0 e^0 + p^0) \Omega^1 & = 0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Le système (4.4)-(4.13) est fermé par les loi de pression linéarisée (4.5) et (4.14) donnée par²

$$p^1 = (\gamma - 1) \left(\rho^1(e^0 + \frac{(u_x^0)^2}{2}) + \rho^0(e^1 + u_x^0 u_x^1 + u_y^0 u_y^1 + u_z^0 u_z^1) \right). \quad (4.14)$$

La composante modale est donc solution d'un système 1-D non homogène, donné par (4.4)-(4.13) et fermé par (4.5) et (4.14). L'étude de la stabilité linéaire de la solution U^ε vis-à-vis de perturbations longitudinales et transverses revient à résoudre le système défini par (4.4)-(4.13) pour plusieurs modes transverses et à caractériser le comportement asymptotique dans le temps des solutions correspondantes.

L'avantage d'un tel modèle est d'éviter des simulations directes en trois dimensions d'espace pour étudier un écoulement monodimensionnel perturbé transversalement.

Le modèle obtenu présente le défaut de n'être que faiblement hyperbolique (cf. annexe C.2) : la stabilité en temps des solutions n'est donc pas assurée et les résultats ne sont valides que dans la limite linéaire. Toutefois, dans ce régime linéaire, l'approche par perturbation présente l'intérêt d'être prédictif et peu coûteux. Dans la section qui suit, nous montrons que l'approche par perturbation est limite de l'approche par Chaos Polynomial, i.e. la seconde approche est plus générale que la première. Les sections qui suivent ont pour objectif d'explorer la possibilité de construire un modèle plus général (régime faiblement non linéaire voire non linéaire) grâce à gPC pour un surcoût contrôlé.

4.1.2 Approche par perturbations comme limite de l'approche polynomiale

Dans cette section, nous comparons les approches par perturbations et par Chaos Polynomial. L'objectif est de montrer que la première est limite de la seconde sous certaines conditions sur les paramètres incertains. Pour cela, nous comparons les méthodes sur un système de lois de conservation quelconque d'écriture générale

$$\partial_t u + \partial_x f(u) = 0, u(x, t, \Xi) \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n, \quad (4.15)$$

où Ξ est une variable aléatoire modélisant l'incertitude sur les conditions initiales (par exemple).

2. Linéarisation au premier ordre de la loi de pression de type gaz parfait.

Par souci de simplicité, nous considérons un système de lois de conservation 1-D : les résultats présentés dans cette section pourront être immédiatement étendus aux systèmes de lois de bilan en plusieurs dimensions d'espace.

Approche par Perturbations

On rappelle dans un premier temps les équations satisfaites dans le cadre de l'approche par perturbations. Les méthodes par perturbations consistent à considérer des perturbations infinitésimales de l'écoulement autour de la valeur moyenne des variables aléatoires d'entrée (cf. annexe C.2). Le vecteur d'inconnus u solution du système de lois de conservation (4.16) est approché par son développement de Taylor tronqué à l'ordre P autour de la valeur moyenne des paramètres d'entrée :

$$u(\xi) \approx \bar{u}^P(\xi) = \bar{u}_0 + \sum_{i=1}^P \frac{\bar{u}_i \xi^i}{i!}, \quad (4.16)$$

où ξ désigne une perturbation de la variable aléatoire d'entrée Ξ autour de sa moyenne μ , $\xi = \Xi - \mu$. La validité de l'approche par perturbation dépend directement de la variable aléatoire considérée : $\xi = \Xi - \mu \sim 0 \implies \sigma_{\Xi}^2 = \text{Var}(\Xi) \sim 0$.

Les équations satisfaites par $\bar{U} = (\bar{u}_0, \dots, \bar{u}_P)^t$, avec $\bar{u}_k = \frac{\partial^k u}{\partial \xi^k}(x, t, \mu), \forall k \in \{0, \dots, P\}$, s'obtiennent en substituant l'expression du développement de Taylor dans le système de lois de conservation (4.16) et en identifiant les coefficients des puissances de ξ . L'objectif de cette section est de mettre en évidence l'expression de la k^{ieme} équation du système tronqué obtenu. Nous nous intéressons dans un premier temps au flux de ce système :

$$f(\bar{u}^P(\xi)) = f\left(\bar{u}_0 + \sum_{i=1}^P \frac{\bar{u}_i \xi^i}{i!}\right), \quad (4.17)$$

$$f(\bar{u}^P(\xi)) = f(\bar{u}_0) + \sum_{j=1}^P \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) \left(\sum_{i=1}^P \frac{\bar{u}_i \xi^i}{i!}\right)^j. \quad (4.18)$$

En utilisant la formule du multinôme de Newton³, l'expression du flux devient

$$f(\bar{u}^P(\xi)) = f(\bar{u}_0) + \sum_{j=1}^P \sum_{|\vec{k}|=j} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i \xi^i}{i!} \right)^{k_i}, \quad (4.20)$$

$$f(\bar{u}^P(\xi)) = f(\bar{u}_0) + \sum_{j=1}^P \sum_{|\vec{k}|=j} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \xi^{Pj - (P-1)k_1 - (P-2)k_2 - \dots - k_{P-1}}, \quad (4.21)$$

$$f(\bar{u}^P(\xi)) = f(\bar{u}_0) + \sum_{t=1}^{P^2} \xi^t \underbrace{\sum_{j=1}^P \sum_{|\vec{k}|=j}}_{j, \vec{k}/t = Pj - (P-1)k_1 - (P-2)k_2 - \dots - k_{P-1}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i}. \quad (4.22)$$

Par identification des coefficients de $(\xi^n)_{n \in \{0, \dots, P\}}$, on en déduit les composantes du flux du système tronqué issu de la méthode par perturbations : on note $\forall n \in \{0, \dots, P\}$,

$$f_n(\bar{u}_0, \dots, \bar{u}_P) = \underbrace{\sum_{j=1}^P \sum_{|\vec{k}|=j}}_{j, \vec{k}/n = Pj - (P-1)k_1 - (P-2)k_2 - \dots - k_{P-1}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i}. \quad (4.23)$$

Le système tronqué obtenu par application de l'approche par perturbations est donné

3. Formule du multinôme de Newton :

$$(x_1 + \dots + x_P)^j = \sum_{|\vec{k}|=j} C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P x_i^{k_i}, \quad (4.19)$$

où $\vec{k} = (k_1, \dots, k_P)$ est le vecteur des puissances des x_i , $|\vec{k}| = \sum_{i=1}^P k_i$ et $C_{\vec{k}}^j = \frac{n!}{\prod_{i=1}^P k_i!}$.

par

$$\partial_t \bar{u}_0 + \partial_x f(\bar{u}_0) = 0, \quad (4.24)$$

$$\partial_t \frac{\bar{u}_n}{n!} + \partial_x \left(\sum_{j=1}^P \underbrace{\sum_{|\vec{k}|=j}^P}_{j, \vec{k}/n=Pj-(P-1)k_1-(P-2)k_2-\dots-k_{P-1}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \right) = 0, \quad (4.25)$$

$$\partial_t \frac{\bar{u}_P}{P!} + \partial_x \left(\sum_{j=1}^P \underbrace{\sum_{|\vec{k}|=j}^P}_{j, \vec{k}/P=Pj-(P-1)k_1-(P-2)k_2-\dots-k_{P-1}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \right) = 0. \quad (4.26)$$

Dans la section qui suit, nous nous intéressons au système tronqué issu de l'application de la méthode par Chaos Polynomial. L'objectif est de comparer l'expression obtenue au système (4.24).

Approche par Chaos Polynomial

Dans le cadre de l'approche par Chaos Polynomial, la solution est approchée par le développement polynomial

$$u(\xi) \approx u^P(\xi) = \sum_{i=0}^P u_i \phi_i^d(\xi), \quad (4.27)$$

où $(\phi_i^d)_{i \in \{0..P\}}$ est la base de Chaos Polynomial associée à la variable aléatoire Ξ suivant une loi uniforme⁴ sur un intervalle de la forme $[-d, d]$. La base de polynômes utilisée est la base des polynômes de Legendre orthonormée : la dépendance en d de la base polynomiale est rendue explicite.

Cherchons l'expression du système tronqué issu de sG-gPC⁵. Les développements sont effectués de manière formelle en supposant de bonnes propriétés aux systèmes tronqués

4. Le fait de supposer la loi de Ξ uniforme permet de simplifier les calculs qui suivront, le discours ne perd rien en généralité puisqu'il est toujours possible de se ramener au cas uniforme par application du théorème de la mesure image.

5. Nous dénotons par sG-gPC l'approche gPC intrusive, cf. [Poe09] par exemple

obtenus (nous supposons qu'ils sont bien posés, existence et unicité des solutions malgré le fait que ces propriétés ne soient pas immédiates en pratique, cf. [Poe09] par exemple).

Le système tronqué est obtenu comme suit : on injecte le développement gPC dans le système d'EDP d'intérêt (ici un système de lois de conservation général) puis on multiplie (4.16) par $(\phi_k^d)_{k \in \{0, \dots, P\}}$ et on intègre l'équation obtenue contre la mesure $d\mathcal{P}$. Le système obtenu est le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u_0 + \partial_x \int f \left(\sum_{i=0}^P u_i \phi_i^d \right) \phi_0^d d\mathcal{P} = 0, \\ \dots \\ \partial_t u_k + \partial_x \int f \left(\sum_{i=0}^P u_i \phi_i^d \right) \phi_k^d d\mathcal{P} = 0, \\ \dots \\ \partial_t u_P + \partial_x \int f \left(\sum_{i=0}^P u_i \phi_i^d \right) \phi_P^d d\mathcal{P} = 0. \end{cases} \quad (4.28)$$

L'objet de la sous-section qui suit est de faire, de manière formelle, un rapprochement entre les systèmes (4.24) et (4.28).

Approche par perturbation comme limite de l'approche polynomiale

Nous commençons par énoncer le résultat suivant :

Propriété 4.1 Avec les notations des sous-sections précédentes, les solutions $(\bar{u}_k)_{k \in \{0, \dots, P\}}$ du système (4.24) sont limites des solutions $(u_k^d)_{k \in \{0, \dots, P\}}$ du système (4.28) lorsque $d \rightarrow 0$.

En terme de problème de quantification d'incertitudes, la propriété précédente signifie en fait que la méthode par perturbations est équivalente à la méthode polynomiale dans la limite d'une variance de la variable aléatoire d'entrée Ξ tendant vers 0⁶. Le résultat peut paraître immédiat. Il est en revanche moins évident lorsque l'on compare les expressions (4.24) et (4.28) : la preuve qui suit permet de comprendre le passage d'une approche à l'autre.

Le résultat est nécessaire pour pouvoir aborder le problème de perturbation 3-D d'un écoulement 1-D décrit précédemment sous ce nouvel angle avec pour objectif d'étendre le domaine de validité au régime faiblement non linéaire voire non linéaire.

La preuve apporte une information intéressante : elle met en évidence la correspondance entre les deux types de solutions dans la limite $d \rightarrow 0$. Cette correspondance permettra la comparaison des deux types de solutions.

6. Le paramètre d est directement lié à la variance de Ξ , cf. section B.

Preuve. Introduisons la matrice

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} a_{0,0}^d & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{1,0}^d & a_{1,1}^d & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{P,0}^d & a_{P,1}^d & \cdots & a_{P,P-1}^d & a_{P,P}^d \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

matrice des coefficients des polynômes de Legendre orthonormés sur $[-d, d]$, $(\phi_i^d)_{i \in \{0, \dots, P\}}$, dans la base des $(\xi^i)_{i \in \{0, \dots, P\}}$:

$$\forall i \in \{0, \dots, P\}, \text{ on a } \phi_i^d(\xi) = \sum_{j=0}^i a_{i,j}^d \xi^j \text{ (la matrice est triangulaire inférieure)}. \quad (4.30)$$

On note \mathbb{B} l'inverse de \mathbb{A} ⁷, on a donc $\forall (i, j) \in \{0, \dots, P\}^2$, $\sum_{k=0}^P a_{i,k} b_{k,j} = \delta_{i,j}$.

Notons alors que si $(\phi_i(\xi))_{i \in \{0, \dots, P\}}$ est la base des polynômes de Legendre orthonormée par rapport à la mesure uniforme $\mathcal{P}(\xi) = \frac{1}{2} \mathcal{I}_{[-1,1]}(\xi)$, alors $(\phi_i^d(\xi) = \phi_i(\xi d))_{i \in \{0, \dots, P\}}$ est la base polynomiale associée à la variable aléatoire Ξ sur $[-d; d]$.

On effectue le changement de base dans (4.28) en remarquant que, de l'égalité

$$\bar{u}_0 + \sum_{i=1}^P \frac{\bar{u}_i \xi^i}{i!} = \sum_{i=0}^P u_i \phi_i^d(\xi), \quad (4.31)$$

il est possible de tirer la relation

$$\forall i \in \{0, \dots, P\}, \frac{\bar{u}_i}{i!} = \sum_{j=0}^P a_{j,i} u_j, \quad (4.32)$$

qui s'écrit encore

$$\forall i \in \{0, \dots, P\}, u_i = \sum_{j=0}^P b_{j,i} \frac{\bar{u}_j}{j!}. \quad (4.33)$$

7. La matrice \mathbb{B} existe car \mathbb{A} est une matrice de passage d'une base à une autre.

Ainsi, en introduisant les expressions de (4.33) dans (4.28), on obtient $\forall n \in \{0, \dots, P\}$:

$$\partial_t \left(\sum_{j=0}^P b_{n,j} \frac{\bar{u}_j}{j!} \right) + \partial_x \int f \left(\sum_{i=0}^P \sum_{j=0}^P b_{j,i} \frac{\bar{u}_j}{j!} \sum_{l=0}^P a_{i,l} (\xi d)^l \right) \phi_n^d(\xi) d\mathcal{P}(\xi) = 0, \quad (4.34)$$

$$\partial_t \left(\sum_{j=0}^P b_{n,j} \frac{\bar{u}_j}{j!} \right) + \partial_x \int f \left(\sum_{j=0}^P \sum_{l=0}^P \frac{\bar{u}_j (\xi d)^l}{j!} \underbrace{\sum_{i=0}^P b_{j,i} a_{i,l}}_{\delta_{j,l}} \right) \phi_n^d(\xi) d\mathcal{P}(\xi) = 0, \quad (4.35)$$

$$\partial_t \left(\sum_{j=0}^P b_{n,j} \frac{\bar{u}_j}{j!} \right) + \partial_x \int f \left(\underbrace{\sum_{j=0}^P \frac{\bar{u}_j (\xi d)^j}{j!}}_{\bar{u}^0 + \mathcal{O}(d)} \right) \phi_n^d(\xi) d\mathcal{P}(\xi) = 0. \quad (4.36)$$

Après un développement limité à l'ordre P en supposant que $d \rightarrow 0$ et l'utilisation du multinôme de Newton (4.19), on obtient $\forall n \in \{0, \dots, P\}$:

$$\begin{aligned} & \partial_t \left(\sum_{j=0}^P b_{n,j} \frac{\bar{u}_j}{j!} \right) \\ & + \partial_x \int \left(f(\bar{u}_0) + \sum_{t=1}^{P^2} (\xi d)^t \underbrace{\sum_{j=1}^P \sum_{\substack{\vec{k}=j \\ j, \vec{k}/t = Pj - \dots - k_{P-1}}}^P}_{\substack{j, \vec{k}/t = Pj - \dots - k_{P-1}}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \right) \phi_n^d(\xi) d\mathcal{P}(\xi) = 0 \end{aligned} \quad (4.37)$$

L'écriture des $(\xi^t)_{t \in \{0, \dots, P\}}$ dans la base des $(\phi_t)_{t \in \{0, \dots, P\}}$ renvoie

$$\forall t \in \{0, \dots, P\}, (d\xi)^t = \sum_{l=0}^P b_{l,t} \phi_l^d(\xi). \quad (4.38)$$

Son utilisation dans l'expression (4.37) renvoie $\forall n \in \{0, \dots, P\}$:

$$\begin{aligned}
& \partial_t \left(\sum_{j=0}^P b_{n,j} \frac{\bar{u}_j}{j!} \right) \\
& + \partial_x \left(f(\bar{u}_0) + \sum_{t=1}^{P^2} \sum_{l=0}^P b_{l,t} \underbrace{\int \phi_l^d(\xi) \phi_n^d(\xi) d\mathcal{P}(\xi)}_{\delta_{l,n}} \sum_{\substack{j=1 \\ |\vec{k}|=j}}^P \sum_{j, \vec{k}/t=Pj-\dots-k_{P-1}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \right) = 0, \\
& \partial_t \left(\sum_{j=0}^P b_{n,j} \frac{\bar{u}_j}{j!} \right) \\
& + \partial_x \left(f(\bar{u}_0) + \sum_{t=1}^{P^2} b_{n,t} \sum_{\substack{j=1 \\ |\vec{k}|=j}}^P \sum_{j, \vec{k}/t=Pj-\dots-k_{P-1}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \right) = 0.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Pour conclure il suffit de remarquer que $b_{i,j} = 0$ si $i > j$ et que $b_{i,j} = \frac{\tilde{b}_{i,j}}{d^j}$ si $i \leq j$; la première assertion découle du fait que la matrice \mathbb{A}^t ainsi que son inverse \mathbb{B}^t sont triangulaires supérieures. La seconde assertion exige l'étude de la base $(\phi_i(d\xi))_{i \in \{0, \dots, P\}}$. Un simple calcul montre que $a_{i,j} = \tilde{a}_{i,j} d^j$ ainsi que $a_{i,i} = d^i = \frac{1}{b_{i,i}} \neq 0 \forall i \in \{0, \dots, P\}$. On obtient le résultat en effectuant l'inversion de \mathbb{A}^t et en étudiant les coefficients de proche en proche. Le système devient alors $\forall n \in \{0, \dots, P\}$:

$$\begin{aligned}
& \partial_t \left(\tilde{b}_{n,n} \frac{1}{d^n} \frac{\bar{u}_n}{n!} + \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{b}_{n,j} \frac{1}{d^j} \frac{\bar{u}_j}{j!} \right) \\
& + \partial_x \left(f(\bar{u}_0) + \sum_{t=0}^n \tilde{b}_{n,t} \frac{1}{d^t} \sum_{\substack{j=1 \\ |\vec{k}|=j}}^P \sum_{j, \vec{k}/t=Pj-\dots-k_{P-1}} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \right) = 0.
\end{aligned} \tag{4.40}$$

En mettant $\tilde{b}_{n,n} \frac{1}{d^n} \neq 0$ en facteur dans les $P + 1$ équations de (4.40) et en passant à la

limite $d \rightarrow 0$ on retrouve le système

$$\forall n \in \{0, \dots, P\}, \quad \partial_t \frac{\bar{u}_n}{n!} + \partial_x \left(\sum_{\substack{j=1 \\ \underbrace{|\vec{k}|=j}_{j, \vec{k}/n=Pj-\dots-k_{P-1}}}^P \sum_{|\vec{k}|=j} \frac{1}{j!} f^{(j)}(\bar{u}_0) C_{\vec{k}}^j \prod_{i=1}^P \left(\frac{\bar{u}_i}{i!} \right)^{k_i} \right) = 0, \quad (4.41)$$

correspondant au système obtenu par application de l'approche par perturbations. 

La démonstration présente deux intérêts :

- elle permet d'établir le lien entre les écoulements de base et linéarisé obtenus par approche par perturbations et les écoulements moyen et la fluctuation : elle montre en particulier qu'en théorie, les résultats issus de la méthode par perturbations peuvent être obtenus par l'approche polynomiale dans la limite $d \rightarrow 0$. Le lien entre les approches est effectué par le changement de base, relations (4.32) et (4.33). Les deux approches sont brièvement comparées figures 4.1 et 4.2 dans le cadre de l'équation de Burgers et de l'équation d'Euler.
- L'approche présente également un intérêt du point de vue modélisation : l'intervalle $[-d, d]$ correspond au support de la perturbation initiale et la recherche des termes d'ordres supérieurs dans le passage à la limite dans le développement polynomial du système étudié (termes incluent dans $\mathcal{O}(d)$) permet de dériver de nouveaux modèles correctifs (modèles de saturation). Cet aspect ne sera pas plus développé dans ce document mais fera l'objet de travaux futurs.

Dans la section qui suit nous vérifions numériquement la précédente propriété.

4.1.3 Quelques résultats numériques encourageants

Dans cette brève section, nous retrouvons numériquement les résultats obtenus par méthodes perturbatives par application des méthodes par Chaos polynomial dans le régime où la variance de l'incertitudes sur les paramètres d'entrée tend vers zéro.

Nous présentons les résultats sur l'équation scalaire de Burgers dans un premier temps puis sur le système d'Euler en configuration tube à choc 1D (adaption 1D du tube à choc de Richtmyer-Meshkov).

Équation de Burgers 1D non visqueuse

Nous considérons l'équation de Burgers 1D non visqueuse et incertaine suivante :

$$\partial_t u(x, t, \Xi) + \partial_x \frac{u^2(x, t, \Xi)}{2} = 0. \quad (4.42)$$

Nous supposons que l'incertitude porte sur la condition initiale $u^0(x, \Xi)$, donnée par

$$u^0(x, \Xi) = u^0(x - \sigma \Xi), \quad (4.43)$$

où la condition initiale est composée d'un palier en 1 jusqu'à x_0 , d'une partie affine entre x_0 et x_1 et d'un palier en 0 après x_1 :

$$u^0(x) = \mathbb{I}_{[0, x_0]}(x) + \mathbb{I}_{[x_1, L]}(x) + \left(\frac{1}{x_1 - x_0}(x) + \frac{x_1 - x_0}{x_1 - x_0} \right) \mathbb{I}_{[x_0, x_1]}(x). \quad (4.44)$$

avec $x_0 = 0.75$, $x_1 = 1.5$, $\Xi \sim \mathcal{U}([-1, 1])$ et $\sigma = 10^{-6} \approx 0$.

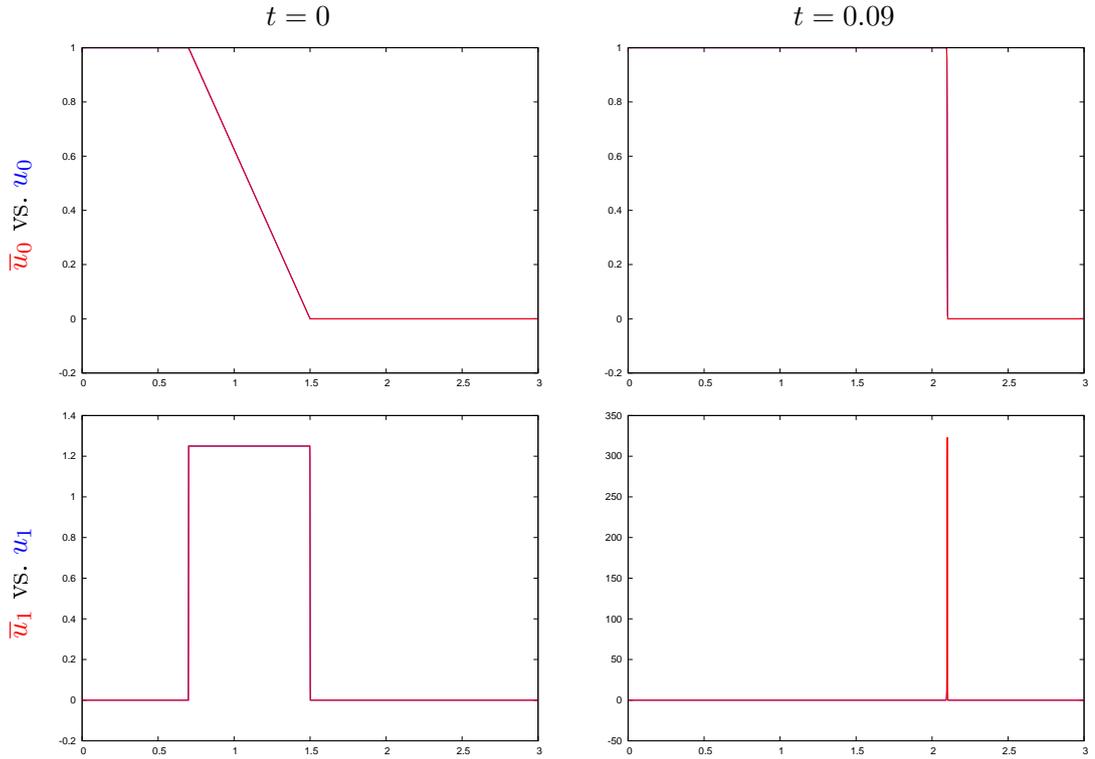


FIGURE 4.1 – Comparaison des méthodes par perturbations et par Chaos Polynomial sur l'équation de Burgers avec $\sigma = d = 10^{-6}$. Les écoulements de base (ligne du haut) et linéarisé (ligne du bas) sont comparés pour les deux méthodes. Les simulations sont effectuées avec 2000 mailles. Le temps final est $t = 0.09$. Un schéma de Roe est utilisé pour l'approche par Chaos Polynomial. Concernant l'approche par perturbations, le schéma de Roe classique est utilisé pour l'écoulement de base, un décentrage amont est utilisé pour l'écoulement linéarisé.

On s'intéresse à la résolution des systèmes tronqués de Burgers à l'ordre 1 par méthode perturbative ainsi que par Chaos Polynomial (pour des raisons de concisions, ces systèmes ne sont pas rappelés ici). La colonne de gauche de la figure 4.1 montre la concordance

des conditions initiales pour les deux systèmes tronqués pour les modes u_0 (gPC) et \bar{u}_0 (perturbation)⁸ ainsi que pour les modes u_1 (gPC) et \bar{u}_1 (perturbation)⁹.

La solution pour ce problème est connue (méthode des caractéristiques) et nous décrivons brièvement son comportement au cours du temps : la partie affine pour le mode 0 se raidit petit à petit jusqu'à la formation d'un choc qui une fois formé se propagera à la vitesse $\frac{1}{2}$. Concernant le mode d'ordre 1, initialement, son profil est un échelon de Heaviside entre x_0 et x_1 . A mesure que le temps passe, le support de l'échelon rétrécit (son support est l'intervalle $[x_0, x_1]$) et le niveau de son palier augmente jusqu'à la formation d'une masse de Dirac au temps de formation du choc : à partir du temps de formation du choc, le Dirac se propage à la vitesse du choc $\frac{1}{2}$ et son poids reste inchangé au cours du temps.

La colonne de droite de la figure 4.1 superpose les deux solutions obtenues par résolution des deux systèmes tronqués à l'ordre 1 au temps $t = 0.09$ après le temps de formation du choc, temps à partir duquel l'écoulement de base (perturbation)/moyen (gPC) présente une discontinuité. Les deux approches donnent des résultats similaires. Le choc pour les composantes u_0 et \bar{u}_0 sont capturés ainsi que la masse de Dirac en la position du choc pour les modes d'ordre 1.

Système d'Euler 1D

Nous considérons le système d'Euler 1D et incertain suivant fermé par une équation d'état de type gaz parfait :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t \rho u + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0, \\ \partial_t \rho e + \partial_x(\rho u e + p u) = 0, \\ p = (\gamma - 1)\rho \varepsilon, \\ \varepsilon = e - \frac{1}{2}u^2. \end{cases}$$

Nous supposons une fois encore que l'incertitude porte sur la condition initiale $U^0(x, \Xi)$, donnée par

$$U^0(x, \Xi) = U^0(x - \sigma \Xi),$$

où la condition initiale est composée d'une interface dont la position est initialement incertaine translatée par une variable aléatoire uniforme $\Xi \sim \mathcal{U}([-1, 1])$. Ce cas-test est très inspiré du tube à choc de Richtmyer-Meshkov bidimensionnel mettant en jeu un choc se propageant dans un fluide et venant frapper une interface entre un fluide lourd et un fluide léger. Lorsque cette interface est perturbée, une instabilité hydrodynamique se développe. Le cas-test 1-D résolu dans cette section est inspiré de celui-ci. La condition

8. ligne du haut colonne de gauche

9. ligne du bas colonne de gauche

initiale $U^0 = (\rho(x, 0), u(x, 0), p(x, 0))^t$ est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(x, 0) = \begin{cases} 4, & \text{si } x \leq x_{interface} \\ 1, & \text{si } x_{interface} \leq x \leq x_{choc} \\ \frac{2\gamma - \gamma s + s}{2\gamma - \gamma s - s}, & \text{si } x \geq x_{choc} \end{cases} \\ u(x, 0) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \leq x_{interface} \\ 0, & \text{si } x_{interface} \leq x \leq x_{choc} \\ -\sqrt{\frac{s(\rho-1)}{\rho(1-s)}}, & \text{si } x \geq x_{choc} \end{cases} \\ p(x, 0) = \begin{cases} 1, & \text{si } x \leq x_{interface} \\ 1, & \text{si } x_{interface} \leq x \leq x_{choc} \\ \frac{1}{1-s}, & \text{si } x \geq x_{choc} \end{cases} \end{array} \right. \quad (4.45)$$

A gauche de l'interface incertaine, un fluide lourd est au repos. A droite de l'interface incertaine, un choc est initialisé en $x_{choc} = 0.7$ dans le fluide léger. Pour $t > 0$ le choc se propage en direction de l'interface. Le coefficient s désigne la vitesse lagrangienne de ce choc. En pratique on prend $s = 0.5$ et $\gamma = 1.4$. L'incertitude sur l'interface est modélisée par une variable aléatoire : $x_{interface} = 0.5 + \sigma \Xi$ où Ξ suit une loi uniforme sur $[-1, 1]$ ¹⁰ et où σ est notre paramètre tendant vers zéro dans la limite du régime perturbatif.

Pour une réalisation de la variable aléatoire, le cas-test comporte deux phases : la première correspond à l'arrivée du choc sur l'interface, la seconde à l'interaction du choc et de l'interface résultant en la formation de deux ondes de choc se propageant dans les deux directions. La première onde de choc est transmise dans le fluide lourd, la seconde est réfléchiée dans le fluide léger.

Initialement, seule la densité de masse est incertaine puisque de part et d'autre de l'interface, les vitesses et pressions sont égales.

Au moment où le choc frappe l'interface, deux ondes apparaissent et se propagent dans les fluides lourd et léger : l'incertitude semble partagée entre les trois ondes correspondant aux moyennes des chocs transmis et réfléchis et à la discontinuité de contact. La zone d'incertitude au voisinage de l'interface est comprimée tandis que la variance de la densité y est plus que doublée.

La figure 4.2 colonne de gauche superpose les conditions initiales en densité de masse pour les moments d'ordre 0 et 1 pour les deux approches, perturbative et gPC. La condition initiale sur le moment d'ordre 1 est modélisée par une masse de Dirac en la position de l'interface. La figure 4.2 colonne de droite superpose les profils de densité de masse pour les moments d'ordre 0 et 1 pour les deux approches, perturbative et gPC au temps $t = 0.34$. Les profils pour les modes d'ordre 0 sont parfaitement superposés avec, de gauche à droite, les choc transmis dans le fluide lourd, l'interface et le choc réfléchi dans

¹⁰. Nous avons précisé les conditions initiales en densité de masse, vitesse et pression pour ce cas-test : en pratique, l'initialisation est faite sur les moments polynomiaux des variables conservatives : $\rho_0, \dots, \rho_P, (\rho u)_0, \dots, (\rho u)_P, (\rho e)_0, \dots, (\rho e)_P$.

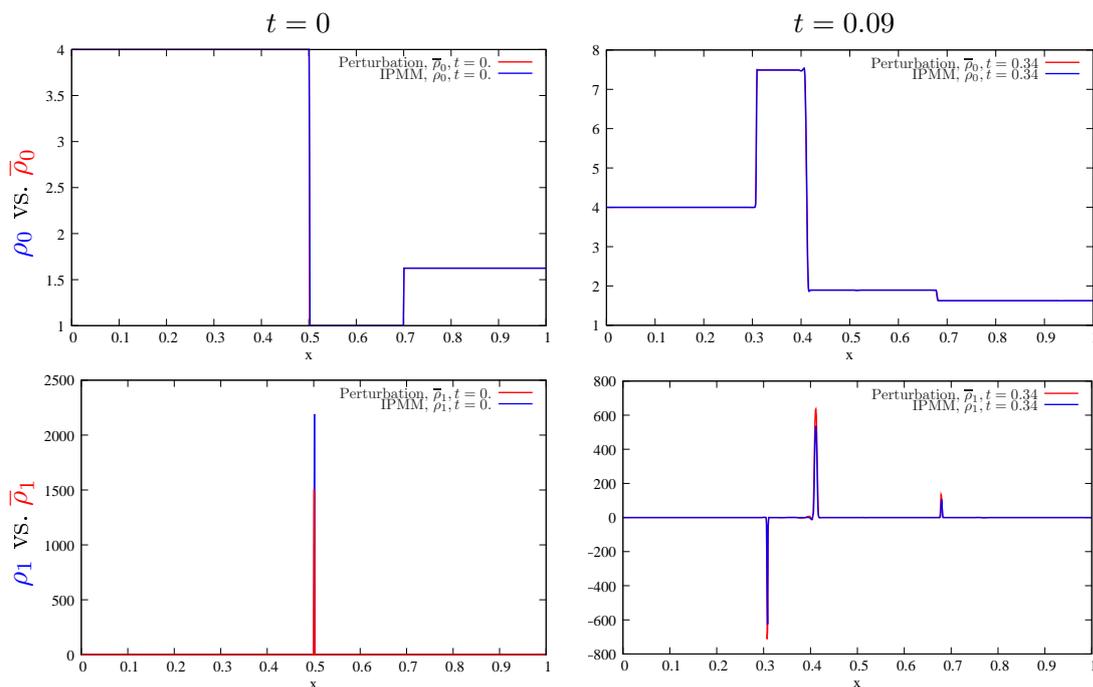


FIGURE 4.2 – Comparaison des méthodes par perturbations et par Chaos Polynomial sur le problème de Richtmyer-Meshkov avec $\sigma = d = 10^{-6}$. Les écoulements de base (ligne du haut) et les écoulements linéarisés sont comparés pour les deux méthodes. Les simulations sont effectuées avec 1000 mailles. Le temps final est $t = 0.34$. Les schémas numériques utilisés pour les deux approches sont les schémas Lagrange+Projection GAIA d'ordre 3 de l'annexe [JP06].

le fluide léger. Les profils de densité linéarisés sont présentés figure 4.2 en bas à droite. L'incertitude infinitésimale initiale se propage aux trois précédentes ondes sous forme de trois masses de Dirac en les trois positions des ondes. Une fois encore, cette figure nous permet de démontrer numériquement que l'approche gPC permet de généraliser l'approche perturbative puisque permettant de restituer ses résultats dans la limite où la variance de l'incertitude initiale tend vers zéro.

A partir des années 60, plusieurs travaux ont proposé de développer une théorie de la turbulence impliquant une approximation des phénomènes basée sur des développements en polynôme d'Hermite (i.e. approximation basée sur le Chaos Polynomial et non le Chaos Polynomial généralisé qui a été introduit en 2002) du champ de vitesse [MS64, OB67, CC70, Cho74]. Ces tentatives ont échoué car la dimension de l'espace d'approximation n'était jamais suffisante pour conserver un spectre d'énergie cinétique convergé. C'est le problème du "long-time integration" [GvdSVK10b, MB10, MB12] pour lequel la complexité (et le contenu spectral) de la solution ne cesse de croître au cours du temps au fur et à mesure que la phase du système devient de plus en plus incer-

taine dû au caractère non-local et non-linéaire de la turbulence. Certaines améliorations numériques ont été proposées qui retardent l'apparition du problème mais ne le règle pas. Nous avons montré, que dans ce cas la décomposition directe des champs turbulents instantanés sur des temps longs était impossible et qu'il fallait plutôt quantifier l'incertitude des moments statistiques (moyennes temporelles ou spatiales) des quantités turbulentes [LMS07, MSL11]. Il serait très intéressant de tester si les méthodes UQ actuelles les plus performantes en termes de réduction de coût de calcul et d'adaptativité aux phénomènes non-linéaires et aux grandes dimensions sont capables de répondre au challenge de l'in-stationnarité (quitte à devoir parfois recalculer les prédictions par le biais d'assimilation de données expérimentales [MH12] ou autres techniques). Les études qui suivent constituent selon nous un premier (petit) pas vers cette finalité.

Dans la suite de ce chapitre, nous proposons d'étudier cette généralisation par gPC de l'approche perturbative sur un problème de tube à choc de Richtmyer-Meshkov non simplifié, en deux dimensions d'espace. En ce sens, l'étude qui suit approfondit l'étude effectuée dans [Poe09]. Nous souhaitons explorer l'utilisation de gPC pour aborder des régimes autres que linéaires pour l'étude de perturbations stochastiques de l'interface initiale entre les deux fluides dans le cadre d'un écoulement de type Richtmyer-Meshkov.

4.2 Modélisation physique de l'écoulement 2D en configuration tube à choc de Richtmyer-Meshkov

Objectifs : Les résultats précédents nous encouragent à explorer les possibilités que procure le Chaos Polynomial généralisé pour l'étude de régimes faiblement non linéaires voire non linéaires pour l'étude d'instabilités hydrodynamiques. Pour mieux comprendre ces possibilités, nous abordons et effectuons une étude complète à rapprocher de celle effectuée dans [YZL⁺06a] sur un problème de propagation d'incertitudes hydrodynamique 2D (tube à choc). •

Les sections qui suivent sont classiques en analyse d'incertitudes, cf. chapitre 1 ou [Sud07], elles correspondent à la description du modèle d'intérêt (système d'Euler en 2D), du dispositif expérimental que nous souhaitons simuler (description des conditions initiales, conditions de bords...), des paramètres incertains de l'étude (incertitude initiale sur l'interface entre les fluides) et des observables d'intérêts (la taille des instabilités en fonction du temps). Nous terminons par l'interprétation des résultats numériques obtenus.

4.2.1 Le modèle : système des équations d'Euler en 2 dimensions d'espace

La physique de l'écoulement est modélisée par un modèle hydrodynamique compressible. Nous cherchons à expliquer les observations sur le mélange des fluides par les phénomènes hydrodynamiques seuls, comme dans [YZL⁺06a]. Ainsi, nous ne prenons pas en compte des phénomènes visqueux. Nous n'utiliserons donc pas l'équation de Navier-Stokes mais le système d'équations d'Euler en deux dimensions d'espace accompagné de l'équation d'état des gaz parfait pour fermer le système.

Les équations d'Euler correspondent à la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Notons \mathcal{T} le domaine du tube et T le temps maximal de l'étude. Le système d'Euler avec équation d'état gaz parfait est le suivant : $\forall(x, y) \in \mathcal{T}, \forall t \in]0; T[$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u_x) + \partial_y(\rho u_y) \\ \partial_t(\rho u_x) + \partial_x(\rho u_x^2 + p) + \partial_y(\rho u_x u_y) \\ \partial_t(\rho u_y) + \partial_x(\rho u_x u_y) + \partial_y(\rho u_y^2 + p) \\ \partial_t(\rho e) + \partial_x(\rho u_x e + p u_x) + \partial_y(\rho u_y e + p u_y) \\ \text{fermeture} \end{array} \right. = 0 \quad (\text{E})$$

$$\begin{array}{l} p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon \\ \varepsilon = e - \frac{1}{2}(u_x^2 + u_y^2). \end{array}$$

où ρ désigne la densité de masse, p la pression, e l'énergie, u_x la vitesse selon x et u_y la vitesse selon y .

Nous considérons les caractéristiques physiques des fluides, et celles du choc, comme fixées et déterminées. En revanche, la forme géométrique de l'interface est mal connue. Ce sera la source d'incertitude du modèle et elle sera modélisée par un processus stochastique. Nous présentons le dispositif d'intérêt dans la sous-section qui suit.

Le système (E) ne présente pas de solution analytique. Il faut donc passer par une approximation numérique de la solution. Nous utilisons un schéma numérique de type volumes finies Lagrange+projection [EC07] schéma GAIA d'ordre trois [JP06] avec directions alternées [EC07]. Nous ne donnons pas ici davantage de précision sur les schémas numériques employés et nous renvoyons le lecteur intéressé aux références citées. Le code utilisé a été développé au CEA-DAM, il s'agit du code HERA, cf. [Jou05].

4.2.2 La configuration d'intérêt : le tube à choc de Richmyer-Meshkov

Le tube à choc de Richmyer-Meshkov correspond à un dispositif expérimental permettant d'étudier l'évolution d'instabilités d'interface séparant deux fluides soumis à une impulsion (choc). Le tube est séparé en deux parties par une membrane. D'un côté le

tube contient un fluide lourd, et de l'autre il contient un fluide léger. À $t = 0$, le diaphragme fermant le tube à gauche est rompu et un choc se propage dans le dispositif vers l'interface entre les deux fluides (vers la droite sur la figure 4.3).

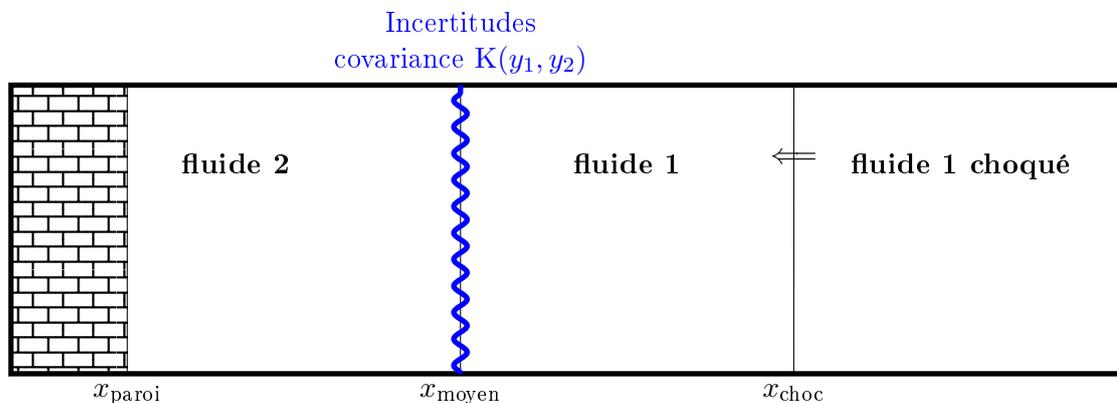
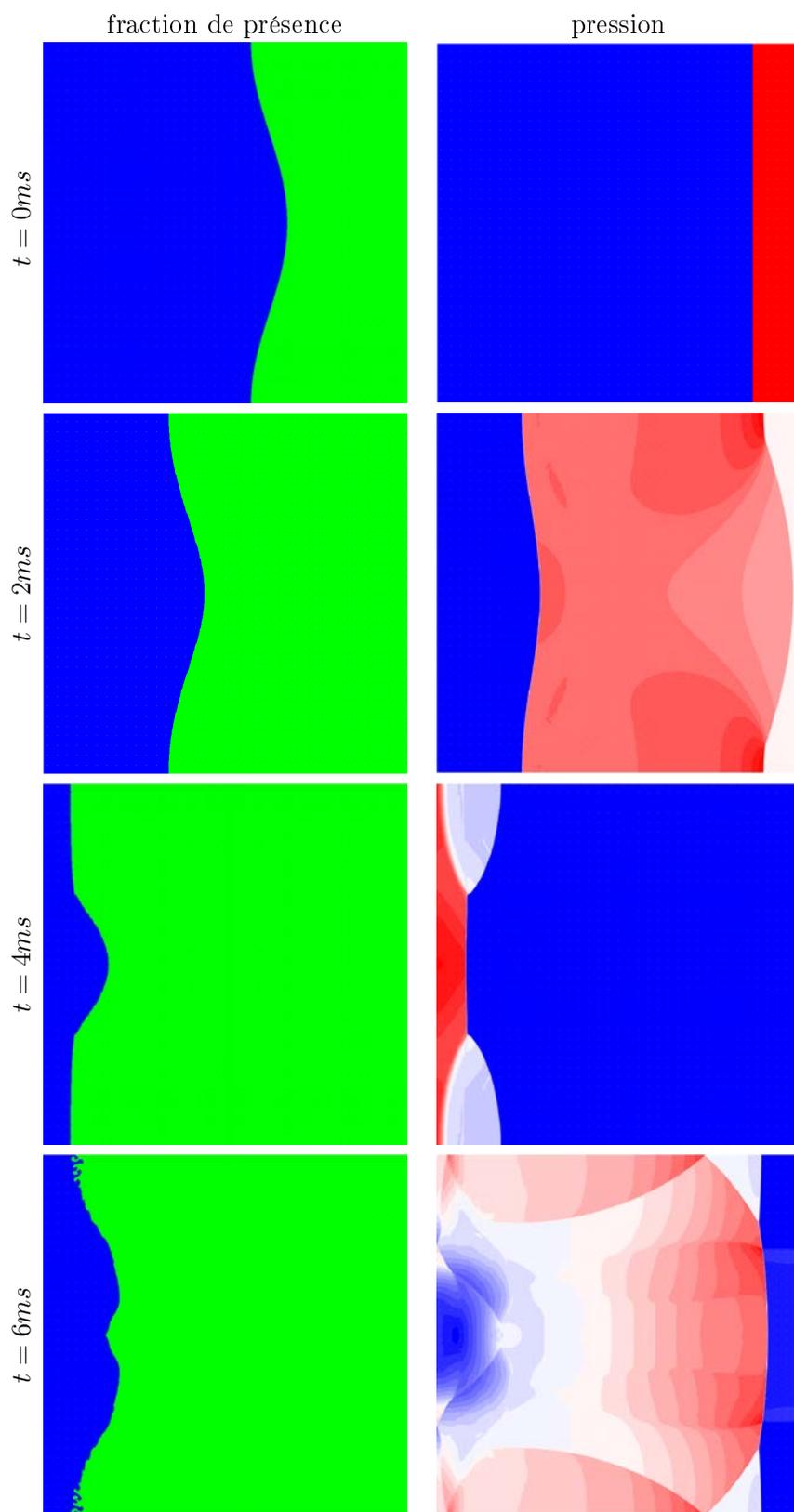


FIGURE 4.3 – Tube à choc : le choc se propage dans le fluide 1 en venant de la gauche vers la droite, frappe l'interface entre le fluide 1 et le fluide 2. Il tape ensuite le mur au fond du tube et revient vers la gauche ce qui conduit à un mélange entre les deux fluides plus ou moins prononcé en fonction de la forme de l'interface initiale entre les deux fluides.

Il s'agit d'une expérience importante en physique des fluides et d'un cas test numérique pour éprouver le comportement des méthodes numériques sur les solutions discontinues.

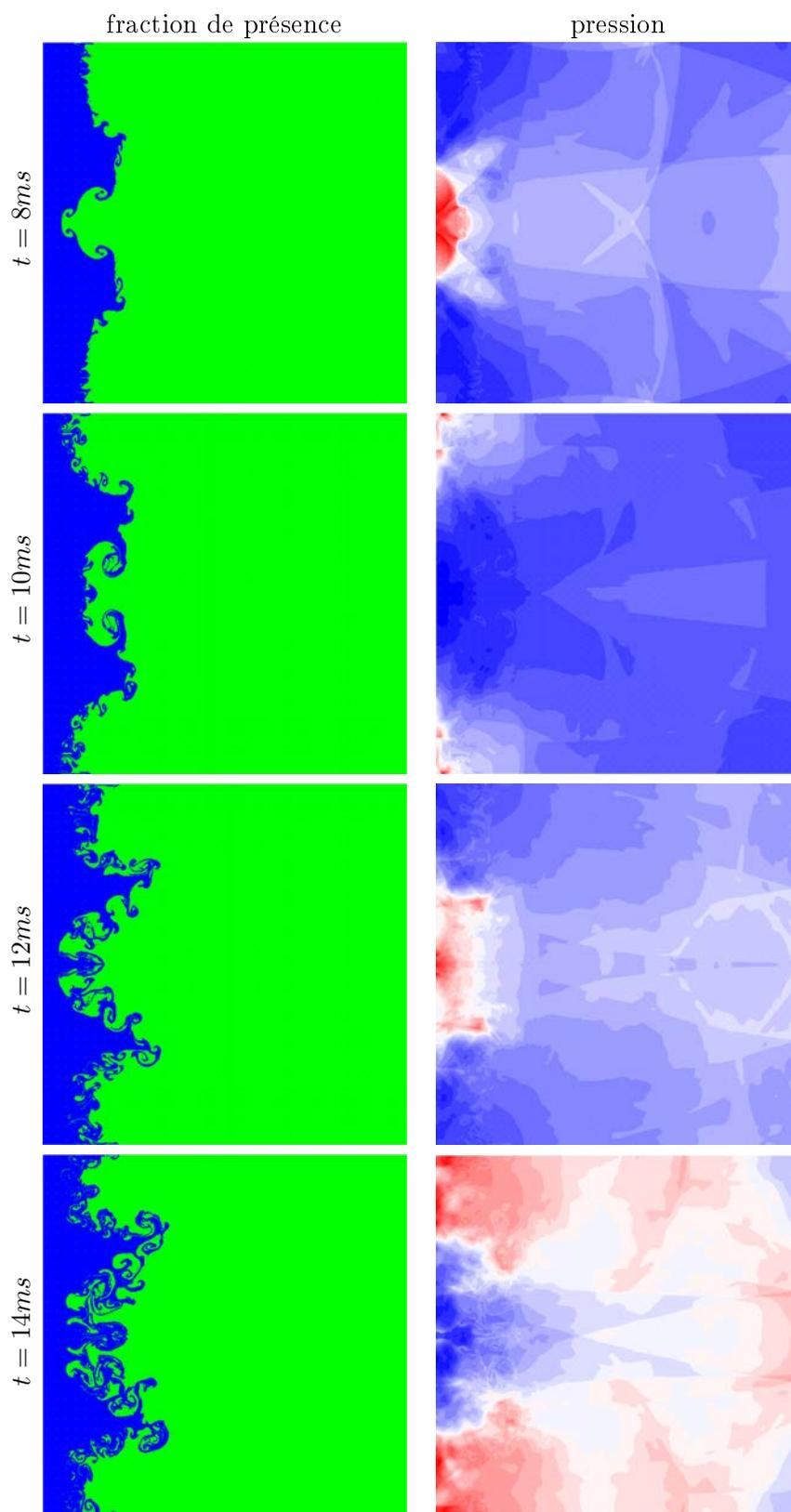
Ses conditions aux limites seront ouvertes à gauche, de type mur à droite (le mur sur lequel se réfléchit le choc) et de type milieu infini en haut et en bas.

Les conditions initiales portent d'une part sur les caractéristiques physiques des deux fluides, les caractéristiques du choc, du tube et la forme géométrique de l'interface entre les deux fluides et sont résumées dans la figure 4.6. Ces conditions initiales ont été déduites des données présentées dans [VS95].



117

FIGURE 4.4 – Exemple de développement de l'instabilité de Richmyer-Meshkov au cours du temps : interface initiale $x_{interface}(y) = 0.05 \cos(2\pi y)$, maillage 800×800 . Gauche : fraction de présence entre les deux matériaux • SF₆, • AIR. Droite : carte de pression (permet de visualiser la position du choc qui frappe l'interface).



118

FIGURE 4.5 – Exemple de développement de l'instabilité de Richmyer-Meshkov au cours du temps : interface initiale $x_{interface}(y) = 0.05 \cos(2\pi y)$, maillage 800×800 . Gauche : fraction de présence entre les deux matériaux • SF₆, • AIR. Droite : carte de pression (permet de visualiser la position du choc qui frappe l'interface).

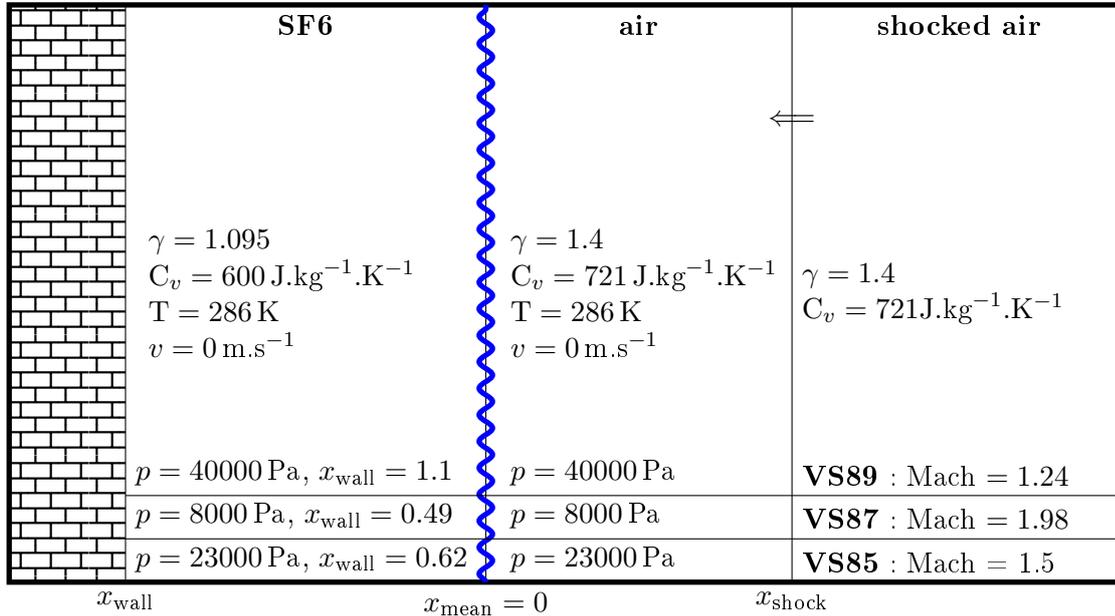


FIGURE 4.6 – Tube à choc avec les conditions initiales de VS85.

Nous présentons ici un exemple de simulation (déterministe i.e. sans incertitudes) : les figures 4.4 et 4.5 montrent l'évolution au cours du temps de la fraction de présence des deux fluides – et donc la forme de l'interface entre les deux fluides – ainsi que la carte de pression dans le fluide – et donc la position et la forme des chocs successifs frappant l'interface – à plusieurs temps. Initialement, l'interface a la forme d'un simple cosinus $x_{\text{interface}}(y) = 0.05 \cos(2\pi y)$ et est au repos. Un choc initialisé dans l'air (fluide de droite dans les simulations de la figure 4.4 en haut à droite) vient la frapper et la mettre en vitesse. L'interface est alors projetée contre la paroi gauche du tube tout en se comprimant sous l'effet du passage du choc (figure 4.4 temps 0ms, 2ms et 4ms). Le choc transmis au travers de l'interface est déformé mais également réfléchi sur la paroi de gauche et vient refrappé l'interface dans le sens SF₆ → Air provoquant alors l'apparition d'enroulement, d'instabilités hydrodynamiques, dont les modes continuent de se développer aux passages des chocs successifs (de forces décroissantes) rebondissant entre l'interface et la paroi.

Dans la suite, nous supposons des perturbations stochastiques (incertitudes) autour d'un état moyen de l'interface initiale. L'objet de la section qui suit est de caractériser probabilistiquement ces perturbations.

4.2.3 Paramètres d'entrée incertains : l'interface initiale

Nous nous intéressons à l'étude d'incertitudes sur la position initiale de l'interface entre les deux fluides dans le dispositif décrit précédemment. Dans ce sens, nous ferons l'hypothèse que toutes les autres sources d'incertitudes (sur les équations d'état des gaz, sur les conditions aux limites, sur le modèle...) impliquent des modifications négligeables sur les observables d'intérêt relativement aux incertitudes sur la condition initiale.

Nous modélisons l'incertitude portant sur l'interface initiale par un processus stochastique. Un processus stochastique est une collection de variable aléatoire indexée par, dans notre cas, la variable spatiale y .

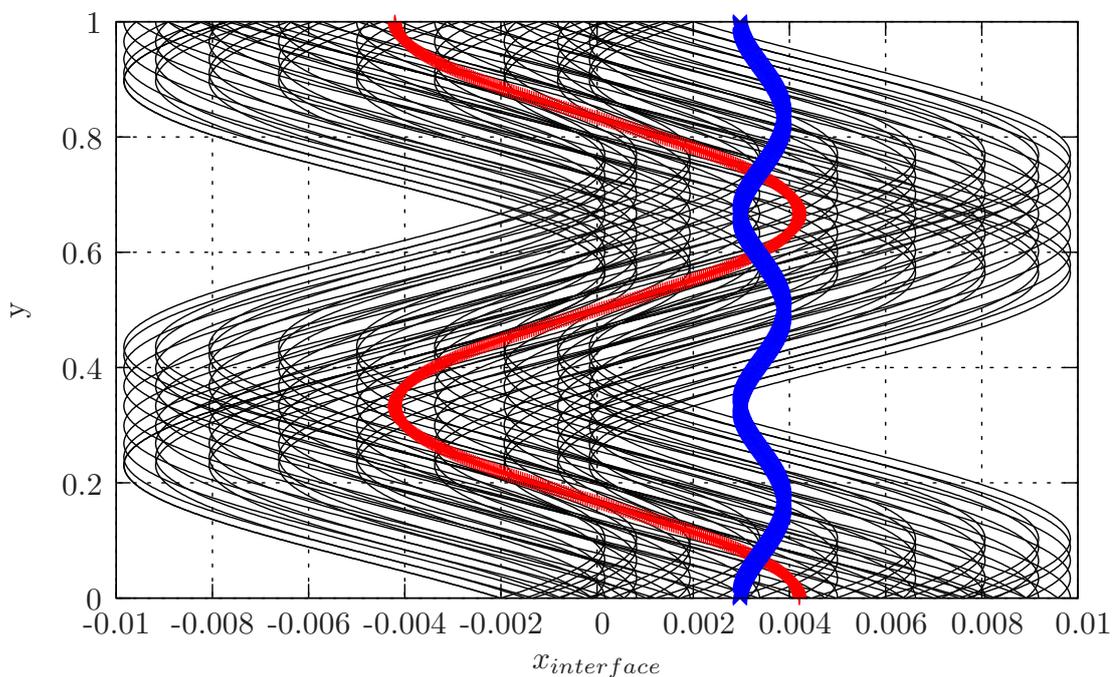


FIGURE 4.7 – Réalisations (noires), moyenne (rouge) et variance (bleue) du processus stochastique (4.46) pour $\sigma = 0.01$ et $b = 1.5$. Les pointillés correspondent à l'emplacement d'un maillage de discrétisation.

Prenons un exemple de processus stochastique simple paramétré par deux variables aléatoires uniformes¹¹. Ce processus n'a pas de réel sens physique mais il reste pertinent pour les raisons énoncées par la suite :

$$x_{interface}(y, \omega) = \sigma(Z_1(\omega) + \sin(2\pi by - Z_2(\omega))), \quad (4.46)$$

11. Celui-ci nous aidera à mettre en évidence une difficulté importante intervenant lors de notre problème de propagation d'incertitudes notamment lié à la dimension du problème stochastique.

où Z_1, Z_2 sont des variables indépendantes identiquement distribuées selon une loi uniforme sur $[-1, 1]$. En fixant y , $x_{interface}(y, \omega)$ est une variable aléatoire dont la loi dépend directement de la valeur de y . Figure 4.7, nous représentons plusieurs réalisations du processus stochastique (4.46) pour $\sigma = 0.01$ et $b = 1.5$ ainsi que la moyenne du processus en rouge et sa variance en bleue. Les traits en pointillés correspondent à la superposition d'un maillage (certes grossier ici) sur les réalisations de l'interface : pour chaque maille traversée par au moins une réalisation du processus stochastique représentant l'interface, on construit ainsi une variable aléatoire différente, cf. figure 4.7. Par conséquent, sans paramétrisation par ces variables aléatoires Z_1, Z_2 , *plus on raffinera les simulations hydrodynamiques, plus il sera nécessaire d'augmenter la dimension stochastique de notre problème de propagation d'incertitudes (puisqu'il est nécessaire d'avoir une variable aléatoire par maille, le nombre de mailles augmentant)*. Ceci n'est pas viable en pratique et pour éviter cette augmentation de la dimension stochastique avec la précision déterministe, nous aurons recours à la représentation du processus stochastique d'intérêt par un développement de Karhunen Loève modulo la contrainte de choisir *a priori* une forme particulière pour le noyau de covariance. Nous détaillons les propriétés mathématiques de ce développement section 4.3–4.3.2 où celui-ci sera intensivement utilisé.

4.2.4 Observable d'intérêt : l'évolution de la taille des instabilités

La taille des instabilités à l'interface entre les deux fluides (ou une moyenne spatiale de celle-ci) est dans bien des cas la quantité expérimentale d'intérêt dans la littérature, cf. [PTR98, VS95] par exemple. Cette quantité physique doit donc être rapprochée des observables du modèle précédemment présenté. Dans [YZL⁺06a], les auteurs rappellent le manque de fondations théoriques assurant d'obtenir des estimateurs d'erreur (aussi bien *a priori* qu'*a posteriori*) fiables lorsque l'on considère les équations d'Euler. Pour surmonter cette difficulté et avoir une idée de la pertinence des observables considérées, les auteurs se livrent à un certain nombre d'études de convergence poussées. Ces études leur permettent alors de mettre en évidence l'existence de quantités d'intérêt ne convergeant pas par rapport notamment au nombre de points de discrétisation du maillage considéré. Par exemple, la figure 4.8 présente l'évolution au cours du temps de la longueur de l'interface pour la simulation des figures 4.4–4.5 pour plusieurs discrétisations spatiales. A noter que cet exemple d'observables de modèle non convergente fait déjà l'objet d'une discussion dans [YZL⁺06a]. La figure 4.8 montre l'évolution de la longueur de l'interface pour trois maillages différents (200×200 , 400×400 et 800×800 mailles) : en temps court, pour $t \in [0ms, 5ms]$, l'écoulement est dans la phase de croissance linéaire des instabilités hydrodynamiques. Par conséquent, les trois discrétisations restituent des résultats comparables sur cette observable. En revanche, dès lors que l'écoulement passe en configuration instable (i.e. le choc ayant traversé une première fois l'interface, le choc se réfléchi contre la paroi du tube et l'on entre dans une configuration où le fluide léger pousse sur le fluide plus lourd) les longueurs restituées par les différents niveaux de discrétisation se mettent à diverger. Ceci est à relier à l'aspect fractal et au comportement

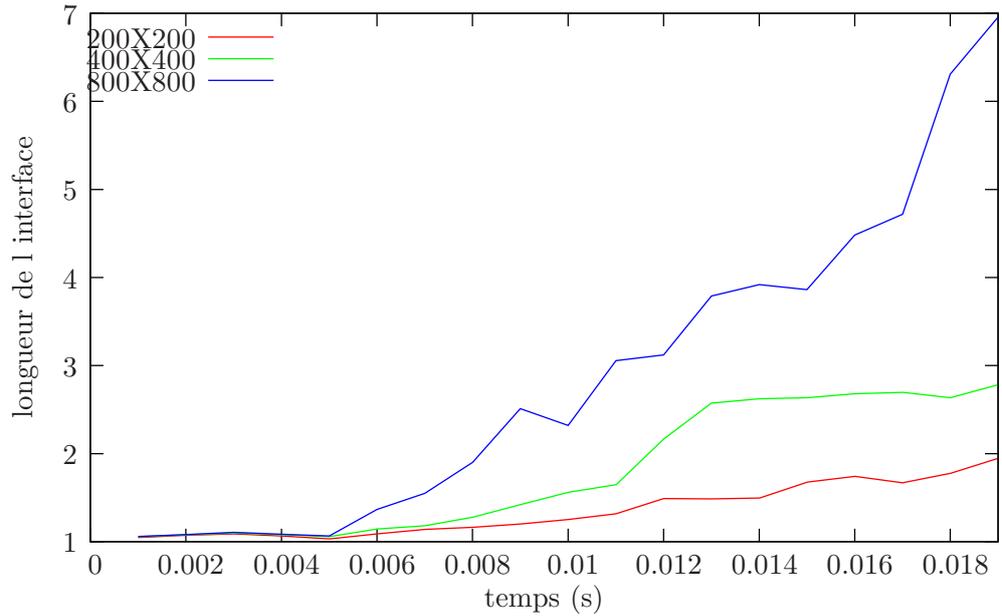


FIGURE 4.8 – Non convergence de la longueur de l’interface en fonction de la discrétisation spatiale pour la condition initiale donnée par l’interface $x_{interface}(y) = 0.05 \cos(2\pi y)$.

chaotique des instabilités hydrodynamiques au voisinage de l’interface en régime non visqueux (équations d’Euler). Le comportement fractal de l’interface dans un tube à choc de Richtmyer-Meshkov est illustré figure 4.9 : les figures présentent les cartes de fraction de présence entre les deux fluides au même temps ($t = 10ms$) pour 4 discrétisations spatiales différentes (200×200 , 400×400 , 800×800 , 1600×1600) pour une réalisation du processus considéré dans la section 4.2.5 qui suit (processus dont l’amplitude de la perturbation initiale est plus faible que celle des figures 4.4–4.5).

Dans [YZL⁺06a], les auteurs mettent également en évidence la convergence plus ou moins rapide d’un certain nombre d’observables et la nécessité d’une étude préalable de la configuration d’intérêt. Cette section a pour objet de généraliser l’étude effectuée dans [YZL⁺06a]. Dans [YZL⁺06a], les auteurs considèrent une expérience numérique de tube à choc de Richtmyer-Meshkov en géométrie convergente. Leur objectif final quant à ces études est de spécifier les paramètres de la fonction de vraisemblance lors d’étude bayésienne et le papier [YZL⁺06a] apporte une meilleure compréhension du rôle de l’erreur numérique dans cette fonction de vraisemblance. La part expérimentale n’est pas abordée dans celui-ci. Les auteurs effectuent alors des études de convergence et mettent en évidence la convergence de quantités moyennées (‘ensemble average’ et ‘spatial average’ dans

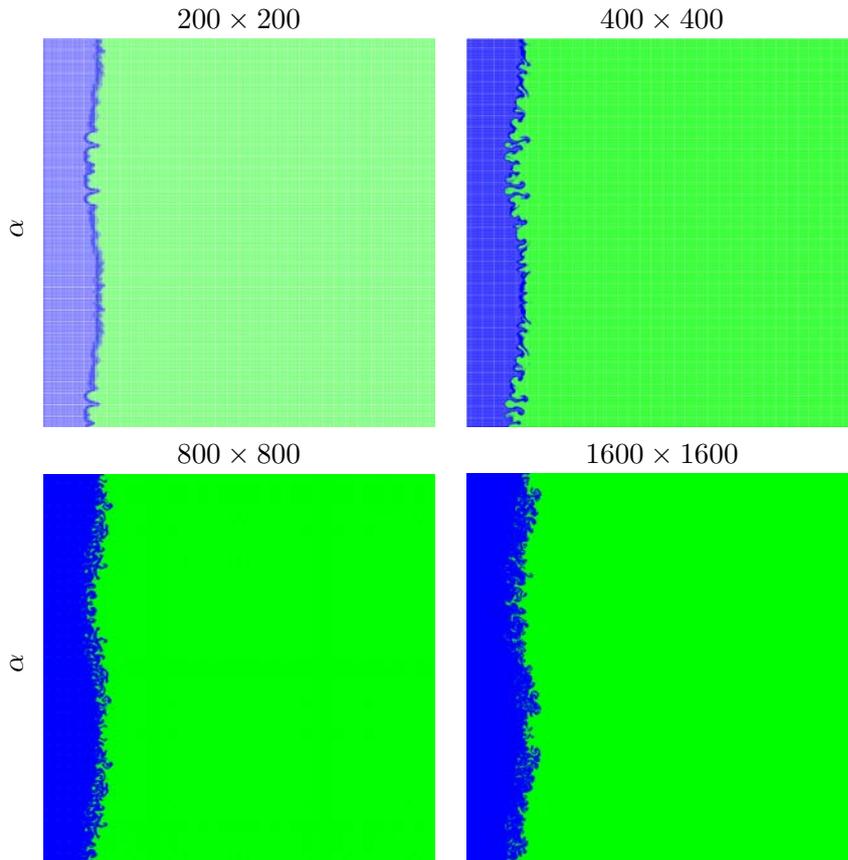


FIGURE 4.9 – Comportement fractal de l’interface entre les fluides dans un tube à choc de Richtmyer-Meshkov. Les figures présentent les cartes de fraction de présence entre les deux fluides au même temps $t = 10ms$ pour 4 discrétisations spatiales différentes (200×200 , 400×400 , 800×800 , 1600×1600).

[YZL⁺06a]) autrement dit l’importance de considérer la bonne métrique pour l’étude d’instabilités hydrodynamiques. En accord avec leurs résultats, nous nous intéresserons à des quantités moyennées spatialement en y et stochastiquement sur l’ensemble de probabilité considéré et en relation directe avec l’interface entre les deux fluides. Nous étudierons ces observables et vérifierons leurs convergences par rapport aux différents paramètres de discrétisation.

Pour résumer, le travail présenté dans cette section correspond à une extension des travaux de [YZL⁺06a] dans le sens où

- nous focaliserons sur les observables convergeantes mises en évidence dans [YZL⁺06a] et en étudierons d’autres dont nous anticipons le besoin pour l’étude bayésienne de la section suivante.
- Concernant le besoin d’introduire une nouvelle métrique (‘moyenne d’ensemble’ dans

[YZL⁺06a]), nous nous placerons dans un espace de probabilité et définirons également *a priori* le processus stochastique initial. En revanche, nous ne le considérerons pas gaussien¹². Si les auteurs dans [YZL⁺06a] ne s'intéressent qu'aux quantités statistiques d'ordre 1 et 2 (moyenne et variance), nous nous intéresserons à des caractéristiques statistiques plus poussée (pdf, support de pdf, indices de Sobol etc.), d'où notamment l'introduction de gPC pour l'étape de propagation d'incertitudes.

- Concernant la résolution spatiale, les calculateurs récents permettent de pousser l'étude à des simulations de plus de 10 millions de mailles.
- Concernant la résolution stochastique, pour les mêmes raisons que précédemment, nous sommes en mesure d'effectuer non plus une seule étude à résolution stochastique figée comme dans [YZL⁺06a]¹³ mais plusieurs avec des nombres de réalisations, i.e. nombre de points de quadrature, allant de $N = N_q^2 = 3^2 = 9$ à $N = N_q^2 = 9^2 = 81$ pour *chacun*¹⁴ des niveaux de discrétisation spatiale. Pour un niveau de discrétisation spatiale intermédiaire ($800 \times 800 = 640000$ mailles), nous avons même généré une solution de référence par méthode Monte-Carlo pour cette configuration complexe (soit ici $N = N_{MC} = 4900$ simulations).
- À noter que nous serons en géométrie plane (et non convergente comme dans [YZL⁺06a]) car les expériences auxquelles nous confronterons nos résultats de simulations numériques dans la section suivante ont été réalisées en géométrie plane.
- La section suivante constitue également dans un sens une extension aux travaux de [YZL⁺06a] puisque l'on y confronte des expériences à nos simulations numériques dont les paramètres de discrétisation seront réglés grâce aux études de cette section.

Nous décrivons dans la suite comment nous post-traitons certaines quantités obtenues par résolution numérique du modèle d'intérêt (équation d'Euler) afin de les rapprocher de la taille de la zone d'instabilités hydrodynamiques avant d'en étudier son évolution au cours du temps.

Nous supposons que l'incertitude sur l'interface initiale dépend explicitement de la paramétrisation grâce aux variables aléatoires sur \mathbf{Z} (ce sera toujours le cas par la suite puisque nous aurons recours à la décomposition de Karhunen-Loève, cf. section 4.3.2).

Nous souhaitons rapprocher la taille de la zone d'instabilités de plusieurs grandeurs liées à la fraction de présence des différents constituants. Nous notons $\alpha(x, y, t, \mathbf{Z})$ cette fraction de présence, celle-ci vaut 0 dans le fluide 0, 1 dans le fluide 1 et prend des valeurs comprises dans $]0, 1[$ au voisinage de l'interface. Pour une simulation donnée, il existe un nombre très important d'observables possibles. Toutes ne peuvent être étudiées et analysées au cours de cette thèse faute de temps mais nous proposons dans la suite de

12. En pratique, le fait de considérer un processus gaussien implique d'avoir une probabilité non nulle (certes faible) de voir des réalisations de l'interface initiale sortir du domaine de simulation. Nous souhaitons éviter cela et considérerons pour cela des processus stochastiques paramétrés par des variables aléatoires uniformes.

13. avec les notations de [YZL⁺06a], les auteurs n'utilisent que $N = 5$ simulations pour estimer les quantités statistiques et n'ont qu'une seule solution de référence spatialement convergée.

14. Y compris pour le niveau de discrétisation spatial le plus fin.

définir une certaine catégorie d'observables intéressantes toutes basées sur la fraction de présence des deux fluides.

- Nous nous intéressons dans un premier à la grandeur

$$\gamma(x, y, t, \mathbf{Z}) = 4\alpha(x, y, t, \mathbf{Z})(1 - \alpha(x, y, t, \mathbf{Z})).$$

Par construction, $\gamma(x, y, t, \mathbf{Z}) \in [0, 1]$ de sorte que le maximum de cette fonction se rapproche de 1.

- Nous définissons alors la position de l'interface comme suit

$$x_{int}(y, t, \mathbf{Z}) = \max_x[\gamma(x, y, t, \mathbf{Z})] = \max_x[4\alpha(x, y, t, \mathbf{Z})(1 - \alpha(x, y, t, \mathbf{Z}))].$$

Cette observable présente l'intérêt de ne pas faire intervenir de paramètres supplémentaires en opposition à celles qui suivent et elle assure l'unicité de la position de l'interface pour un y donné (en effet numériquement, le maximum de γ n'est jamais tout à fait égal à 1 et en général, ce maximum est unique). Or les cartes de fraction de présence montrent des enroulements dont il serait intéressant d'étudier les caractéristiques. Les quantités qui suivent visent à permettre cette étude.

- Nous notons $\bar{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z})$ et $\underline{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z})$ les abscisses minimum et maximum de l'interface à y constant et à l'instant t . Ces deux quantités diffèrent l'une de l'autre pour un y donné et pour un temps donné si l'interface présente des enroulements. Ces quantités sont elles aussi définies à partir de la fraction de présence α et nécessite d'introduire un paramètre empirique β : pour une ordonnée y fixée, on définit

$$\bar{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z}) = \max\{x | \gamma(x, y, t, \mathbf{Z}) \geq \beta\},$$

de même que

$$\underline{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z}) = \min\{x | \gamma(x, y, t, \mathbf{Z}) \geq \beta\}.$$

Ainsi, en prenant $\beta = \max_x[\gamma(x, y, t, \mathbf{Z})]$, la définition assure que

$$\underline{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z}) = \bar{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z}) = x_{int}(y, t, \mathbf{Z}).$$

Dans la suite, les quantités dénotées par l'exposant max sont obtenues en prenant $\beta = \max_x[\gamma(x, y, t, \mathbf{Z})]$.

En prenant $\beta = \varepsilon > 0$ avec ε petit les définitions de $\underline{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z})$ et $\bar{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z})$ assurent de retrouver les limites entre les zones de fluides purs et la zone de mélange numérique (en effet, le choix $\beta = \varepsilon$ assure de prendre en compte la diffusion numérique du schéma). Dans la suite, les quantités dénotées par l'exposant 0 sont obtenues en prenant $\beta = \varepsilon > 0$.

- A partir de ces quantités, on construit la grandeur

$$\Delta_{int}^\beta(t) \equiv \int_y \left\{ \max_Z \bar{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z}) - \min_Z \underline{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z}) \right\} dy. \quad (4.47)$$

Sa construction nécessite dans un premier temps d'approcher les variables aléatoires $\bar{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z})$ et $\underline{x}_{int}^\beta(y, t, \mathbf{Z})$ à chaque temps et pour chaque y , d'en rechercher les supports

(opération $\min_{\mathbf{z}}$ et $\max_{\mathbf{z}}$) avant de moyenner les grandeurs sur l'ensemble des \mathbf{y} (en accord avec les résultats de [YZL⁺06a] ainsi que sur les résultats expérimentaux de [PTR98, VS95]).

Les observables précédentes ont été décrites de manière continue. En pratique, nous aurons recours à une discrétisation spatiale et stochastique. Nous présentons ici comment en pratique les grandeurs sont approchées. Nous illustrons cela sur le calcul numérique de la quantité (4.47) mais la généralisation aux autres grandeurs est immédiate. En fonction du nombre de mesures en temps, on discrétise le temps en N_t temps t_1, t_2, \dots, t_{N_t} équi-répartis entre 0 et le temps final de l'étude. Pour chaque \mathbf{y} du maillage et t_i , on réalise la décomposition gPC de $\underline{x}_{\text{int}}^\beta(\mathbf{y}, t_i, \mathbf{Z})$ et $\bar{x}_{\text{int}}^\beta(\mathbf{y}, t_i, \mathbf{Z})$ de degré P : $\underline{x}_{\text{int}}^{\beta, P}(\mathbf{y}, t_i, \mathbf{Z})$ et $\bar{x}_{\text{int}}^{\beta, P}(\mathbf{y}, t_i, \mathbf{Z})$. Ensuite, nous tirons un grand nombre N_{MC} de réalisations Monte-Carlo en \mathbf{Z} afin de trouver le minimum et la maximum en \mathbf{Z} : l'approximation gPC est utile précisément à cet instant puisque le support des variables aléatoires peut être approché et estimé à moindre coût. L'approximation fait donc intervenir un certain nombre de paramètres de discrétisation numérique dont il faudra quantifier les effets sur les approximations des quantités $\Delta_{\text{int}}^\beta(t_i)$ et sur l'inférence bayésienne de la fin de ce chapitre. L'équivalent discret de la formule (4.47) utilisé en pratique est le suivant : pour $i \in \{1, \dots, N_t\}$

$$\Delta_{\text{int}}^\beta(t_i) \simeq \frac{1}{L_y} \sum_{j=1}^{N_y} \Delta_y \left\{ \max_{\mathbf{z} \in \{\mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_{N_{\text{MC}}}\}} \bar{x}_{\text{int}}^{\beta, P}(y_j, t_i, \mathbf{Z}) - \min_{\mathbf{z} \in \{\mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_{N_{\text{MC}}}\}} \underline{x}_{\text{int}}^{\beta, P}(y_j, t_i, \mathbf{Z}) \right\}, \quad (4.48)$$

en introduisant L_y la taille du domaine dans la direction y . Dans la suite, nous étudions les observables décrites précédemment : nous nous intéresserons également à certaines grandeurs probabilistes autres que le support des variables aléatoires considérées – pdf, variance, indices de Sobol (cf. annexe F) des quantités $\underline{x}_{\text{int}}^\beta$ et $\bar{x}_{\text{int}}^\beta$ – en fonction des besoins de l'étude. À noter que nous exploitons intensivement le fait que nous savons *a priori* que l'observable d'intérêt (toujours étroitement liée à la position de l'interface au cours du temps) est relativement régulière par rapport aux variables spatiales et stochastiques ce qui constitue un atout lors de l'application de l'approximation gPC, cf. chapitre 2.

4.2.5 Une étude de propagation d'incertitudes sur un tube à choc de Richtmyer-Meshkov incertain

Objectifs : Dans cette section, nous construisons puis résolvons un problème de propagation d'incertitudes pour le système d'Euler en deux dimensions d'espace sur un problème hydrodynamiquement instable en choisissant un processus stochastique initial. Il s'agit d'étudier le comportement de différentes observables ainsi que de l'approche par gPC en fonction des différents paramètres de simulation sur un problème difficile (étude d'instabilités et phénomènes fortement non linéaires) en effectuant diverses études de convergence complémentaires à celles effectuées dans [YZL⁺06a]. Ce problème, somme toute plus simple qu'une expérience de tube à choc réelle (puisque nous contrôlons complètement la statistique de l'interface initiale), présente néanmoins l'intérêt d'être moins coûteux.

teux, nous pourrions ainsi construire des solutions de références. Cette section représente également une extension des travaux de [GDH11] sur l'utilisation de gPC pour l'étude d'instabilités hydrodynamiques ainsi que de [YZL⁺06a] sur la convergence des observables liées à des perturbations stochastiques des l'interface vis-à-vis des paramètres de maillage. •

Dans cette section, nous focaliserons sur l'observable $\Delta_{int}^{\max}(t)$. L'étude peut être divisée en trois sous-sections : dans un premier temps, nous effectuons une étude de convergence en fonction des paramètres de discrétisation spatiaux ($\Delta x, \Delta y$ pour les pas d'espace). Puis nous nous intéresserons aux paramètres de discrétisation stochastiques (N_q, P pour les nombre de points de quadrature et ordre polynomial). L'étude de convergence par rapport à la discrétisation spatiale est à rapprocher de l'étude effectuée dans [YZL⁺06a] en géométrie convergente. Dans un second temps, l'étude de convergence par rapport à la discrétisation stochastique dans ce genre de configuration instable est quant à elle originale et tend à approfondir l'étude effectuée dans [GDH11]. Enfin, dans une dernière sous-section, pour un jeu de discrétisation spatiale raisonnable, nous générons une solution de référence au problème de propagation d'incertitudes par méthode Monte-Carlo et comparons nos résultats obtenus par approximation gPC à ceux-ci.

Dans toute cette section, le processus stochastique modélisant l'incertitude sur l'interface initiale est celui présenté section 4.2.3 paramétré par deux variables aléatoires (Z_1, Z_2). La figure 4.10 présente les différentes options de discrétisation initiales utilisées pour les études de convergence qui vont suivre. Dans la colonne de gauche de la figure 4.10, la moyenne, la variance ainsi que les réalisations du processus stochastique en les points de Gauss-Legendre utilisés pour réaliser la propagation d'incertitudes sont présentés. À noter que d'un point de vue discrétisation stochastique, la condition initiale est bien résolue y compris pour un nombre de points de Gauss-Legendre relativement faible ($N_q = 3$ dans chacune des directions), cf. figure 4.10. Bien sûr, si la condition initiale est bien résolue avec peu de points de quadrature, il est difficile de connaître *a priori* le nombre de points de quadrature nécessaires pour approcher correctement l'observable d'intérêt : toutefois, nous comptons sur la relative régularité de la position de l'interface par rapport aux variables spatiales et temporelle ainsi qu'aux variables stochastiques.

La colonne de droite de la figure 4.10 présente les différents niveaux de discrétisation spatiale considérés pour l'étude de convergence pour chacun des points de quadrature utilisés ($N_q = 3, 5, 7, 9$ dans chaque direction). À noter que le processus stochastique considéré est assez particulier dans le sens où tous les points de quadrature impliquent des initialisations de l'interface ayant des niveaux de discrétisation spatiale équivalents. Par exemple toutes les interfaces initiales correspondant aux réalisations des N_q points de Gauss-Legendre sont discrétisées avec le même nombre de mailles : en effet, le cal-

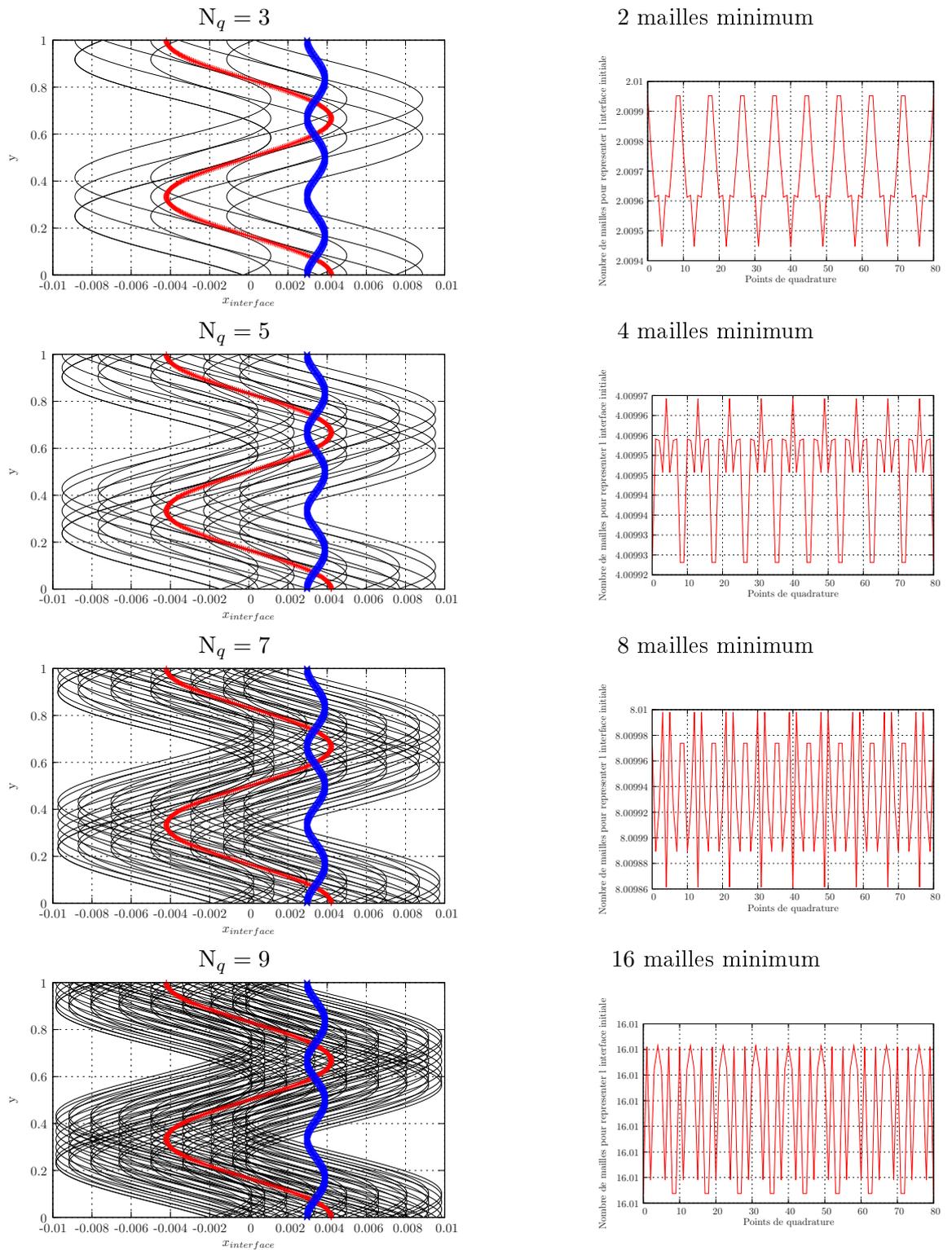


FIGURE 4.10 – Études de convergence en fonction de la discrétisation spatiale pour divers valeurs des paramètres N_q (nombre des points de quadrature de Gauss-Legendre dans chaque direction) et de P (ordre de troncature de gPC).

cul 800×800 (respectivement $200 \times 200, 400 \times 400, 1600 \times 1600, 3200 \times 3200$ ¹⁵) assure d'avoir 8 mailles (respectivement 2, 4, 16, 32 mailles) pour représenter les N_q interfaces des simulations non intrusives. À noter également que cette configuration présente à la

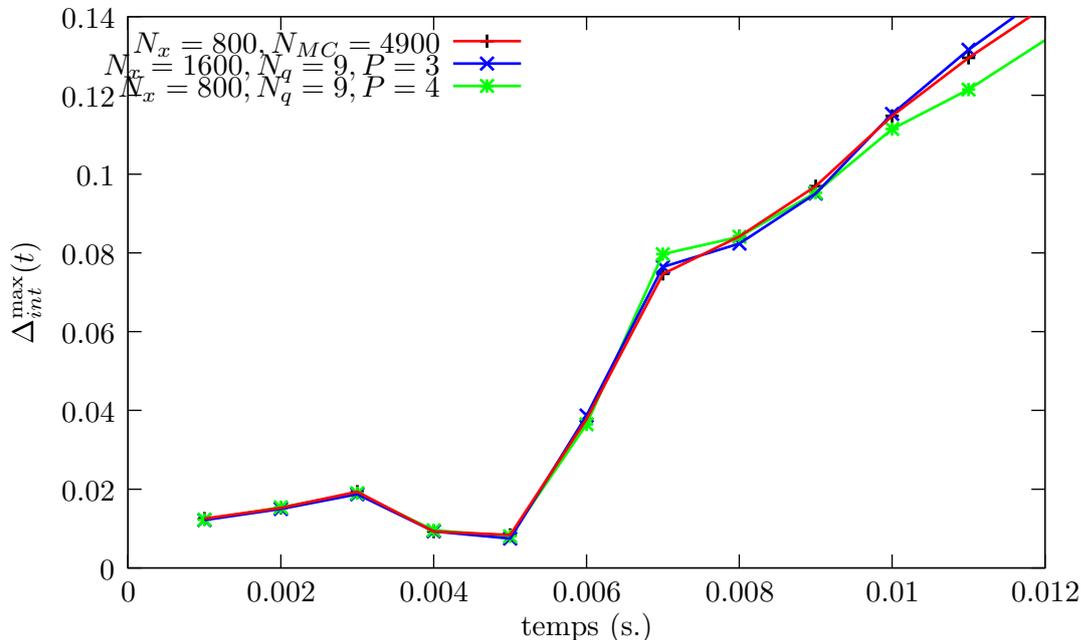


FIGURE 4.11 – Exemple d'évolution de la taille de la zone d'instabilités hydrodynamiques.

fois certains avantages et certains inconvénients. Le fait que peu de mailles soient nécessaires pour représenter l'interface initiale (quelque soit le point de quadrature considéré) est un avantage certain. Par contre, l'amplitude initiale de l'interface relativement importante par rapport au mode de perturbation considéré rend la dynamique de l'écoulement particulièrement instable physiquement et par conséquent les différentes phases sont assez difficile à identifier (notamment les instants de rechoc de l'interface sont différents selon l'abscisse considérée) : La figure 4.11 présente l'évolution de la taille d'instabilités caractérisées par la quantité $\Delta_{int}^{\max}(t)$ évaluée selon différentes méthodes (qui seront plus amplement décrites par la suite, nous focalisons ici sur la description générale de l'évolution des instabilités). Tout d'abord, pour les jeux de paramètres considérés, le comportement est relativement cohérent. À $t = 0ms$, la taille des instabilités est dictée par la condition initiale est vaut $0.02cm$, cf. figure 4.10. Le premier point de la figure 4.11 correspond à l'instant $t = 2ms$ pour lequel le choc a déjà frappé l'interface qui a été comprimée une première fois et les instabilités ont commencées à se développer. À $t = 3ms$ environ, le choc réfléchit retransverse l'interface en sens inverse, en configuration instable (fluide léger poussant sur le fluide lourd), recomprime celle-ci et déclenche la

15. Dans toutes les simulations bidimensionnelles présentées dans cette thèse, le rapport d'aspect des mailles 2D est de 1 par défaut, sauf précision.

croissance d'instabilités de taille plus importantes. Une autre interaction choc-interface (moins forte) intervient aux environs de $t = 7ms$ changeant la pente de la courbe et donc l'évolution de la taille des instabilités.

Ce phénomène physique, l'évolution de la croissance d'instabilités hydrodynamiques, est important en pratique dans les expériences. C'est pourquoi il est important de pouvoir prédire par simulation l'évolution de la croissance (ainsi que son taux de croissance, cf. la pente des courbes de la figure 4.11) de la zone l'instabilités au cours du temps compte tenu de perturbations de l'interface initiale.

Dans la suite de l'étude, nous effectuerons une étude de convergence en fonction du nombre de points de quadrature $N_q = 3, 5, 7, 9$ dans chacune des directions stochastiques Z_1 et Z_2 , en fonction du nombre de mailles $N_x = N_y = 100, 200, 400, 800, 1600, 3200$ dans chacune des directions spatiales x et y et une étude de convergence en fonction de l'ordre de troncature P (avec $P \leq N_q - 1$ dans chacune des directions stochastiques Z_1, Z_2) de l'approximation gPC. Pour ce cas-test nous aurons également recours dans certaines conditions à une solution de référence obtenue par méthode Monte-Carlo (ce qui représente une première à notre connaissance pour ce genre de configurations complexes).

Première étude de convergence, par rapport aux paramètres de discrétisation spatiale

Nous commençons par effectuer des comparaisons similaires à celles effectuées dans [YZL⁺06a] : dans ces études, les auteurs comparent pour chacun des paramètres leur solution numérique à la solution la plus fine qu'ils peuvent obtenir. Nous procédons de la même manière dans cette sous-section.

Dans un premier temps, nous présentons un certain nombre de résultats qualitatifs : la figure 4.12 présente des profils temporels d'évolution de la zone d'instabilités ($\Delta_{int}^{max}(t)$) pour plusieurs niveaux de discrétisation spatiale ($N_x = 100, 200, 400, 800, 1600, 3200$ mailles) et plusieurs niveaux de discrétisations stochastiques ($N_q = 3, 5, 7, 9$ et $P \leq N_q - 1$). Les résultats des figures 4.12 sont visuels mais permettent de mettre en avant un certain nombre de phénomènes. Chaque image de la figure 4.12 présente les courbes sur $\Delta_{int}^{max}(t)$ obtenue pour tous les jeux de discrétisation spatiaux (i.e. $100 \times 100, 200 \times 200, 400 \times 400, 800 \times 800, 1600 \times 1600, 3200 \times 3200$) en fixant les paramètres de discrétisation stochastique. À première vue, ces figures ne permettent pas facilement de mettre en évidence une convergence (en tout cas rapide) de l'observable. Pourtant, deux phases sont à distinguer : si l'on considère la phase temporelle entre $t = 0ms$ et $t = 6ms$, on constate une vitesse de convergence rapide des solutions les moins maillées vers la solution (de référence) la plus maillée. Il s'agit de la phase de calcul physiquement stable. En revanche,

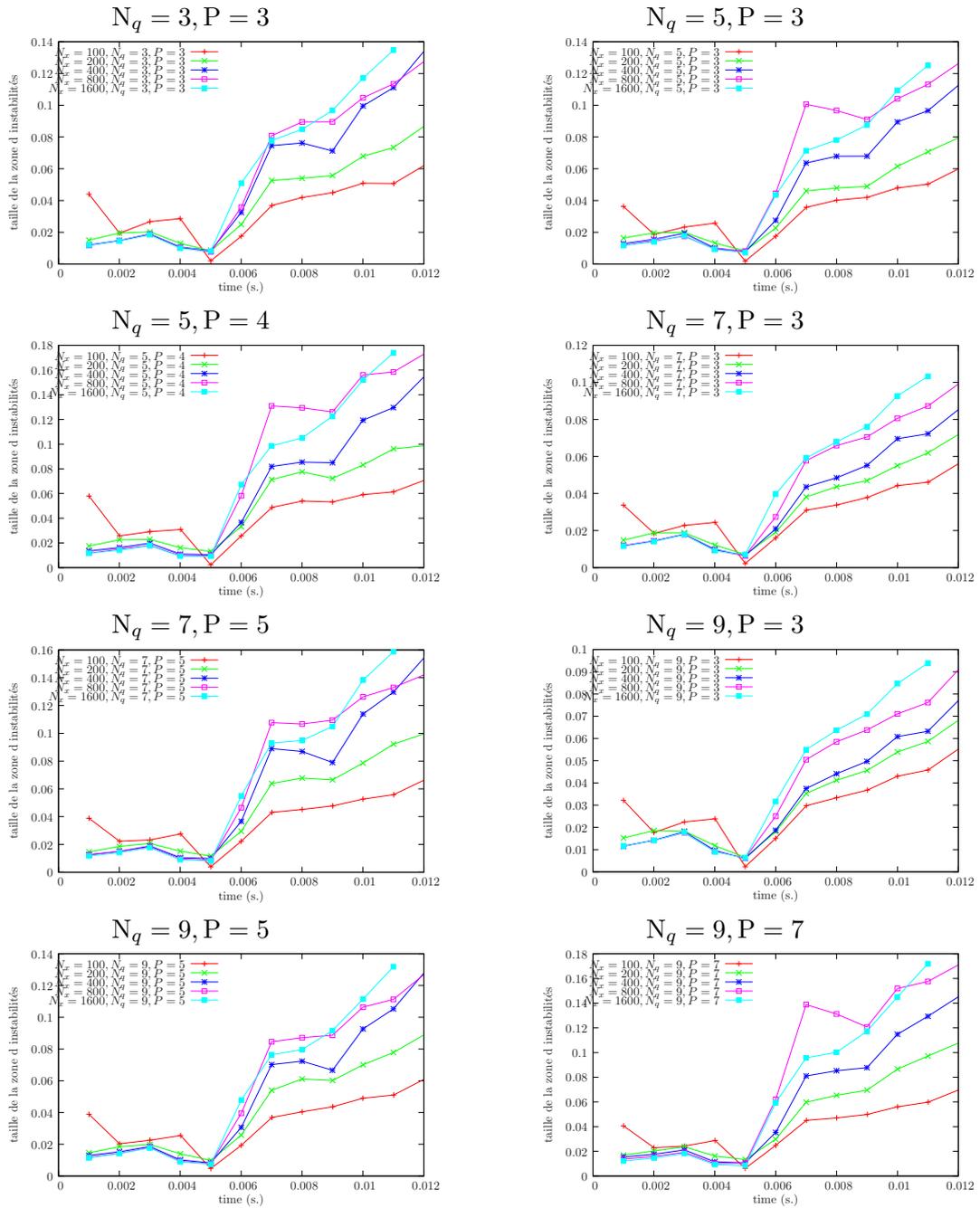


FIGURE 4.12 – Études de convergence en fonction des discrétisations spatiale N_x , colonne de droite, et stochastique N_q (nombre de points de quadrature de Gauss-Legendre dans chaque direction), colonne de gauche, pour la condition initiale.

pour des temps supérieurs à $t = 6ms$, donc après le passage en régime instable (léger poussant sur le lourd), la vitesse de convergence de la solution semble fortement impactée (diminue). La figure 4.13 permet de quantifier les résultats de la figure 4.12 : la figure

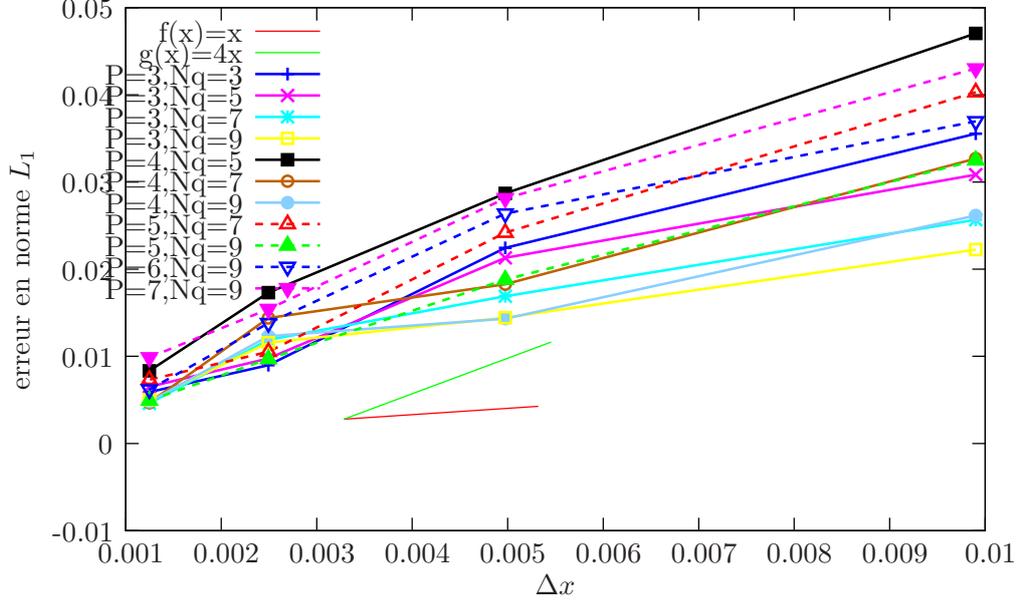


FIGURE 4.13 – Convergence (ordre 1) de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation spatiale.

représente l'erreur en norme L_1 en fonction du pas de discrétisation spatiale Δx pour tous les jeux de paramètres stochastiques en prenant pour référence la solution la plus maillée pour un jeu de paramètre N_q, P donné. Autrement dit, si nous dénotons par $\Delta_{int, \Delta x}^{N_q, P}(t)$ l'approximation de Δ_{int}^{\max} avec discrétisation spatiale Δx , et discrétisation stochastique (N_q, P) , nous présentons $\forall (N_q, P) \in \{3, 5, 7, 9\} \times \{P < N_q\}$:

$$e_{N_q, P}(\Delta x) = \frac{1}{T} \int_0^T |\Delta_{int, \Delta x}^{N_q, P}(s) - \Delta_{int, \min \Delta x}^{N_q, P}(s)| ds \approx \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n_T} \Delta t |\Delta_{int, \Delta x}^{N_q, P}(s_i) - \Delta_{int, \min \Delta x}^{N_q, P}(s_i)|,$$

où n_T désigne le nombre de sortie temporelle. On constate sur la figure 4.13, quelque soit le choix des paramètres de résolution stochastique, une convergence d'ordre 1 en accord avec les résultats obtenus dans [YZL⁺06a]. Figure 4.14, nous présentons le même genre de courbes, l'erreur en norme L_1 en fonction de la discrétisation spatiale, mais en prenant une référence commune pour toutes les discrétisations. Celle-ci est choisie comme étant la mieux discrétisée (spatialement et stochastiquement) de notre jeu de données, à savoir la solution $\Delta_{int, \min \Delta x}^{9,7}$ obtenue pour $N_x = 1600$, $N_q = 9$ et $P = 7$. Encore, une fois, nous constatons une convergence d'ordre 1 pour cette observable.

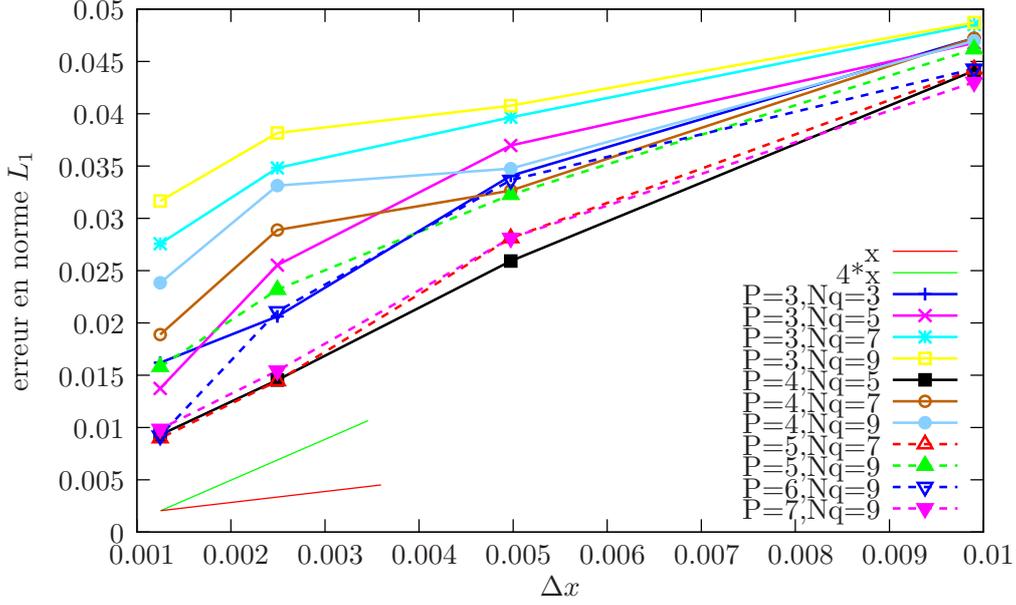


FIGURE 4.14 – Convergence (ordre 1) de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation spatiale. La référence pour toutes les courbes est le calculs de caractéristiques $N_x = 3200, N_q = 9, P = 7$.

Seconde étude de convergence, par rapport aux paramètres de discrétisation stochastique

Tout comme précédemment, nous effectuons une étude de convergence mais par rapport aux paramètres de discrétisation stochastique dans cette sous-section. Cette étude de convergence est donc complémentaire à celle effectuée dans [YZL⁺06a]. Les figures 4.15–4.16–4.17 présentent les études de convergence quantitative en fonction des paramètres de discrétisation stochastiques à paramètre de discrétisation spatial figé. La figure 4.15 représente une étude de convergence par rapport au nombre de points de quadrature utilisés dans chaque direction $N_q = 3, 5, 7, 9$ pour un ordre de troncature fixé $P = 3$ dans un premier temps, pour toutes les valeurs de discrétisation spatiale. L’erreur considérée est l’erreur en norme L_1 et la référence pour chacune des courbes pour un Δx fixé est la courbe ayant la même discrétisation spatiale Δx , le même ordre de troncature $P = 3$ mais le nombre de quadrature maximal $N_q = 9$. En d’autres termes, la figure 4.15 présente $\forall N_x \in \{100, 200, 400, 800, 1600, 3200\}$:

$$e_{\Delta x}(N_q) = \frac{1}{T} \int_0^T |\Delta_{int, \Delta x}^{N_q, 3}(s) - \Delta_{int, \Delta x}^{9, 3}(s)| ds \approx \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n_T} \Delta t |\Delta_{int, \Delta x}^{N_q, 3}(s_i) - \Delta_{int, \Delta x}^{9, 3}(s_i)|,$$

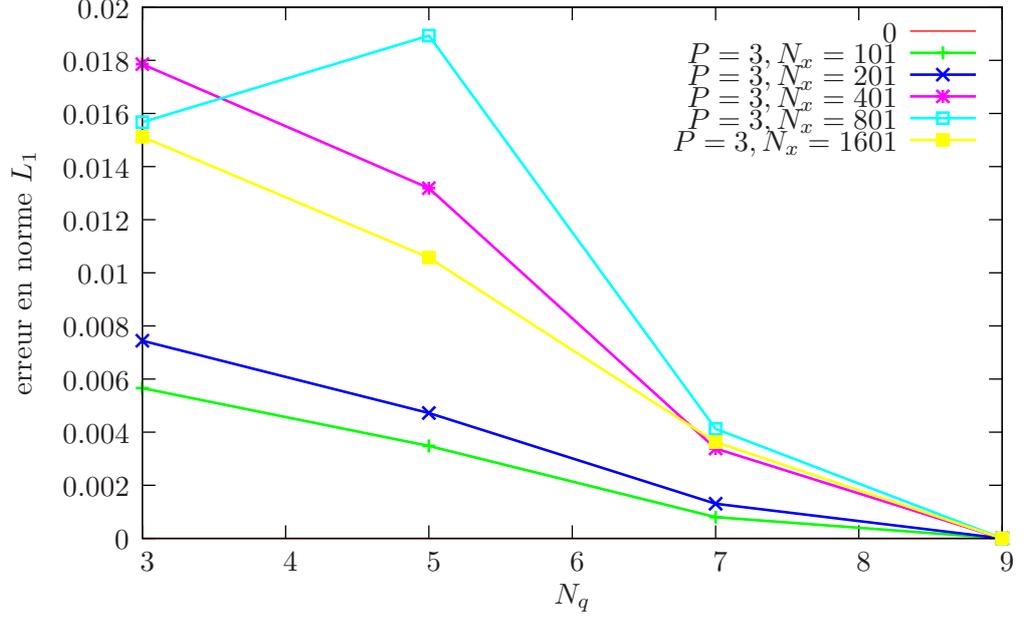


FIGURE 4.15 – Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique (nombre de points de quadrature N_q pour $P = 3$ fixé).

où n_T désigne le nombre de sortie temporelle. Une fois encore, on observe une convergence par rapport au paramètre d'intégration numérique N_q . En revanche, on constate la non monotonie de la convergence par rapport au pas de discrétisation Δx (en effet, l'erreur pour $N_x = 1600$ est supérieure à celle pour $N_x = 100$), phénomène déjà constaté dans [YZL⁺06a]. L'étude de convergence en nombre de points de quadrature ne peut se faire qu'à $P = 3$ fixé sous peine de voir s'amplifier l'erreur d'intégration, cf. chapitre 2 figure 2.16.

La figure 4.16 présente l'étude de convergence en fonction de l'ordre de troncature de l'approximation gPC. Pour cette figure, toutes les courbes ont été obtenues avec $N_q = 9$ afin d'assurer une relativement bonne intégration des coefficients polynomiaux pour des ordres $P \in \{3, \dots, 7\}$. L'étude de convergence est effectuée pour toutes les discrétisations spatiales disponibles et la référence pour une courbe ayant N_x nombre de mailles et $N_q = 9$ points de quadrature est la solution de caractéristique N_x, N_q avec l'ordre de troncature le plus élevé $P = 7$. En d'autres termes, la figure 4.16 présente l'erreur en norme $L_1 \forall N_x \in \{100, 200, 400, 800, 1600\}$:

$$e_{\Delta x}(P) = \frac{1}{T} \int_0^T |\Delta_{int, \Delta x}^{9,P}(s) - \Delta_{int, \Delta x}^{9,7}(s)| ds \approx \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n_T} \Delta t |\Delta_{int, \Delta x}^{9,P}(s_i) - \Delta_{int, \Delta x}^{9,7}(s_i)|,$$

où n_T désigne le nombre de sortie temporelle. On constate encore une fois la convergence de chacune des approximations quelque soit le niveau de discrétisation spatial N_x . La

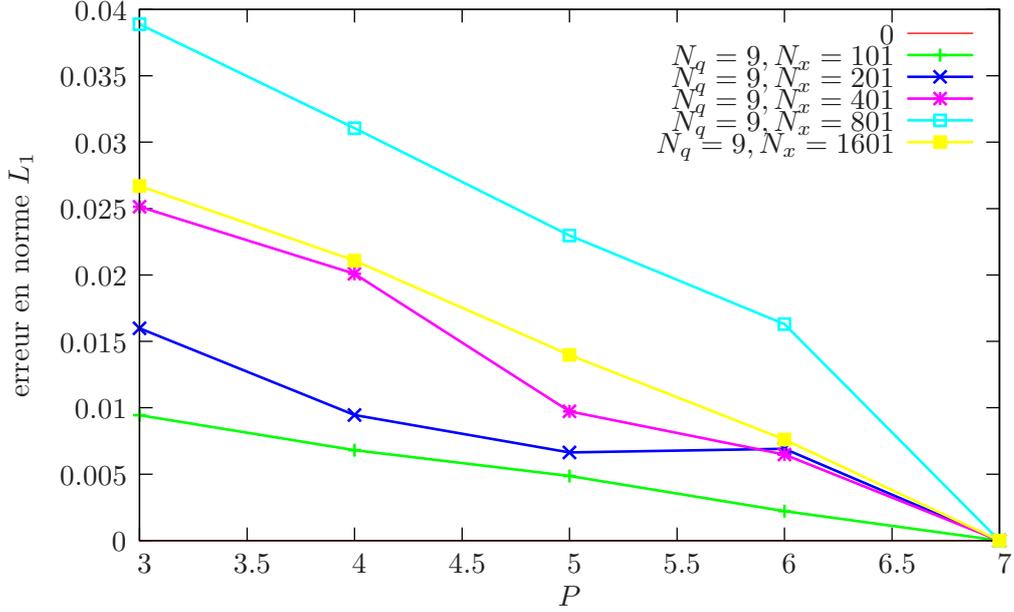


FIGURE 4.16 – Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique (ordre de troncature P pour $N_q = 9$ fixé).

convergence est non monotone dans le sens où globalement pour tout P l'erreur pour $N_x = 100$ est inférieure à l'erreur pour $N_x = 1600$, ceci est principalement lié au fait que pour chaque courbe, la référence n'est pas la solution la plus fine spatialement : la figure 4.17 présente la même étude de convergence mais en choisissant une référence commune pour chacune des courbes de discrétisation spatiale N_x . Cette référence est la courbe de caractéristiques $N_x = 3200, N_q = 9, P = 7$. En d'autres termes, la figure 4.17 présente l'erreur en norme $L_1 \forall N_x \in \{100, 200, 400, 800, 1600, 3200\}$:

$$e_{\Delta x}(P) = \frac{1}{T} \int_0^T |\Delta_{int, \Delta x}^{9,P}(s) - \Delta_{int, \min \Delta x}^{9,7}(s)| ds \approx \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n_T} \Delta t |\Delta_{int, \Delta x}^{9,P}(s_i) - \Delta_{int, \min \Delta x}^{9,7}(s_i)|,$$

où n_T désigne le nombre de sortie temporelle. La convergence est assurée ainsi que la monotonie des erreurs en fonction de la discrétisation spatiale N_x , cf. figure 4.17.

Les figures présentées dans les précédentes sous-sections sont encourageantes dans le sens où elles permettent de vérifier la convergence de l'observable $\Delta_{int}^{\max}(t)$ au sens de [YZL⁺06a] (première sous-section avec la convergence par rapport au paramètre de discrétisation spatiale N_x) mais également vis-à-vis de la discrétisation stochastique N_q, P . Toutefois, les études des chapitres précédents tendent à mettre en garde quant au choix de l'ordre de troncature P en fonction du nombre de points d'intégration numérique N_q , cf. chapitre 2 (notamment les figures 2.12–2.14–2.16) et annexe D qui est motivée par

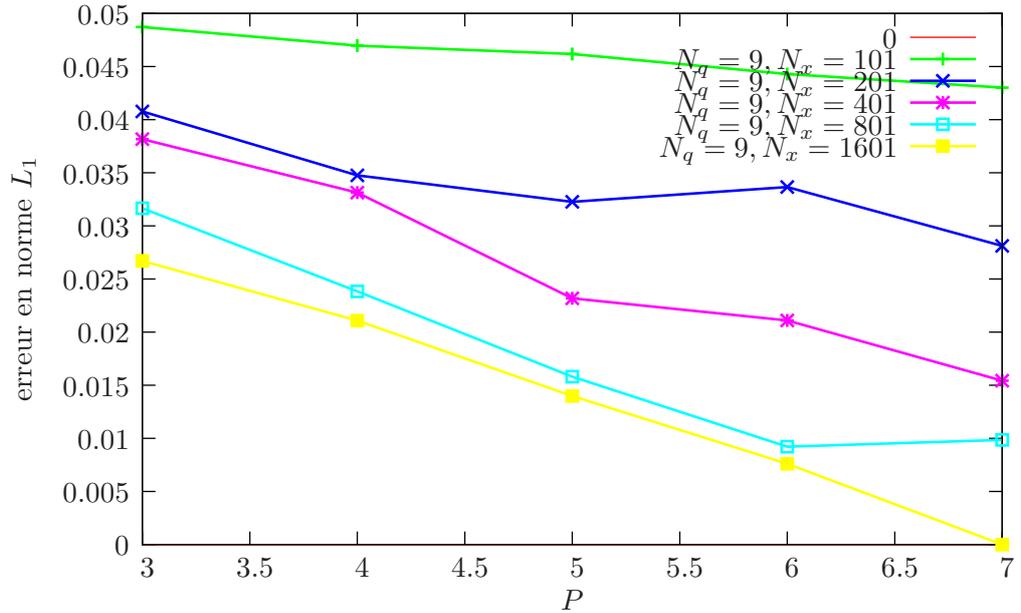


FIGURE 4.17 – Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique (ordre de troncature P pour $N_q = 9$ fixé), la référence pour tous les calculs est le calcul $N_x = 1600, N_q = 9, P = 7$.

ce genre de problématique complexe. *Les études précédentes ne permettent pas de répondre à la question du choix de l'ordre de troncature P une fois le nombre de points de quadrature N_q fixé.* Pour répondre à cette question du choix de l'ordre de troncature P pour un nombre de point de quadrature fixé¹⁶ N_q , compte-tenu des difficultés théoriques à mettre en évidence des critères d'erreur *a priori* ou même *a posteriori* pour les problèmes non linéaires hyperboliques généraux (qui plus est chaotiques dans cette étude), nous proposons une série de calculs originaux à notre connaissance puisque nous avons cherché sous certaines conditions plus ou moins contraignantes à obtenir une solution de référence par méthode Monte-Carlo.

Comparaison à une solution de référence obtenue par méthode Monte-Carlo

Afin de tester sur ce problème chaotique la convergence en ordre de troncature de l'approximation polynomiale pour une intégration des coefficients polynomiaux de précision finie, nous avons lancé une campagne de calculs visant à obtenir une solution de référence pour le problème de propagation d'incertitudes présenté précédemment.

16. En général, le budget de calcul est imposé par N_q .

Pour cette campagne, il est dans un premier temps nécessaire de fixer un niveau de discrétisation spatiale commun. Pour ce faire, nous comptons sur les études précédentes : concernant l'étude de convergence des observables au sens de [YZL⁺06a] (i.e. en fonction de la discrétisation spatiale N_x), les auteurs considèrent la solution convergée si la différence entre 2 niveaux de raffinements successifs est inférieure à 5%. Les courbes des figures 4.16–4.17 tendent à montrer que pour ce problème, cette condition est bien vérifiée dès $N_x = 800$ mailles (i.e. 8 mailles minimum par amplitude d'interface initiale). Nous considérerons par conséquent une étude de référence avec des calculs Monte-Carlo ayant $N_x \times N_y = 800 \times 800 = 640000$ mailles.

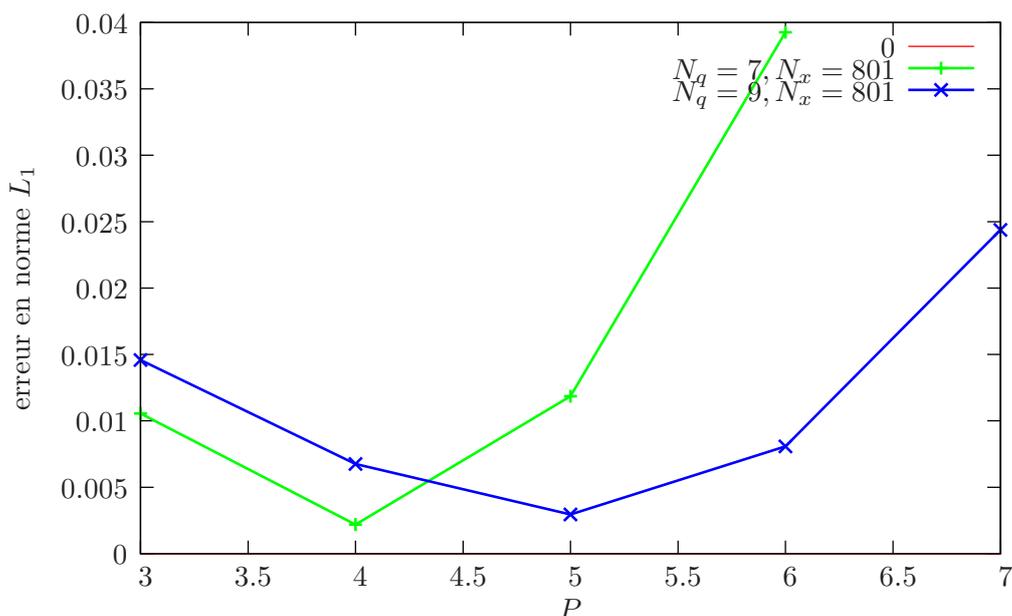


FIGURE 4.18 – Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique (ordre de troncature P pour $N_q = 9$ fixé) pour un niveau de discrétisation spatiale de $N_x = 800$ mailles, la référence pour tous les calculs est un calcul Monte-Carlo avec $N_x = 800, N_{MC} = 4900$.

Avec ce niveau de discrétisation spatiale, $N_x = 800$, et compte-tenu de la mise à disposition du calculateur Tera100 (ainsi que du temps restant imparti pour la thèse), nous nous fixons un budget de 4900 simulations pour ce calcul de référence avec $N_x = 800$. C'est à notre connaissance un nombre ambitieux pour ce genre de problème chaotique et ce niveau de discrétisation.

Concernant le choix du plan d'expérience, la solution de référence est appelée 'Monte-Carlo' par abus puisque nous choisissons de répartir les points uniformément dans les intervalles $[-1; 1] \times [-1; 1]$: en effet, en dimension 2 (faible), une répartition uniforme

assure une vitesse de convergence en $\mathcal{O}(\frac{1}{N_{MC}})$ plutôt que $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N_{MC}}})$. Un nombre de points du plan d'expérience de $N_{MC} = 4900$ implique d'avoir 70 points par directions.

La figure 4.18 présente pour un niveau de discrétisation spatiale fixé $N_x = 800$ une étude de convergence sur $\Delta_{int}^{max}(t)$ en norme L_1 en fonction de l'ordre de troncature P pour deux niveaux de précision de l'intégration numérique $N_q = 7$ et $N_q = 9$. Pour ces deux courbes de la figure 4.18 la solution de référence est la solution obtenue par méthode Monte-Carlo à $N_{MC} = 4900$ points et $N_x = 800$. Autrement dit, la figure 4.18 présente pour $N_q = 7$ et $N_q = 9$:

$$e_{N_q,800}(P) = \frac{1}{T} \int_0^T |\Delta_{int,800}^{N_q,P}(s) - \Delta_{int,800}^{N_{MC}}(s)| ds \approx \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n_T} \Delta t |\Delta_{int,800}^{N_q,P}(s_i) - \Delta_{int,800}^{N_{MC}}(s_i)|,$$

où n_T désigne le nombre de sortie temporelle.

La figure 4.18 met alors en évidence le phénomène déjà évoqué dans les chapitres 2 et annexe D à savoir qu'à précision d'intégration numérique finie, il existe un ordre de troncature optimal P . Au delà de cet ordre de troncature optimal, toute erreur d'intégration numérique est amplifiée par l'ordre trop élevé du polynôme considéré et dégrade la qualité de l'approximation. Ainsi, pour un niveau de précision de l'intégration numérique $N_q = 7$, l'ordre optimal pour ce problème est $P = 4$, pour un niveau $N_q = 9$, celui-ci vaut $P = 5$. Par conséquent, pour ce genre de problème complexe et chaotique, il est nécessaire d'imposer une restriction relativement importante sur l'ordre de troncature P .

La figure 4.19 permet d'apprécier qualitativement la convergence de la courbe d'évolution temporelle de la taille des instabilités en fonction des paramètres de discrétisation numérique en selectionnant l'ordre de troncature optimal P pour chacune des valeurs de N_q et ce pour chacun des niveaux de discrétisation spatiale N_x . La convergence est assurée dans la direction stochastique quelque soit le niveau de résolution spatiale, même si la vitesse de convergence dépend fortement de ce niveau de discrétisation N_x . Il est alors possible de revisiter ces courbes sachant que les niveaux de résolution spatiale et stochastique sont acceptables : un phénomène intéressant peut maintenant être pointé du doigt. Pour des niveaux de résolution spatiaux inférieurs à $N_x = 800$ inclus, on constate pour les temps $t = 6ms$ à $t = 9ms$ une différence plus importante qu'à des temps inférieurs et même supérieurs alors que ce phénomène n'est plus présent pour des niveaux de discrétisations spatiaux supérieurs ($N_x = 1600, 3200$). La raison de ce phénomène provient du fait que l'interface au passage du second choc (configuration instable léger \rightarrow lourd) comprime les instabilités faisant passer l'épaisseur de la zone d'instabilités en dessous d'un certain nombre de mailles (≈ 4 mailles) ce qui génère à partir de cet instant une erreur relativement importante qu'il n'est plus possible de rattraper.

À noter que dès lors que la discrétisation spatiale est suffisante $N_q \geq 800$ ainsi qu'avec

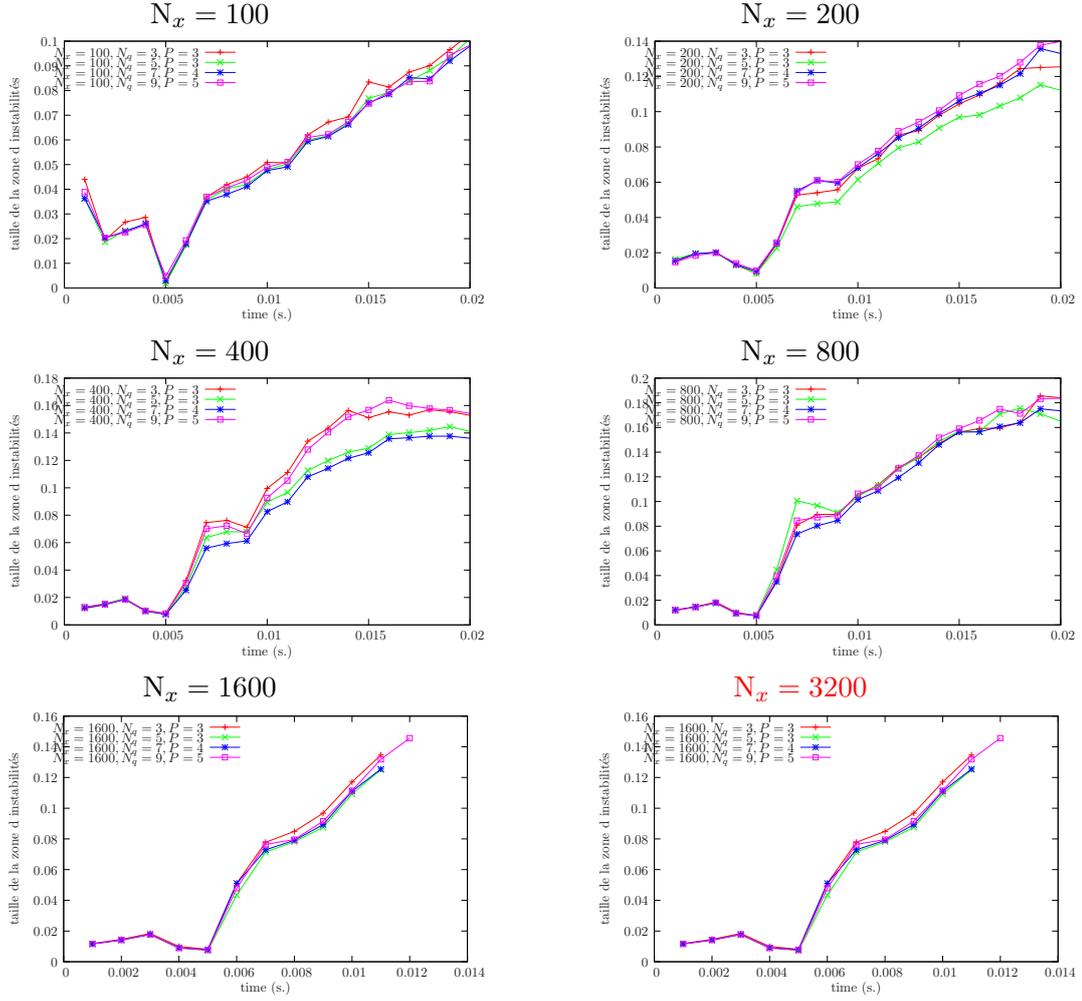


FIGURE 4.19 – Études de convergence en fonction de la discrétisation stochastique pour divers valeurs des paramètres de discrétisation spatiale N_x (nombre de mailles) avec limitation de l'ordre de troncature fonction de la précédente étude.

un choix judicieux (certes 'conservatif' dans le sens où P doit être inférieur à $N_q - 2$) de P par rapport à N_q ($N_q = 3 \implies P = 3$, $N_q = 5 \implies P = 3$, $N_q = 7 \implies P = 4$, $N_q = 9 \implies P = 5$) les solutions semblent convergées en fonction du paramètre de discrétisation stochastique pour un nombre de points de quadrature N_q relativement faible. Ce phénomène confirme indirectement le fait que l'observable d'intérêt est relativement régulière dans l'espace stochastique et ainsi un faible nombre de points de quadrature suffit pour obtenir une bonne approximation de $\Delta_{int}^{\max}(t)$.

La figure 4.20 présente la solution de référence obtenue par méthode Monte-Carlo ainsi que les approximations gPC obtenues avec les $N_q = 7$ et $N_q = 9$ ainsi que les ordres de

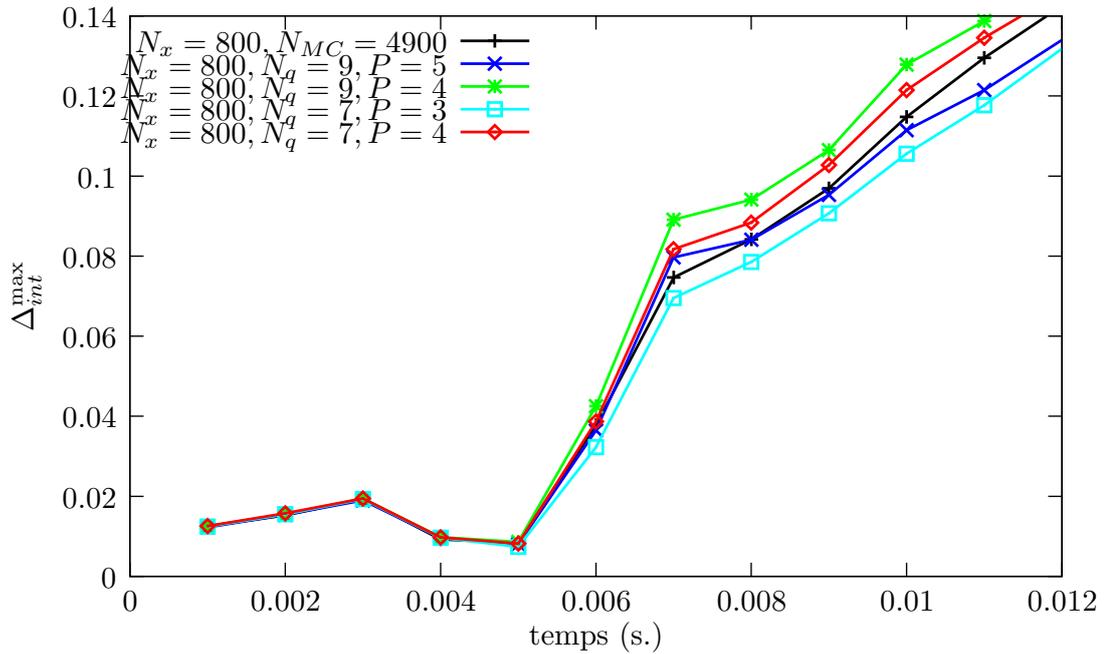


FIGURE 4.20 – Exemple d'évolution de la taille de la zone d'instabilités hydrodynamiques pour des paramètres de discrétisation stochastiques pertinents choisis grâce à l'étude comparative sur la solution de référence obtenue par méthode Monte-Carlo de cette section.

troncature P 'optimaux' pour ces niveaux de précision d'intégration ($P \leq 4$ pour $N_q = 7$ et $P \leq 5$ pour $N_q = 9$). Enfin, la figure 4.20 permet également de mettre en évidence un phénomène bien connu pour les problèmes d'évolution temporelle utilisant gPC, à savoir le problème de 'défaut d'intégration en temps long' (couramment appelé 'long-term integration' dans la littérature, cf. [GvdSVK10a, PL11a]) : on constate en effet qu'à mesure que le temps passe, l'erreur stochastique (liée à l'approximation gPC) est de plus en plus prononcée : ceci est dû au fait que la transformation du processus stochastique initial au travers des équations d'Euler est de plus en plus non linéaire et par conséquent la base polynomial initialement bien adaptée à la variable aléatoire à approcher ne l'est plus. C'est un phénomène bien connu pour toute méthode numérique en général et il est ici mis en évidence sur gPC.

Conclusion partielle de la section 4.2.5 : dans cette section, nous avons construit un problème de propagation d'incertitudes dans une configuration de type tube à choc de Richtmyer-Meshkov avec condition initiale incertaine dont la caractérisation est parfaitement définie et contrôlée, problème à rapprocher de celui présenté dans [YZL⁺06a].

Cette étude nous a donc permis de vérifier la convergence au sens de [YZL⁺06a] vis-à-

vis de paramètres spatiaux de l'observable Δ_{int}^{max} caractérisant l'évolution de la taille des instabilités hydrodynamiques générées par les passages successifs d'un choc au travers de l'interface. L'étude étend celle effectuée dans [YZL⁺06a] dans le sens où elle permet de pousser les expériences de convergence numérique au domaine stochastique. Nous avons de plus construit un cas-test avec solution de référence Monte-Carlo pour un problème ambitieux et avons construit une base de donnée de résultats fournie qui pourra facilement être revisitée pour d'autres observables d'intérêt ($\Delta_{int}^{\beta}, \Delta_{int}^0$ etc.) et même d'autres méthodes d'approximation stochastiques (i-gPC, ME-gPC etc.). Celle-ci à nécessité 6 niveaux de discrétisation spatiale ($N_x = 100, 200, 400, 800, 1600, 3200$) pour chacun des 4 niveaux de discrétisation stochastique ($N_q = 3, 5, 7, 9$) soit un total de $6 \times (81 + 49 + 25 + 9) = 984$ calculs plus ou moins précis. À ceux-ci s'ajoutent les 4900 calculs pour obtenir la solution de référence Monte-Carlo. Chaque calcul est indépendant l'un de l'autre et ils peuvent tous être lancés en même temps sur autant de nœuds de calculs, ils ne nécessitent aucune communications inter-nœuds, ce qui est communément appelé de l'*embarasingly parallel*.

Cette étude a également permis de mettre en évidence l'existence de paramètres de discrétisation pertinent compte tenu de difficultés théoriques bien connues pour obtenir de manière efficace des estimateurs d'erreur (*a priori-a posteriori*) lorsque l'on considère des systèmes de lois de conservation (en régime fortement non linéaire). Ainsi, nous avons constaté que pour le calcul précédent, 8 mailles par amplitude de perturbations initiales suffisent à l'étude en terme de discrétisation spatiale. De même que nous avons pu constater que quantitativement, $N_q = 7$ points de quadrature dans chaque direction semblent suffisants pour approcher la solution de référence Monte-Carlo à condition bien sûr de tronquer l'approximation gPC à un ordre raisonnable $P = 3$ ou $P = 4$.

Enfin, cette étude constitue une pré-étude avant d'aborder la dernière question de cette thèse, à savoir la question de l'utilisation de l'inférence bayésienne pour application à un problème hydrodynamique comparable : dans la suite, nous supposons (*hypothèse forte certes*) que les paramètres nécessaires à l'étude précédente le seront également pour l'étude bayésienne qui suit.

Quelques résultats sur une observable statistique différente : coefficients de Sobol de $x_{int}(y, t, Z)$

Nous nous intéressons ici à d'autres observables statistiques d'intérêt. Pour ce genre de problème complexe, il est possible d'étudier de nombreuses observables mais nous ne pouvons présenter toutes leurs interprétations dans cette thèse faute de temps. Nous choisissons toutefois de présenter certains résultats mettant en jeu les coefficients de Sobol d'une observable car cet outil statistique intensivement utilisé n'a – à notre connaissance – jamais été utilisé pour l'étude de phénomènes hydrodynamiques chaotiques et peuvent être riche en informations. Plus de détails concernant ces indices sont présentés dans l'annexe F. Nous nous intéressons donc aux coefficients de Sobol intégrés sur l'ensemble

des y de la quantité $x_{int}(t, y, \mathbf{Z})$ au cours du temps : on note de manière générale pour un vecteur aléatoire \mathbf{Z} de dimension quelconque

$$S_{i_1, \dots, i_n}(t) = \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} \frac{\text{Var} [\mathbb{E} [x_{int}(y, t, \mathbf{Z}) | Z_{i_1}, \dots, Z_{i_n}]]}{\text{Var} [x_{int}(y, t, \mathbf{Z})]} dy.$$

Ces outils statistiques sont décrits de manière précise dans l'annexe F, ils permettent de quantifier la part des variables aléatoires d'entrée \mathbf{Z}_1 et \mathbf{Z}_2 sur la variance totale du processus au cours du temps pour le problème de dimension 2 de cette section.

À noter que dans cette section, nous ne présentons pas l'étude de convergence poussée identique à celle effectuée sur la quantité $\Delta_{int}^{\max}(t)$ précédemment, le discours serait redondant. Le principal résultat issu de l'étude de convergence sur cette quantité est que la convergence est constatée dans les mêmes conditions que précédemment, avec les mêmes jeux de paramètres de discrétisation sélectionnés.

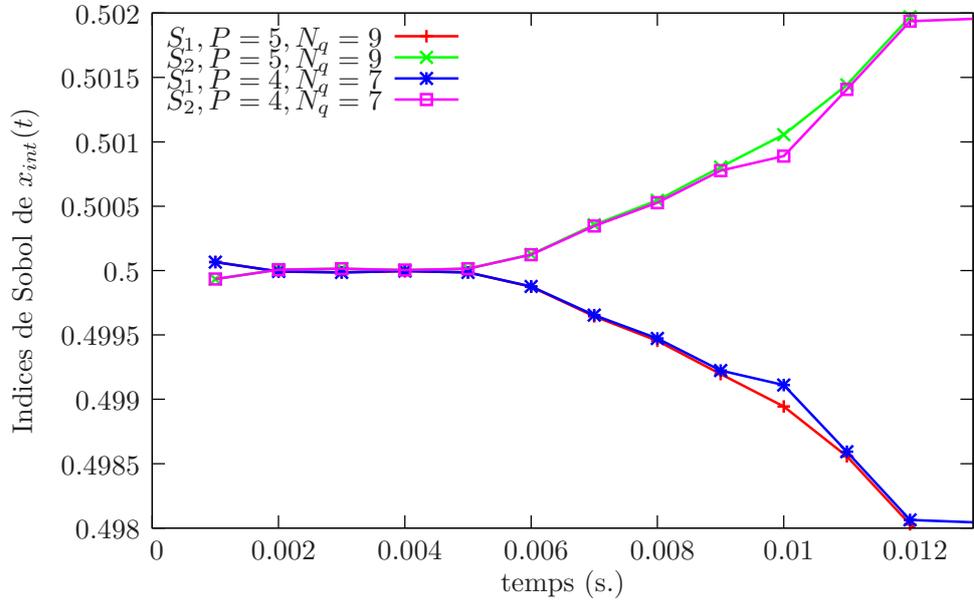


FIGURE 4.21 – Évolution des indices de Sobol de x_{int} en fonction du temps.

La figure 4.21 présente l'évolution au cours du temps des indices de Sobol $S_1(t), S_2(t)$ des variables aléatoires d'entrée $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2$ pour les paramètres de discrétisation sélectionnés lors de l'étude précédente. Premier constat : les indices de Sobol sont globalement peu affectés pour ce problème particulier. On constate toutefois que le passage du premier choc à $t = 2ms$ tend à inverser l'influence des deux variables aléatoires d'entrée. Le passage en configuration instable en revanche met en évidence un changement de régime pour la variable aléatoire de sortie puisqu'à mesure que le temps passe, la part de la variance de l'observable de sortie est de plus en plus expliquée par la variable aléatoire

Z_2 soit la variable aléatoire responsable de la translation sur l'axe des y plutôt que celle selon l'axe des x (Z_1).

Les indices de Sobol constituent un outil puissant pour l'analyse et l'interprétation de résultats de simulations : ils permettent d'expliquer la part de variance de chacun des paramètres d'entrée sur l'observable en sortie. Aussi pour reprendre l'exemple précédent, si dans le dispositif il est question de réduire la taille des instabilités aux différents temps de la solution, les indices de Sobol permettent d'affirmer qu'il sera plus efficace de jouer sur la réduction de l'incertitude sur le paramètre d'entrée Z_2 plutôt que de tenter cette réduction sur Z_1 dans un premier temps.

Dans la suite de ce chapitre, nous abordons une dernière section dans laquelle nous confrontons nos résultats de simulation numérique à des expériences de tubes à choc de Richtmyer-Meshkov.

4.3 Étude bayésienne : comparaison à des expériences de tubes à chocs

Objectifs : L'objectif de cette section est de confronter des résultats de simulations numériques (dont les paramètres ont été choisis selon la stratégie décrite dans la section précédente) à des expériences de tube à chocs. Il s'agit d'estimer la probabilité pour certains processus stochastiques initiaux d'expliquer les résultats expérimentaux d'évolution temporelle de la taille des instabilités. Pour cela, nous abordons une étude de calibration bayésienne sur les paramètres de l'interface initiale du tube à choc en nous comparant à des résultats expérimentaux [PTR98, VS95].

Ainsi, dans ce chapitre, nous utilisons les notions et concepts présentés dans les deux chapitres précédents (chapitre 2 pour gPC et 3 pour l'inférence bayésienne), les résultats des expériences numériques de la section précédente afin d'étudier l'expérience du tube à choc et les instabilités de Richtmyer-Meshkov qui s'y développent. •

Pour les raisons évoquées précédemment dans la section 4.2.3 (cf. notamment la remarque effectuée sur la figure 4.7) il est difficile d'explorer l'espace des processus stochastiques pouvant représenter l'interface initiale sous peine de voir la dimension stochastique de notre problème exploser avec le nombre de mailles représentant l'interface. Afin d'éviter ce problème, nous choisissons de nous restreindre à une certaine classe de processus stochastique et avons recours au développement de Karhunen-Loève afin de réduire l'effet de la dimension sur nos différents problèmes. Nous donnons tous les détails dans la section 4.3.2 qui suit mais avant cela nous présentons brièvement les résultats et dispositifs expérimentaux de [VS95] auxquels nous confronterons nos simulations.

4.3.1 Brève présentation de l'expérience VS85 de [VS95]

L'inférence bayésienne permet, comme nous l'avons déjà rappelé auparavant, de confronter résultats expérimentaux et résultats obtenus avec un modèle à éprouver. Nous présentons ici les expériences auxquels nous comparerons le modèle présenté précédemment afin d'estimer l'évolution de la taille d'instabilités suite à une série de chocs successifs. Il s'agit en fait de valider ou d'invalider l'hypothèse que pour des temps courts, l'évolution de la taille des instabilités est conduite par les phénomènes hydrodynamiques seuls. L'expérience qui nous intéresse est décrite dans [VS95]. L'article présente les résultats de visualisation de d'écoulements expérimentaux d'interfaces planes entre de l'air et du SF_6 accélérées par une impulsion de nombre de Mach 1.5. La figure 4.6 résume les conditions expérimentales du papier (la pré-étude de la section précédente était fortement inspirée du dispositif expérimental de [VS95]).

Le dispositif expérimental de [VS95] permet de prendre des photographies de l'évolution de la zone d'instabilités au cours du temps après les passages successifs des chocs. Le post-traitement de ces photographies permet alors de calculer la taille moyennée selon l'axe des y des instabilités au cours du temps (en accord avec l'intégration selon l'axe des y dans (4.47)) : ces résultats expérimentaux sont présentés figure 4.22. L'acquisition

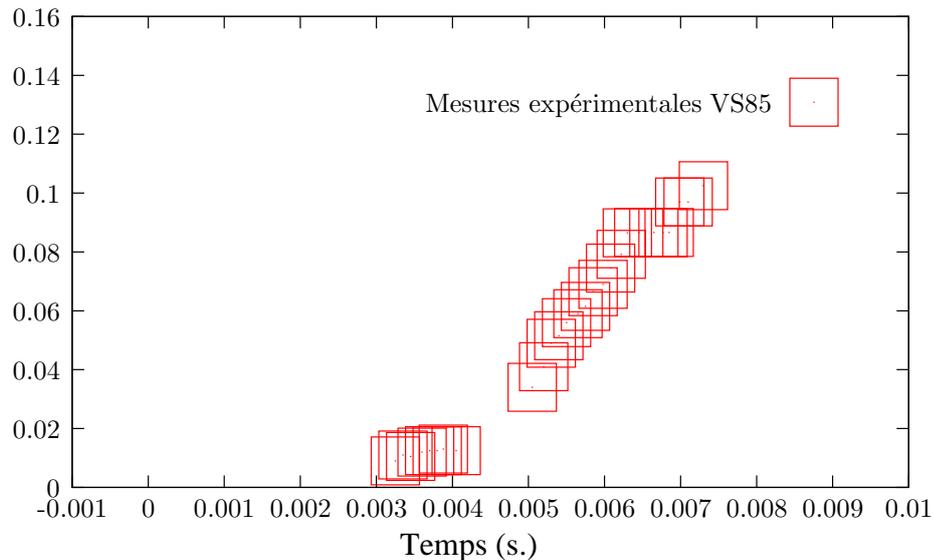


FIGURE 4.22 – Tailles de zone de mélange expérimentales [VS95].

des données ne se fait pas forcément de manière uniforme en temps (cf. figure 4.22) et les données sont entachées d'une erreur de mesures modélisée ici par les tailles de carrés en les points de mesures relativement grands.

Comme expliqué précédemment, pour limiter *a priori* la taille de l'espace d'exploration des processus stochastiques initiaux modélisant l'incertitude sur la condition initiale entre les deux fluides, nous choisissons de nous restreindre à une certaine classe de processus stochastique que nous pensons pertinente (cf. inférence bayésienne et avis d'expert) et avons recours au développement de Karhunen-Loève afin de réduire l'effet de la dimension sur nos différents problèmes. Nous donnons tous les détails et les justifications dans la section 4.3.2 qui suit.

4.3.2 Réduction de la dimension stochastique du problème initial : développement de Karhunen-Loève

Un développement de Karhunen Loève permet de représenter un processus stochastique en ne conservant que les modes prépondérant en norme L_2 connaissant son noyau de corrélation du processus (voir la section 4.3.2). Ainsi, l'interface initiale est de la forme

$$x_{\text{int}}^0 = x_{\text{int}}^0(y, \mathbf{Z}) \quad (4.49)$$

avec \mathbf{Z} un vecteur aléatoire de dimension finie. En l'occurrence, dans ce document, il sera de dimension 2, 3 ou 4.

La représentation de Karhunen Loève a l'avantage de fournir une expression concise du processus interface. Avec cette représentation, l'interface initiale s'écrit :

$$x_{\text{int}}^0 = x_{\text{int}}^0(y, \mathbf{Z}) = \sum_{q=1}^Q \sqrt{\lambda_q} Z_q e_q(y). \quad (4.50)$$

Avec les λ_q et $e_q(y)$ les valeurs et fonctions propres du noyau de covariance du processus et les Z_q des variables aléatoires orthogonales.

Les fonctions et valeurs propres dépendent du noyau de corrélation du processus. En choisissant un noyau de covariance exponentiel $C(y, y') = \sigma^2 \exp(-|y - y'| \div b)$ et en le paramétrant par (b, σ) , les fonctions et valeurs propres dépendent de ces paramètres ce qui fait dépendre l'interface initiale de (b, σ) .

$$x_{\text{int}}^0 = x_{\text{int}}^0(y, \mathbf{Z}; b, \sigma) = \sum_{q=1}^Q \sqrt{\lambda_d(b, \sigma)} Z_q e_q(y; b, \sigma). \quad (4.51)$$

Dans cette section, nous introduisons la représentation de Karhunen-Loève d'un processus stochastique qui permet d'exprimer un processus stochastique de variance finie et de fonction de covariance connue, comme une somme de variables aléatoires et de fonctions déterministes. En tronquant cette série convenablement, on déplace le problème d'un processus stochastique, soit une infinité de variables aléatoires, à un vecteur aléatoire de dimension finie.

Soit $F_y(\omega)$ un processus stochastique indexé par $y \in \mathcal{D}$ dans $L^2(\mathcal{D}) \times L^2(\Omega, \mathbb{P})$. Souvent \mathcal{D} est un intervalle de \mathbb{R} . Dans nos applications, il s'agira de l'intervalle $[0; L_y]$ où L_y est la longueur dans la direction y . Dans cette étude, nous n'éprouvons pas le besoin de considérer des processus stochastiques autres qu'à valeurs scalaires.

La décomposition de Karhunen-Loève correspond à une décomposition spectrale d'un processus stochastique en fonction des valeurs propres et des fonctions propres de son noyau de covariance. Le choix *a priori* de ce noyau de covariance restreint l'exploration l'espace des processus stochastiques et conditionne les résultats de la prochaine étude bayésienne (cf. l'importance de correctement choisir la densité *a priori* dans une étude bayésienne, chapitre 3).

Quelques remarques sur les fonctions de covariance

Soit C la fonction de covariance, ou noyau de covariance, du processus F_y définie sur $\mathcal{D} \times \mathcal{D}$ et définie par :

$$\forall (y_1, y_2) \in \mathcal{D}^2, C(y_1, y_2) = \mathbb{E} [F_{y_1}(\omega)F_{y_2}(\omega)] \quad (4.52)$$

$$= \int_{\Omega} F_{y_1}(\omega)F_{y_2}(\omega) d\mathbb{P}(\omega). \quad (4.53)$$

Cette espérance se calcule par rapport à la variable aléatoire ω .

Dans la pratique, le noyau de covariance n'est pas connu. Dans le meilleur des cas, des mesures expérimentales sont disponibles pour l'estimer (cf. [Per13] par exemple). Sinon, une forme doit être supposée en se basant sur des caractéristiques physiques du processus considéré. La première caractéristique d'un processus stochastique, sans *a priori*, est son caractère semi défini positif. Afin de restreindre davantage l'ensemble des noyaux de covariances possibles nous devons poser des hypothèses supplémentaires sur le processus stochastique.

Nous ferons l'hypothèse de stationnarité et d'isotropie.

Définition 8 (Processus stationnaire) *Un processus stochastique est stationnaire si sa fonction de covariance ne dépend que de $y_1 - y_2$. Elle est invariante par translation.*

$$C(y_1, y_2) = k(y_1 - y_2)$$

Définition 9 (Processus isotrope) *Un processus stochastique est isotrope si sa fonction de covariance ne dépend que de $|y_1 - y_2|$.*

$$C(y_1, y_2) = k(|y_1 - y_2|)$$

Les fonctions de covariance isotropes sont des fonctions à base radiale (RBF).

Pourquoi une telle hypothèse d'isotropie est-elle possible ? Concernant notre étude, le processus stochastique correspond à l'interface initiale entre deux fluides. En géométrie polaire en dimension 2, y correspond à la coordonnée polaire θ . La stationnarité garantie un invariance par rotation quelconque et l'isotropie assure la symétrie. Pour un tube à choc, cela revient à négliger les effets de bord et à assurer la symétrie par rapport à l'axe du tube.

Parmi les noyaux classiquement utilisés sont à distinguer le noyau exponentiel de variance σ^2 et de longueur de corrélation L défini par

$$C(x_1, x_2) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{|x_1 - x_2|}{L}\right), \quad (4.54)$$

et le noyau gaussien de variance σ^2 et de longueur de corrélation L défini par

$$C(x_1, x_2) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{(x_1 - x_2)^2}{L}\right). \quad (4.55)$$

Le second noyau est plus régulier que le premier.

Analyse spectrale : calculs des valeurs/vecteurs propres propres du processus

Le noyau de covariance définit un opérateur T sur l'espace $L^2(\mathcal{D})$ dans $L^2(\mathcal{D})$.

$$T : q \in L^2(\mathcal{D}) \rightarrow \int_{\mathcal{D}} C(., y)q(y) dy. \quad (4.56)$$

Si le noyau de covariance est continu sur \mathcal{D}^2 alors l'opérateur T est symétrique défini positif et possède une séquence dénombrable de valeurs et vecteurs propres $(\lambda_i, e_i) \in \mathbb{R}^+ \times L^2(\mathcal{D})$ vérifiant l'équation de Fredholm

$$\forall y_1 \in \mathcal{D} : \int_{\mathcal{D}} C(y_1, y_2)e_i(y_2) dy_2 = \lambda_i e_i(y_1) \quad (4.57)$$

avec en plus l'orthonormalité des vecteurs propres :

$$\int_{\mathcal{D}} e_i(y)e_j(y) dy = \delta_{i,j} \quad (4.58)$$

et tel que les valeurs propres positives vérifient $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \dots$

Le théorème de Mercer [Mer09] assure une décomposition des processus stochastiques en fonction de ses valeurs et vecteurs propres. Il s'agit en fait d'une généralisation en dimension infinie de la diagonalisation des matrices symétriques définies positives. Comme corollaire de ce théorème, la représentation de Karhunen-Loève de F_y est

$$\boxed{F_y(\omega) = \mu(y) + \sigma \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} e_i(y) Z_i(\omega)} \quad (4.59)$$

où μ désigne le moyenne du processus : $\mu(y) = \mathbb{E} [F_y(\omega)]$.

En pratique, la série est tronquée et F_y es approché par :

$$\boxed{F_y(\omega) \simeq F_y^Q(\omega) = \mu(y) + \sigma \sum_{i=1}^Q \sqrt{\lambda_i} e_i(y) Z_i(\omega).} \quad (4.60)$$

Remarque : Nous tronquerons au niveau Q afin de conserver plus de 90% de l'énergie. C'est-à-dire que les valeurs propres vérifierons

$$\sum_{i=1}^Q \lambda_i \div \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \geq 0.9. \quad (4.61)$$

Le niveau Q ne dépend pas de la variance σ^2 mais uniquement de la longueur de corrélation b (notée parfois L).

•

Choix *a priori* de l'espace des processus stochastiques explorés : noyau de covariance exponentielle

Dans la suite de l'étude, notre choix *a priori* sur la classe des processus stochastiques à explorer se porte sur les processus stochastique à noyau de covariance exponentielle, et ce, pour plusieurs raisons :

1. elle est isotrope : nous n'avons pas *a priori* de raisons de privilégier certaines directions ;
2. nous connaissons analytiquement ses fonctions propres et ses valeurs propres : ceci évite d'ajouter d'autres erreurs numériques liées à la résolution de l'équation de Fredholm. De plus, ces fonctions propres sont des sinus et des cosinus et elles permettent, en passant à la limite (approche perturbative), de retrouver la base des harmoniques sphériques (géométrie axisymétrique) ou des fonctions de Fourier (géométrie plane) intensivement utilisées en approche par perturbation.
3. Ce type de noyau est très proche de ceux utilisés dans la littérature, par exemple dans [YZL⁺06a, HDYW11] à ceci près que les variables aléatoires pondérants les fonctions de base sont gaussiennes et non corrélées aux modes propres du développements (ces modes sont fixés dans [YZL⁺06a, HDYW11]).
4. Enfin, ce noyau est paramétré par deux quantités, sa variance qui caractérisera l'amplitude de la perturbation initiale et sa longueur de corrélation qui caractérisera les modes d'excitation de l'interface initiale.

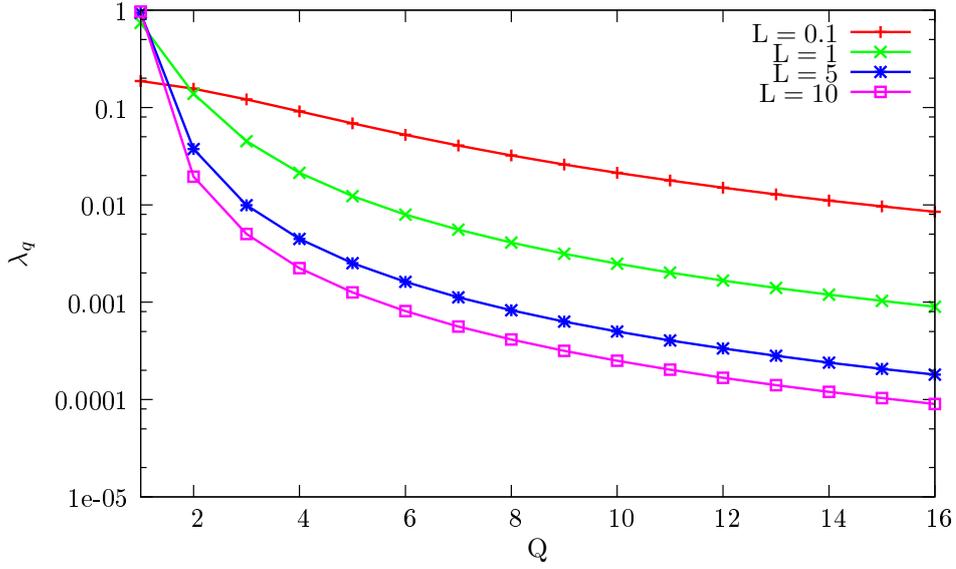


FIGURE 4.23 – Convergence des valeurs propres du noyau exponentiel pour différentes longueurs de corrélation

Nous donnons ici analytiquement les fonctions propres et les valeurs propres pour un processus stochastique $F_y(\theta)$ indexé sur $[-a; a]$ de covariance exponentielle.

La fonction propre f associée à la valeur propre λ vérifie l'équation de Fredholm suivante :

$$\forall y \in [-a; a], \lambda f(y) = \int_{-a}^a e^{-c|y-y'|} f(y') dy'. \quad (4.62)$$

Séparons l'intégrale de l'équation 4.62 en deux.

$$\begin{aligned} \forall y \in [0; 1], \lambda f(y) &= \int_{-a}^y e^{-c(y-y')} f(y') dy' + \int_y^a e^{-c(y'-y)} f(y') dy' \\ \lambda f(y) &= e^{-cy} \int_{-a}^y e^{cy'} f(y') dy' + e^{cy} \int_a^1 e^{-cy'} f(y') dy'. \end{aligned} \quad (4.63)$$

En dérivant deux fois par rapport à y , on montre que f vérifie l'équation différentielle :

$$f''(y) + \omega^2 f(y) = 0 \quad (4.64)$$

avec

$$\omega^2 = \frac{2c - \lambda c^2}{\lambda} \quad (4.65)$$

et les conditions aux limites obtenues à partir de la première dérivation

$$\begin{aligned} cf(a) + f'(a) &= 0 \\ cf(-a) + f'(-a) &= 0. \end{aligned} \quad (4.66)$$

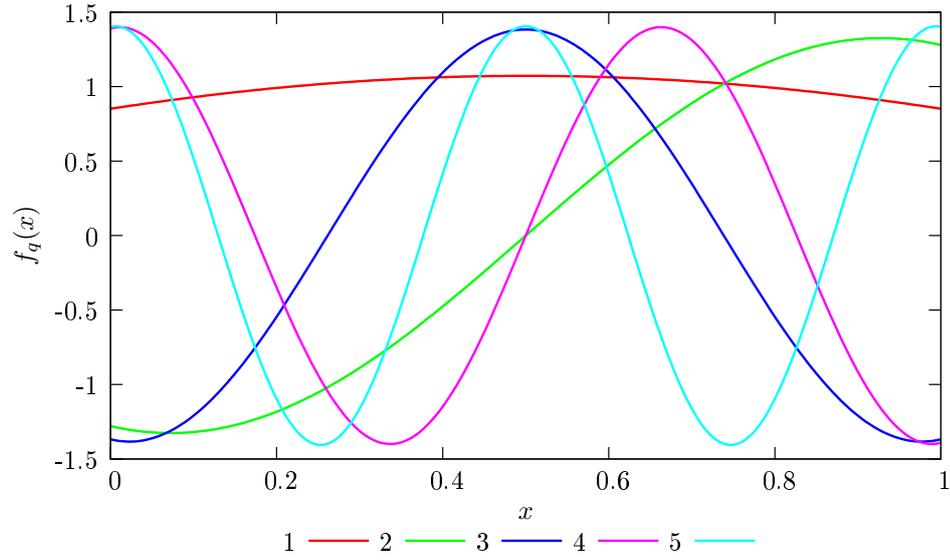


FIGURE 4.24 – Fonctions propres du noyau exponentiel pour $L = 1$ et $\sigma = 0.1$. Modes 1 à 5. Les modes élevés ont une fréquence plus grande.

Finalement, le processus s'écrit :

$$F_y(\theta) = \mu + \sigma \sum_{q=1}^Q \sqrt{\lambda_q^i} Z_q^i(\theta) f_q^i(y) \quad (4.67)$$

avec $i = 1$ si q est impair et $q = 2$ si q est pair.

Avec :

– pour $i \in \{1, 2\}$

$$\lambda_q^i = \frac{2c}{(\omega_q^i)^2 + c^2} \quad (4.68)$$

- les $(\omega_q^i)_{q \in \mathbb{N}^*}$ sont les solutions ordonnées positives de $c - \omega \tan(a\omega) = 0$
- les $(\omega_q^i)_{q \in \mathbb{N}^*}$ sont les solutions ordonnées positives de $\omega + c \tan(a\omega) = 0$
- les fonctions de base orthonormées sur $[-a; a]$ sont données par

$$\begin{cases} f_q^1(y) &= \frac{\cos(\omega_q^1 y)}{\sqrt{a + \frac{\sin(2\omega_q^1 y)}{2\omega_q^1}}} \\ f_q^2(y) &= \frac{\sin(\omega_q^2 y)}{\sqrt{a - \frac{\sin(2\omega_q^2 y)}{2\omega_q^2}}} \end{cases} \quad (4.69)$$

- les variables aléatoires Z_q^i complètent la caractérisation du processus stochastique. En pratique, elles suivront des lois uniformes iid $\mathcal{U}(-1, 1)$.

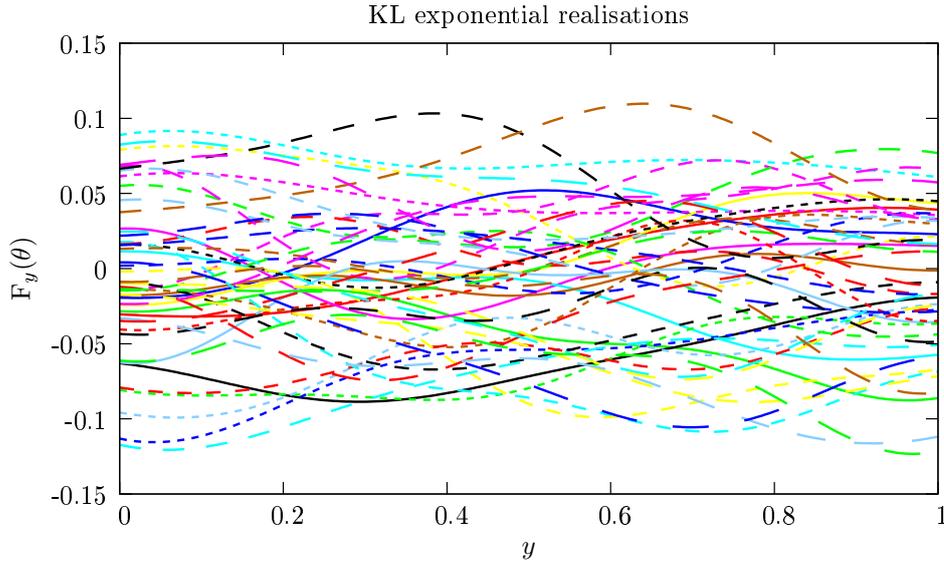


FIGURE 4.25 – Réalisations (50) du processus stochastique pour un noyau exponentiel pour $L = 1$ et $\sigma = 0.1$. Pour une longueur de corrélation grande, les réalisations du processus sont davantage régulières.

Remarque : Plus la longueur de corrélation est faible devant la longueur du domaine et plus le développement nécessite de termes pour être convergé et pour que l'approximation du processus soit bonne. Cela est illustré par la convergence des valeurs propres du noyau exponentiel pour différentes longueurs de corrélation 4.3.2. La convergence est plus rapide lorsque la longueur de corrélation est grande. •

Le problème d'inversion bayésienne se réduit donc à un problème bidimensionnel sur les paramètres du noyau de covariance exponentiel (b et σ) de l'interface initiale séparant les deux fluides dans le tube à choc : nous recherchons les paramètres b et σ ayant la plus grande probabilité d'expliquer l'évolution de la taille des instabilités dans l'expérience VS85 de [VS95].

Présentation et justification des différents paramètres de l'étude

Dans un premier, il s'agit de considérer une plage d'exploration pour les paramètres σ et b : cette plage d'exploration est contrainte par la discrétisation spatiale imposée par l'amplitude initiale de la taille des instabilités (ce qui impactera principalement N_x) et le temps de calcul d'une simulation ainsi que le nombre de simulations possibles pour

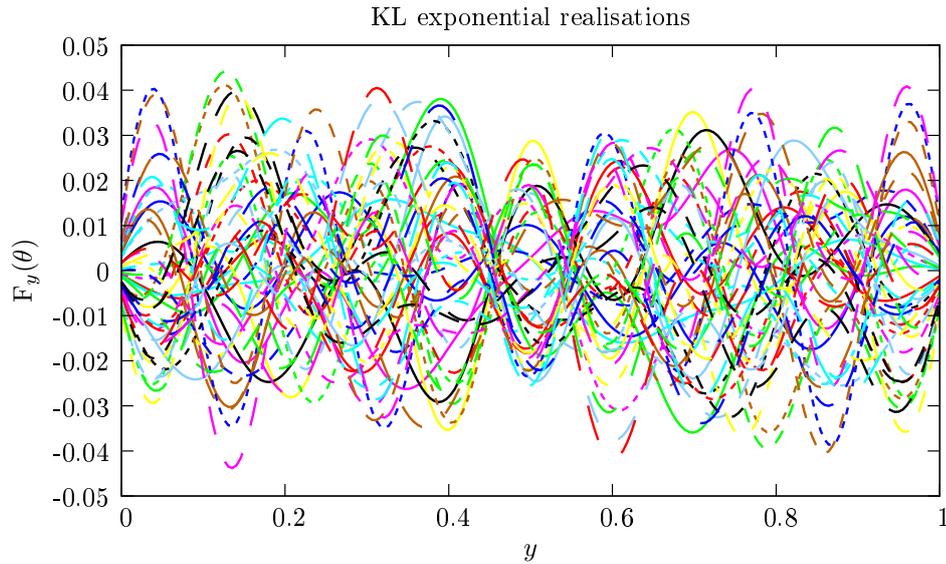


FIGURE 4.26 – Réalisations (50) du processus stochastique pour un noyau exponentiel pour $L = 0.1$ et $\sigma = 0.1$. Pour une longueur de corrélation petite, les réalisations du processus sont davantage chahutées.

l'étude (ce qui conditionnera le nombre de points de quadrature N_q pour une simulation).

Ainsi, l'intervalle d'exploration sur σ imposera des contraintes sur N_x (ce problème à déjà été abordé dans les sections précédentes) alors que l'intervalle d'exploration de b impose des contraintes sur le nombre de variables aléatoires à prendre en compte dans le développement de Karhunen-Loève et donc le nombre total de simulation de l'étude.

Abordons tout d'abord la question de l'intervalle d'exploration pour b : nous considérerons que le développement de Karhunen-Loève est raisonnablement résolu si la troncature dimensionnelle assure de contenir au moins 90% du spectre total du processus, cf. (4.61). En choisissant un intervalle d'exploration de $b \in [0.5, 1.5]$, pour satisfaire la contrainte précédente, la discrétisation du processus stochastique initiale nécessite au moins $Q = 3$ variables aléatoires dans le développement de Karhunen-Loève au plus $Q = 4$ variables aléatoires pour les valeurs de $b \leq 0.6$. Ceci est résumé sur la figure 4.27 où est représenté le pourcentage d'énergie contenu par les modes d'ordre Q selon la formule dans le membre de gauche de (4.61), en fonction de la valeurs de b .

Pour les besoins de l'étude, nous avons sélectionné deux jeux de paramètres pertinents pour l'étude bayésienne, nous les présentons et parlerons dans la suite d'une étude dite *nominale* et d'une étude *sous discrétisée*.

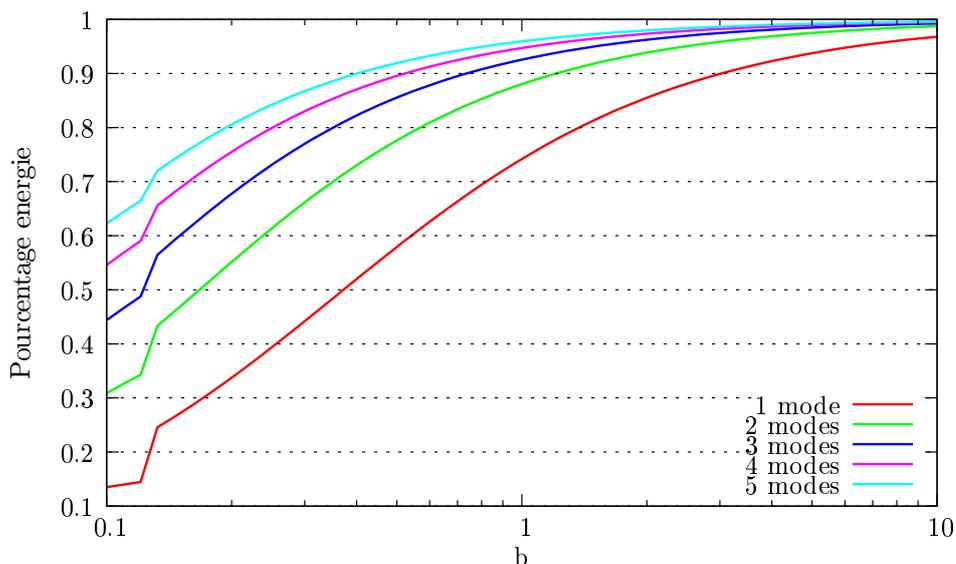


FIGURE 4.27 – Pourcentage d’énergie dans le développement de Karhunen-Loève pour un noyau exponentiel en fonction de la longueur de corrélation pour différents nombres de modes conservés dans le développement. On impose de conserver 90% de l’énergie. Pour une longueur de corrélation au dessus de 0.6, il faut conserver 4 modes pour avoir 90% de l’énergie.

Caractéristiques de l’étude nominale

En choisissant des points de quadrature de Gauss-Legendre avec $N_q = 5$ dans chacune des directions de \mathbf{Z} permettant de paramétrer le processus stochastique, une simulation nécessitera $N_q^Q = 5^Q$, soit $5^3 = 125$ simulations pour les longueurs de corrélation les plus grandes ($b > 0.6$) ou $5^4 = 625$ pour les longueurs de corrélation les plus faibles ($b \leq 0.6$).

En choisissant σ réparti uniformément dans l’intervalle $[0.005, 0.01]$ et pour les longueurs de corrélation choisies précédemment, une discrétisation spatiale de $N_x = 2000$ mailles dans chaque direction assure d’avoir une moyenne de 11 mailles par amplitude de perturbation initiale avec une assurance d’avoir 80% des simulations avec plus de 8 mailles par amplitude de perturbation initiale et 20% de simulations ayant seulement entre 4 et 8 mailles par amplitude de perturbation initiale (0% en dessous de 4 mailles par amplitude).

Le plan d’expérience pour l’étude bayésienne est construit en répartissant les points de manière uniforme dans l’intervalle $[0.005, 0.01]$ pour σ et de manière log-uniforme¹⁷ dans l’intervalle $[0.5, 1.5]$ pour b . En prenant un plan d’expérience pour l’étude bayésienne avec 5 points par direction (soit 25 points en tout), l’étude bayésienne que nous qualifierons

17. Pour compenser le fait que le noyau de corrélation dépende de b de manière exponentielle.

de *nominale* représente un total de $5 \times 5^4 + 20 \times 5^3 = 5625$ simulations en tout. Nous rappelons que chaque calcul est indépendant des autres et tous peuvent être lancés en même temps sur autant de nœuds qu’il y a de simulations. Ils ne nécessitent aucune communications inter-nœuds, ce qui est communément appelé de *l’embarasingly parallel*.

L’étude correspondant au jeu de paramètres précédent est une étude longue compte-tenu du temps restant pour cette thèse. Celle-ci a été lancée mais les simulations ne sont à ce jour toujours pas terminées. Il est par conséquent trop tôt pour présenter une analyse et les post-traitements sur l’étude que nous pouvons qualifier de convergée. En revanche, en allégeant certaines hypothèses, notamment de discrétisation spatiale, il a été possible d’obtenir des résultats numériques relativement pertinents et *interprétables sous certaines conditions*.

Caractéristiques de l’étude sous-discrétisée

Ainsi, pour l’étude *en temps court*, nous choisissons de nous restreindre à un jeu de paramètres moins ambitieux sur lesquels nous pourrions commencer certaines interprétations sinon éprouver nos routines de post-traitement.

Concernant dans un premier temps la discrétisation stochastique, la pré-étude de la section 4.2 permet de confirmer le fait que l’observable d’intérêt étant relativement régulière, un nombre faible de points de quadrature N_q est suffisant pour approcher les variables aléatoires modélisant l’incertitude sur la position de l’interface au cours du temps à condition de tronquer l’ordre de quadrature P en conséquence. Ainsi, pour cette étude rapide sous-discrétisée, nous choisissons de prendre $N_q = 3$: ceci implique que chaque calcul du plan d’expérience bayésien nécessitera N_q^Q calculs or nous tronquons le développement de Karhunen-Loève à $Q = 4$ pour $b \leq 0.6$ et $Q = 3$ pour $b > 0.6$, ce qui implique donc que pour $Q = 4$, une simulation nécessite $3^4 = 81$ lancements du code hydrodynamique 2D alors que pour $Q = 3$, il en faudra $3^3 = 27$. En accord avec la pré-étude de la section 4.2 nous tronquerons l’ordre polynomial à $P = 3$ dans chacune des directions stochastiques.

Concernant la discrétisation spatiale, nous effectuerons les calculs avec seulement 1000 mailles dans chaque direction. Ceci assure d’avoir une moyenne de 6 mailles par amplitude de perturbation initiale avec une assurance d’avoir 80% des simulations avec plus de 4 mailles par amplitude de perturbation initiale et 20% de simulations ayant seulement entre 2 et 4 mailles par amplitude de perturbation initiale (0% en dessous de 2 mailles par amplitude). Ce nombre de mailles est faible compte-tenu des études précédentes mais il est calibré pour permettre un temps de restitution avant la fin de cette thèse.

Le plan d’expérience pour l’étude bayésienne est construit en répartissant les points de manière uniforme dans l’intervalle $[0.005, 0.01]$ pour σ et de manière log-uniforme¹⁸ dans

18. Pour compenser le fait que le noyau de corrélation dépende de b de manière exponentielle.

l'intervalle $[0.5, 1.5]$ pour b . Le fait de prendre des calculs sous-discrétisés spatialement nous permet en outre de raffiner un peu notre plan d'expérience bayésien en prenant un plan d'expérience pour l'étude bayésienne avec 10 points par direction (soit 100 points en tout) ce qui nous permettra d'évaluer la pertinence de l'approximation gPC pour l'étude bayésienne (approximation gPC sur la pdf a posteriori comme effectuée dans le chapitre 3 et [LBP12]).

Ainsi, l'étude bayésienne que nous qualifierons de *sous discrétisée* représente un total de $20 \times 3^4 + 80 \times 3^3 = 3780$ simulations indépendantes (*embarassingly parallel*).

4.3.3 Résolution du problème d'inférence bayésienne sur les expériences de tubes à choc de Richtmyer-Meshkov de [VS95]

Dans cette section nous présentons les résultats de l'étude bayésienne obtenue pour l'étude *sous discrétisée* (nous rappelons que l'étude nominale convergée est en cours de calcul et fera l'objet de considérations futures) dont les caractéristiques sont rappelées dans la sous-section qui précède. L'objectif dans cette section est de déterminer le maximum de vraisemblance par les paramètres (σ, b) expliquant au mieux les expériences de [VS95].

Afin de confronter les résultats numériques aux résultats expérimentaux, il est nécessaire de définir une fonction de vraisemblance qui quantifiera l'écart entre les observations expérimentales de [VS95] et nos résultats issus d'un code de résolution numérique.

Nous choisissons, comme dans le chapitre 3, une fonction de vraisemblance gaussienne. Il s'agit de la fonction de vraisemblance la plus utilisée, son support infini permet de donner un 'score' à chacune des réalisations du plan d'expérience bayésien. Ainsi pour chaque temps t_i , on dénote par m_i la mesure expérimentale obtenue au temps t_i dans [VS95] et, de manière plus concise que précédemment, par $\Delta_{int}^{\max}(t_i, \theta)$ le résultat numérique obtenu par simulation dans les conditions d'étude sous discrétisée, où $\theta = (\sigma, b) \sim (\mathcal{U}([0.005, 0.01]), \mathcal{U}([0.5, 1.5]))$ et le vecteur aléatoire modélisant l'*a priori*, la fonction de vraisemblance à un temps t_i prend la forme suivante :

$$\mathbb{P}(m_i|\theta) = \pi_\varepsilon(m_i - \Delta_{int}^{\max}(t_i, \theta)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s_i}} \exp \frac{(m_i - \Delta_{int}^{\max}(t_i, \theta))^2}{2s_i}. \quad (4.70)$$

Les mesures expérimentales au temps t_i seront considérées indépendantes des mesures aux autres temps et la confiance en les mesures¹⁹ est quantifiée par une valeur plus ou moins grande de l'écart-type s_i au temps t_i de la fonction de vraisemblance. Pour des raisons de simplicité, nous choisissons de fixer $\forall i, s_i = 0.05$, soit une confiance de l'ordre de 5% sur nos mesures et simulations. À noter qu'il serait tout à fait légitime d'avoir

19. et en la précision de la méthode numérique des simulations

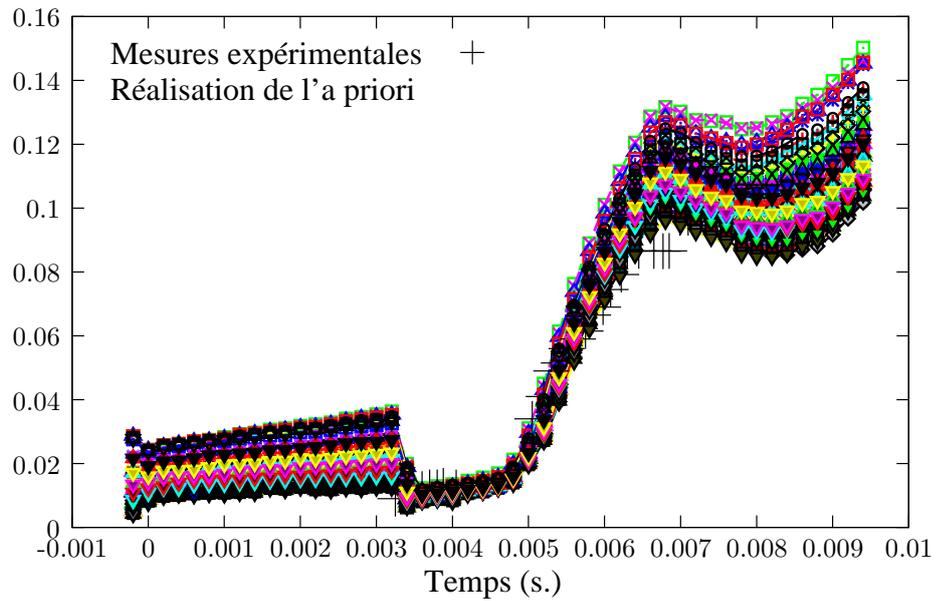


FIGURE 4.28 – Toutes simulations confondues pour l'étude bayésienne sous discrétisée quand on fait varier les paramètres b et σ dans leur domaine de variation, sur $[0.5; 1.5]$ pour b et $[10^{-3}; 10^{-2}]$ pour σ . Le domaine de variation de réduit lors du passage du choc à $t = 0.0033$ puis s'élargit avec la croissance des instabilités. Pour cette figure, on prend $N_q = 4$ points de quadrature de Gauss-Legendre par dimension, un degré $P = 3$, $Q = 3$ mode Karhunen-Loève, 5000 réalisations de Monte-Carlo et un maillage 1000×1000 .

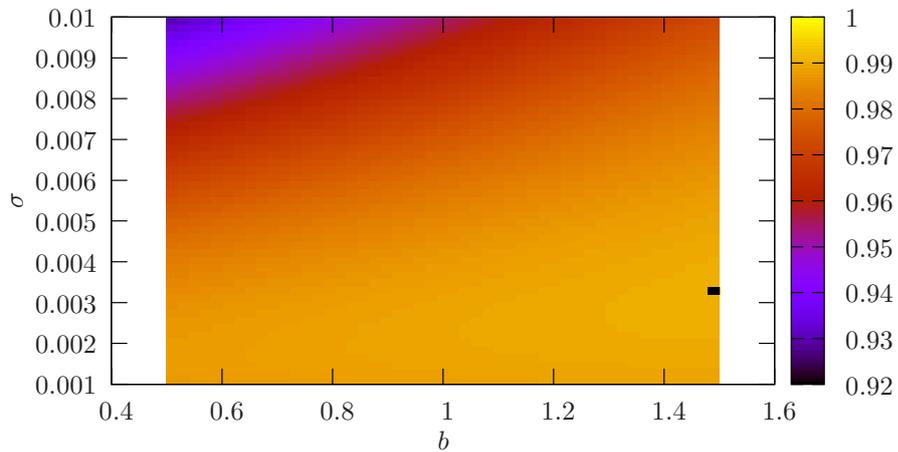


FIGURE 4.29 – Pdf *a posteriori* de la distribution initiale en b, σ . Le maximum de vraisemblance est en $b = 1.5, \sigma = 0.036$, matérialisé par le carré noir.

un écart-type s_i quantifiant la confiance en les mesures et simulations croissant avec le temps : par exemple, il est bien connu en analyse numérique que l'erreur commise croît avec le temps final de la simulation. Nous choisissons tout de même ici de le garder constant car des changements de valeurs pour s_i laissent invariant le maximum (et le minimum) de vraisemblance (i.e. les observables statistiques d'intérêt dans notre cas).

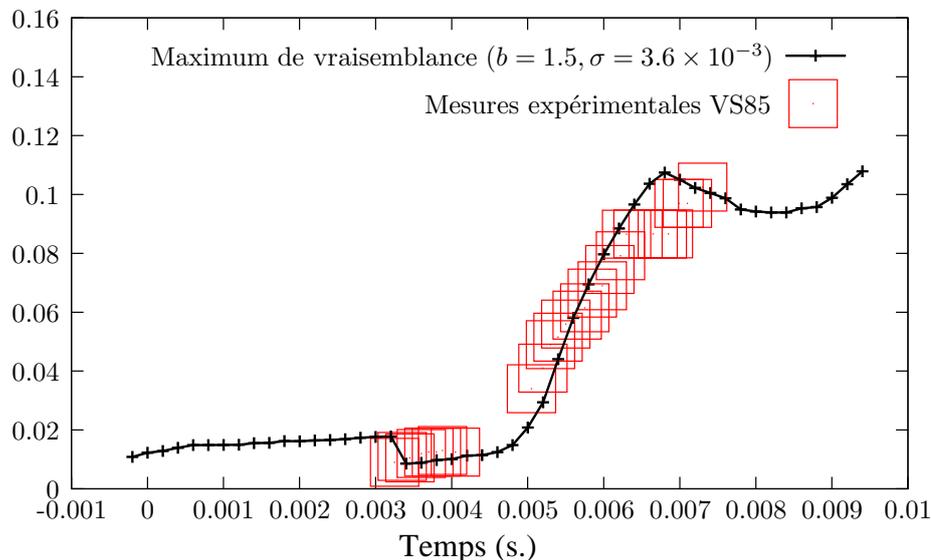


FIGURE 4.30 – Différentes TMZ a posteriori correspondantes au maximum a posteriori pour 1000×1000 mailles. Les mesures expérimentales de [VS95] sont représentées par des carrés rouges.

La figure 4.28 superpose les points de données expérimentales à toutes les courbes obtenues par le plan d'expérience bayésien : il est intéressant de constater que les tailles d'instabilités au passage du second choc, pour $t \in [3.2ms, 4.8ms]$, sont relativement indépendantes des paramètres σ, b initiaux. Ce phénomène est également observé par les expérimentateurs dans [VS95] : la forme initiale de l'interface a une influence importante sur le taux de croissance initial (i.e. pour $t \in [0ms, 3.2ms]$) des instabilités mais les taux de croissance après rechoc (après $t = 3.2ms$) sont relativement indépendants de celle-ci. Nous retrouvons ce phénomène dans la figure 4.28 avec le fait que les courbes issus de simulations sont plus resserrées dans la zone $t \in [3.2ms, 4.8ms]$.

La figure 4.29 présente la pdf *a posteriori* obtenue après post-traitement des 3780 simulations confrontées aux expériences de [VS95] (cf. figure 4.22) avec les fonctions de vraisemblance aux temps t_i données par (4.70) et les variables aléatoires *a priori* données par $\theta = (\sigma, b) \sim (\mathcal{U}([0.005, 0.01]), \mathcal{U}([0.5, 1.5]))$ pour l'étude bayésienne dite 'sous discrétisée'. Le maximum de vraisemblance sur la figure 4.29 est matérialisé par un carré noir et il correspond au couple de valeurs ($\sigma = 0.0036, b = 1.5$). Celui-ci est situé au bord

du domaine d'exploration ce qui porte à croire que la distribution des paramètres (σ, b) n'était pas correctement choisi *a priori*. Toutefois, nous nous retiendrons de recalibrer l'*a priori*, l'étude étant sous discrétisée : en effet le maximum de vraisemblance pour cette étude est précisément dans la région de l'espace des paramètres pour lesquels la discrétisation spatiale est mauvaise. D'ailleurs, on constate que la pdf *a posteriori* de la figure 4.29 est relativement uniforme dans l'espace des $\sigma \leq 0.005$ ce qui tend à montrer que la discrétisation spatiale est le facteur contraignant pour cette étude et que des valeurs de σ dans le rectangle $[0.001, 0.005] \times [0.5, 1.5]$ ont à peu près la même probabilité d'expliquer les données expérimentales.

Il est possible de rejouer le jeu de paramètres réalisant le maximum de vraisemblance et de comparer la courbe obtenue avec les données expérimentales. C'est ce qui est réalisé figure 4.30 : le maximum de vraisemblance présente un bon accord avec les données expérimentales de [VS95], au moins en temps court. Pour les temps plus longs, nous constatons que les courbes ont tendance à s'éloigner. Certes, il faut rappeler que la simulation est sous-discrétisée pour l'instant mais elle permet de rappeler un résultat d'analyse numérique classique : l'erreur commise dans une simulation tend à croître avec le temps final. Ce phénomène sera à prendre en compte une fois l'étude nominale effectuée. Bien sûr, l'explication peut également provenir du fait que la physique mise en jeu en temps long ne peut plus uniquement être expliquée par les équations d'Euler (phénomène visqueux et transition vers la turbulence).

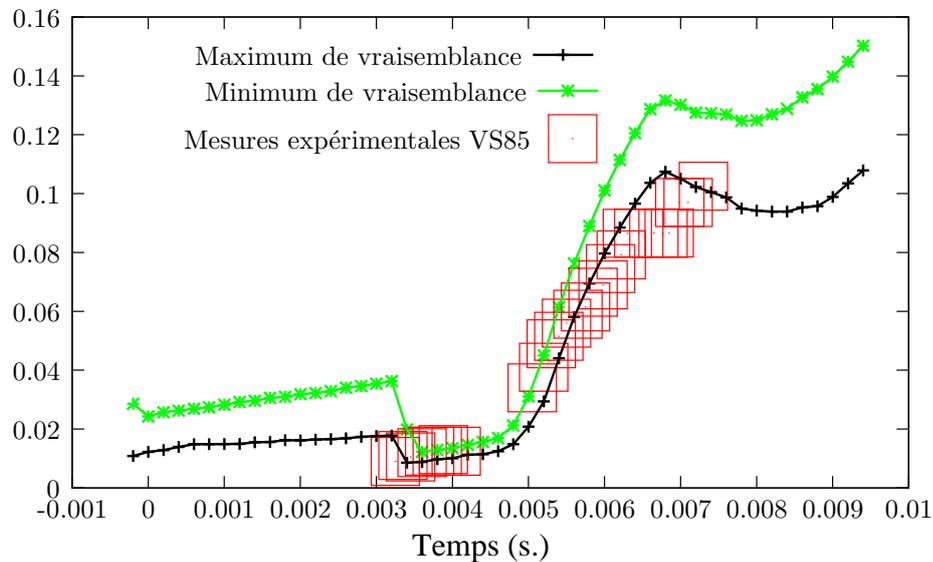


FIGURE 4.31 – Différentes TMZ *a posteriori* correspondantes au minimum et au maximum *a posteriori* pour 1000×1000 mailles. Les mesures expérimentales de [VS95] sont représentées par des carrés rouges.

La figure 4.31 présente, en plus des résultats expérimentaux de [VS95] et de la courbe réalisant le maximum de vraisemblance de l'étude bayésienne, le minimum de vraisemblance de cette même étude.

Conclusion partielle de la section 4.3 : cette première étude bayésienne constitue, nous le répétons, une première étape en attendant les résultats de la campagne de calculs dite 'nominale'. Toutefois, cette première étude a une importance pratique puisqu'elle a permis notamment de tester et éprouver nos routines de post-traitements bayésien et de les vérifier. Le principal résultat de cette étude est que même avec un jeu de simulations sous-discretisé, l'approche bayésienne permet de calibrer le processus stochastique initial de manière à expliquer avec la plus grande probabilité les données expérimentales et fournit un maximum de vraisemblance intéressant. Ce dernier résultat semble ouvrir une nouvelle voie vers l'étude d'instabilités hydrodynamiques par méthode de type Chaos Polynomial généralisé pour généraliser les méthodes perturbatives.

Conclusion du chapitre

Dans une dernière partie, nous avons focalisé sur des problèmes de dynamique des gaz compressibles en configuration tube à choc de Richtmyer-Meshkov.

Nous avons dans un premier temps rappelé un certain nombre de résultats sur les méthodes perturbatives et les avons comparées aux méthodes par Chaos Polynomial généralisé. Nous avons mis en évidence le fait que les résultats issus des méthodes perturbatives appliquées à des problèmes de dynamique des gaz compressibles peuvent être retrouvés par application des méthodes de type Chaos Polynomial. En ce sens, nous avons montré que le Chaos Polynomial généralise les méthodes par perturbations.

Cette propriété a motivé une première étude à rapprocher de celle effectuée dans [YZL⁺06a] dans laquelle nous avons construit un problème de propagation d'incertitudes dans une configuration de type tube à choc de Richtmyer-Meshkov avec condition initiale incertaine dont la caractérisation est parfaitement définie et contrôlée. Au cours de cette étude nous avons obtenu une solution de référence par méthode Monte-Carlo pour un problème ambitieux et avons ainsi à disposition une base de donnée de résultats fournie qui pourra facilement être revisitée pour d'autres observables d'intérêt fonctions de la position de l'interface au cours du temps et dans l'espace ou pour d'autres méthodes d'approximation stochastique.

Cette étude a également permis de mettre en évidence l'existence de paramètres de discrétisation pertinent compte tenu de difficultés théoriques bien connues pour obtenir de manière efficace des estimateurs d'erreur (*a priori*-*a posteriori*) lorsque l'on considère des systèmes de lois de conservation (en régime fortement non linéaire).

Ces paramètres sont exploités dans une dernière étude bayésienne (dont les calculs sont en passe de se terminer) et le matériel des chapitres précédents est appliqué dans une première étude bayésienne 'sous-discrétisée' (pour des raisons de temps). Cette première étude a néanmoins une importance pratique puisqu'elle a permis notamment de tester et éprouver nos routines de post-traitements bayésien et de les vérifier. Le principal résultat de cette étude est que même avec un jeu de simulations sous-discrétisé, l'approche bayésienne permet de calibrer le processus stochastique initial de manière à expliquer avec la plus grande probabilité les données expérimentales et fournit un maximum de vraisemblance pertinent. Ce dernier résultat semble ouvrir une nouvelle voie vers l'étude d'instabilités hydrodynamiques par méthode de type Chaos Polynomial pour généraliser les méthodes perturbatives.

A plus long terme, il est évident que la composante visqueuse (i.e. Navier-Stokes) de l'écoulement devra également être prise en compte pour une description plus réaliste de l'interaction choc/turbulence qui apparaît dominante en temps long lorsqu'il y a production de structures à petites longueurs d'onde, pour lesquelles la viscosité ne joue plus un rôle négligeable. La quantification de l'incertitude de ces phénomènes devrait par exemple permettre de mieux comprendre le développement de couches limites derrière l'onde de choc incidente et son influence sur l'accélération de l'écoulement moyen ainsi que les structures en λ dues à l'interaction onde de choc/couche limite aux parois latérales du domaine.

Au niveau algorithmique, il faudra se tourner du côté déterministe vers des codes de calculs comportant une capture/gestion automatique de l'interface instationnaire via une adaptation de maillage. Ceci évitera de pénaliser fortement l'étude en terme de coût de calcul en imposant une finesse de maillage trop importante à l'ensemble du domaine de calcul. Du côté stochastique, toute approche adaptative permettant de gérer au mieux les fortes non-linéarités en temps long (problème du "long-time integration"), e.g. [PL11a, DPL13] et permettant de réduire le nombre d'évaluations du code déterministe sera bénéfique à la résolution du problème stochastique inverse. Ceci reste pour l'instant un problème très ouvert. Enfin lorsque les techniques seront suffisamment matures, il faudra considérer des simulations 3D et vérifier s'il existe aussi des spécificités apportées par une géométrie sphérique par rapport à la majorité des études qui portent plutôt sur un scénario plan ou cylindrique [Bha11].

Plusieurs questions se posent concernant la pertinence des hypothèses nécessaires à la paramétrisation stochastique des imperfections de l'interface initiale : stationnarité, modèle/longueur de corrélation, régularité, gaussianité ? Des aspects plus fondamentaux tels que le choix - de la bonne quantité physique à renseigner pour le modèle, - des bonnes mesures/normes à adopter pour accéder à une certaine forme de convergence des résultats, de la façon de mesurer au mieux la taille de la zone d'instabilités restent à améliorer. Par la suite, un travail important de validation et d'analyse doit être aussi mené pour généraliser cette étude et répondre à certaines questions sur l'influence d'autres paramètres physiques sur le taux de mélange, tels que : - le nombre de Mach, - le nombre

d'Atwood, - l'intensité du choc,...

Enfin, nous soulignons l'importance du calcul parallèle et la possibilité d'exploiter le supercalculateur Tera100 pour les différentes études de ce chapitre : les approches statistiques et probabilistes utilisées dans cette thèse impliquent une résolution stochastique dite 'non intrusive' pour laquelle un code de simulation est utilisé en boîte noire et dont chaque lancement est indépendant des autres. Ces approches, d'un point de vue calcul haute performance, sont qualifiées d'*embarassingly parallel* puisqu'elles ne nécessitent pas de communications entre les processeurs : la puissance de calculs est ainsi exploitée à son optimum.

Chapitre 5

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons dans un premier temps abordé le problème de la propagation d'incertitudes dans les systèmes complexes. Nous avons effectué un état de l'art sur les méthodes spectrales dites par Chaos Polynomial généralisé (approche non intrusive) en précisant les conditions de mise en œuvre sur la loi d'entrée et sur le modèle. Nous avons montré la pertinence de soigner le choix de la base de projection. Nous avons illustré son application sur des exemples simples mais permettant d'anticiper les problèmes intervenant notamment en dynamique des gaz compressibles, physique qui motive les travaux de ce mémoire. Nous avons effectué l'analyse numérique complète de la méthode et étudié des problèmes académiques simples pour mettre en évidence les avantages et les inconvénients du Chaos Polynomial généralisé en application non intrusive (i.e. utilisant un code en boîte noire comme les méthodes Monte-Carlo). L'approche comporte deux principaux inconvénients : la forte dépendance de la complexité du problème au nombre de dimension stochastique du problème (appelé fléau de la dimension dans les ouvrages de la littérature) ainsi que sa sensibilité au phénomène de Gibbs dès lors que la solution présente de forts gradients dans l'espace des paramètres incertains. Concernant la première difficulté, nous n'avons pas apporté de contributions à la discipline, en effet nous avons pu dans cette thèse nous limiter à des dimensions relativement faibles pour les études effectuées. Concernant le second point, à savoir la sensibilité au phénomène de Gibbs et aux transformations non linéaires en général, nous avons proposé une nouvelle méthode basée à la fois sur le Chaos Polynomial généralisé et les méthodes aux moments. La méthode, appelée i-gPC pour iterative-generalized Polynomial Chaos, assure une meilleure approximation que le Chaos Polynomial généralisé classique et présente un intérêt en particulier sur les solutions présentant de forts gradients par rapport aux variables de l'espace stochastique. L'analyse numérique de cette nouvelle méthode a fait l'objet d'une publication soumise à SIAM numerical analysis dont nous attendons le retour des rapporteurs.

Nous avons ensuite abordé la résolution de problèmes inverses impliquant des modèles

fortement non linéaires ou discontinus, en particulier des systèmes de loi de conservation (du type de celui gouvernant la dynamique des fluides compressibles). Nous avons dans un premier temps lié la convergence en norme L^2 de l'approximation du modèle direct à la convergence dans la divergence de Kullback-Leibler de l'approximation de l'a posteriori. En particulier, nous avons posé les conditions pour que la convergence de l'a posteriori au sens de la divergence de Kullback-Leibler soit au moins deux fois plus rapide que la convergence du modèle direct en norme L^2 . Nous avons alors mis en œuvre l'inférence bayésienne dans ce cadre d'approximation stochastique spectrale. Les taux de convergence théoriques ont été illustrés sur des problèmes inverses non linéaires de régularités diverses. Nous avons en outre proposé une approche numérique efficace adaptée aux problèmes inverses fortement non linéaires. Il s'agit de l'amélioration de l'approximation du modèle direct en utilisant l'algorithme auto adaptatif i-gPC. Nous avons montré que l'approche i-gPC pour les problèmes inverses apporte un gain par rapport à l'approche gPC et que nous avons ainsi accéléré la convergence de l'inférence bayésienne. Nous avons démontré l'efficacité de l'approche i-gPC dans un contexte de quadrature numérique finie présentant peu de points.

Enfin, dans une dernière partie, nous avons focalisé sur des problèmes de dynamique des gaz compressibles en configuration tube à choc de Richtmyer-Meshkov. Nous avons dans un premier temps rappelé un certain nombre de résultats sur les méthodes perturbatives et les avons comparées aux méthodes par Chaos Polynomial. Nous avons mis en évidence le fait que les résultats issus des méthodes perturbatives appliquées à des problèmes de dynamique des gaz compressibles peuvent être retrouvés par application des méthodes de type Chaos Polynomial. En ce sens, nous avons montré que le Chaos Polynomial généralise les méthodes par perturbations : cette propriété a motivé une première étude à rapprocher de celle effectuée dans [YZL⁺06a] dans laquelle nous avons construit un problème de propagation d'incertitudes dans une configuration de type tube à choc de Richtmyer-Meshkov avec condition initiale incertaine dont la caractérisation est parfaitement définie et contrôlée. Au cours de cette étude nous avons obtenu une solution de référence par méthode Monte-Carlo pour un problème ambitieux et avons ainsi à disposition une base de donnée de résultats fournie qui pourra facilement être revisitée pour d'autres observables d'intérêt fonctions de la position de l'interface au cours du temps et dans l'espace ou pour d'autres méthodes d'approximation stochastique. Cette étude a également permis de mettre en évidence l'existence de paramètres de discrétisation pertinents compte tenu de difficultés théoriques bien connues pour obtenir de manière efficace des estimateurs d'erreur (*a priori-a posteriori*) lorsque l'on considère des systèmes de lois de conservation (en régime fortement non linéaire). Ces paramètres sont exploités dans une dernière étude bayésienne (dont les calculs sont en passe de se terminer) et le matériel des chapitres précédents est appliqué dans une première étude bayésienne 'sous-discrétisée' (pour des raisons de temps). Cette première étude a néanmoins une importance pratique puisqu'elle a permis notamment de tester et éprouver nos routines de post-traitements bayésien et de les vérifier. Le principal résultat de cette étude est que même avec un jeu de simulations sous-discrétisé, l'approche bayésienne permet de calibrer

le processus stochastique initial de manière à expliquer avec la plus grande probabilité les données expérimentales et fournit un maximum de vraisemblance pertinent. Ce dernier résultat semble ouvrir une nouvelle voie vers l'étude d'instabilités hydrodynamiques par méthode de type Chaos Polynomial pour généraliser les méthodes perturbatives.

Enfin, nous soulignons l'importance du calcul parallèle et la possibilité d'exploiter le supercalculateur Tera100 pour les différentes études de ce chapitre : les approches statistiques et probabilistes utilisées dans cette thèse impliquent une résolution stochastique dite 'non intrusive' pour laquelle un code de simulation est utilisé en boîte noire et dont chaque lancement est indépendant des autres. Ces approches, d'un point de vue calcul haute performance, sont qualifiées d'*embarassingly parallel* puisqu'elles ne nécessitent pas de communications entre les processeurs : la puissance de calculs est ainsi exploitée à son optimum.

Annexe A

Notations

Le tableau ci-dessous présente les différentes notations utilisées dans cette thèse.

$\mathcal{C}^0(\mathcal{E}, \mathcal{F})$: ensemble des fonctions continues de \mathcal{E} à valeurs dans \mathcal{F}

pdf : probability density function (densité de probabilité)

cdf : cumulative density function (fonction de répartition)

$d\mathbb{P}$: mesure de probabilité

$\mathbb{P}(A)$: probabilité de A

$\mathbb{P}(A|B)$: probabilité de A sachant B

$\mathbb{P}^X(x)$: probabilité associée à la variable aléatoire X

$\mathbb{E}[\cdot]$: espérance

$X \sim f(x)$: la variable aléatoire suit la loi de pdf f

UQ : Uncertainty Quantification

u : modèle physique

θ : variable d'entrée incertaine

$\mathbb{R}[x]$: espace des polynômes en x

$\mathbb{R}_n[x]$: espace des polynômes en x de degrés inférieurs ou égal à n

H_k : polynôme de Hermite de degré k

$(\phi_k^\theta)_{k \in \mathbb{N}}$: base polynômiale adaptée à la loi de θ

$(\phi_k^L)_{k \in \mathbb{N}}$: base polynômiale de Legendre

\mathbb{I} : fonction indicatrice

ω_i : poids de quadrature

\propto : proportionnel à

P : degré polynômial gPC

$\lfloor x \rfloor$: partie entière inférieure de x

$\lceil x \rceil$: partie entière supérieure de x

Annexe B

Rappels sur la théorie des probabilités

Objectifs : Dans ce chapitre, nous introduisons dans un premier temps de façon brève la théorie des probabilités. Nous nous sommes inspirés pour cela de [E.08, Shi07, lj07, JJ00, A.N00]. Nous renvoyons le lecteur à ces ouvrages et livres de cours pour plus de détails. •

La théorie des probabilités fournit un formalisme mathématique pour décrire les phénomènes aléatoires. Le résultat d'un événement aléatoire, par opposition à un événement déterministe, n'est pas prévisible. On peut seulement analyser la probabilité, ou la « chance », que tel ou tel événement survienne. Par exemple, le résultat d'un lancer de dés constitue une variable aléatoire. Si le dés a six faces et est non pipé, la probabilité d'obtenir 1 est $\frac{1}{6}$.

Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace de probabilité. Ω désigne l'espace des états, \mathcal{F} une tribu sur Ω et \mathbb{P} une mesure de probabilité sur \mathcal{F} . Définissons dans un premier temps ces objets.

Définition 10 (Espace des états) *On note Ω l'espace des états, c'est-à-dire l'ensemble des configurations possibles d'un phénomène aléatoire.*

Définition 11 (Tribu ou σ -algèbre) *Une tribu ou σ -algèbre \mathcal{F} est une famille de parties de Ω vérifiant :*

1. $\emptyset \in \mathcal{F}$;
2. \mathcal{F} est stable par passage au complémentaire : $\forall A \in \mathcal{F}, A^c = \Omega \setminus A \in \mathcal{F}$;
3. \mathcal{F} est stable par union finie ou dénombrable. Si $\{A_n\}$ est une famille finie ou dénombrable d'éléments de \mathcal{F} alors $\bigcup_n A_n \in \mathcal{F}$.

Un élément de \mathcal{F} est appelé un évènement.

Définition 12 (Mesure de probabilité) *On appelle mesure de probabilité sur l'espace mesurable (Ω, \mathcal{F}) toute application \mathbb{P} de \mathcal{F} dans $[0; 1]$ telle que :*

1. $\mathbb{P}(\emptyset) = 0$ et $\mathbb{P}(\Omega) = 1$;
2. \mathbb{P} est σ additive c'est-à-dire que pour toute famille dénombrable $\{A_n\}$ d'éléments de \mathcal{F} deux à deux disjoints, on a

$$\mathbb{P}\left(\bigcup_n A_n\right) = \sum_n \mathbb{P}(A_n). \quad (\text{B.1})$$

Il s'agit donc d'une mesure positive au sens de la théorie de la mesure, de masse 1.

Nous introduisons la notion de probabilité conditionnelle qui nous sera utile pour l'inférence bayésienne afin de considérer la probabilité d'une mesure expérimentale connaissant un paramètre et la probabilité du paramètre connaissant la mesure expérimentale.

Définition 13 (Probabilité conditionnelle) *Soient $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace de probabilité et B un évènement de \mathcal{F} telle que $\mathbb{P}(B) \neq 0$. On définit la probabilité conditionnelle de $A \in \mathcal{F}$ sachant B par*

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)}. \quad (\text{B.2})$$

Afin d'illustrer la notion de probabilité conditionnelle, nous donnons un exemple concret. Nous considérons un test de dépistage d'une maladie. Ce test est fiable à 99,9%. Trois individu sur 10000 est touché par cette maladie. Un tests sur 10000 sont positifs. L'évènement A correspond au fait d'être atteint par la maladie et B à la positivité du test. On cherche donc la probabilité d'être malade sachant que le test de dépistage est positif. Cette probabilité n'est pas calculable en utilisant la définition B.2. On la calcule à l'aide du théorème de Bayes.

Le théorème de Bayes correspond à une relation d'inversion probabiliste. Elle tient un rôle essentiel dans ce manuscrit.

Théorème 16 *Soient A et B deux évènements de \mathcal{F} de probabilité non nulle. Alors*

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A) \mathbb{P}(B|A)}{\mathbb{P}(B)}. \quad (\text{B.3})$$

Démonstration. Par définition,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(A|B) &= \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)} \\ \mathbb{P}(B|A) &= \frac{\mathbb{P}(B \cap A)}{\mathbb{P}(A)}. \end{aligned}$$

Donc,

$$\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A) \mathbb{P}(B|A) = \mathbb{P}(B) \mathbb{P}(A|B). \quad (\text{B.4})$$

On obtient la formule de Bayes en divisant cette dernière égalité par $\mathbb{P}(B)$ non nulle. 🍑

Reprenons l'exemple du dépistage introduit ci-dessus. D'après les données, $\mathbb{P}(A) = 0.0003$ (probabilité d'être malade), $\mathbb{P}(B) = 0.0001$ (probabilité que le test soit positif) et $\mathbb{P}(B|A) = 0.999$ (probabilité que le test soit positif sachant que l'individu est malade). Ainsi $\mathbb{P}(A|B) = 0.0003 \times 0.999 / 0.0001 = 0.000333$.

Nous aurons également besoin de la notion d'indépendance d'évènements pour exprimer la probabilité d'un échantillon de mesure comme le produit des probabilités de chacune des mesures.

Définition 14 (Évènements indépendants) *Soient A et B deux évènements de l'espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. A et B sont dis indépendants si*

$$\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A) \mathbb{P}(B). \quad (\text{B.5})$$

Définition 15 (Indépendance mutuelle) *Soient A_1, A_2, \dots, A_n n évènements de l'espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Ils sont dis mutuellement indépendants si*

$$\mathbb{P}(A_1 \cap A_2 \cap \dots \cap A_n) = \mathbb{P}(A_1) \mathbb{P}(A_2) \dots \mathbb{P}(A_n). \quad (\text{B.6})$$

Il ne faut pas confondre la notion d'indépendance mutuelle et la notion d'indépendance deux à deux. A_1, A_2, \dots, A_n sont n évènements deux à deux indépendants si pour tout $(i, j), i \neq j$, A_i et A_j sont indépendants. La première implique la seconde. La réciproque est fausse.

Considérons dans ce qui suit l'espace de probabilité $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathbb{P})$ où $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ correspond à la tribu des boréliens sur \mathbb{R} .

Définition 16 (Fonction de répartition) *La fonction de répartition de \mathbb{P} est définie comme l'application de \mathbb{R} dans $[0; 1]$ $F : x \rightarrow F(x) = \mathbb{P}(] - \infty; x])$.*

Sur l'espace $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathbb{P})$, la mesure de probabilité \mathbb{P} est caractérisée par sa fonction de répartition.

Définition 17 (Densité de probabilité) *La mesure \mathbb{P} admet une densité de probabilité f si pour tout intervalle I de \mathbb{R}*

$$\mathbb{P}(I) = \int_I f(x) dx. \quad (\text{B.7})$$

La figure B.1 présente des densités de probabilité de lois continues usuelles.

Nous appellerons également les densités, probability density function ou pdf.

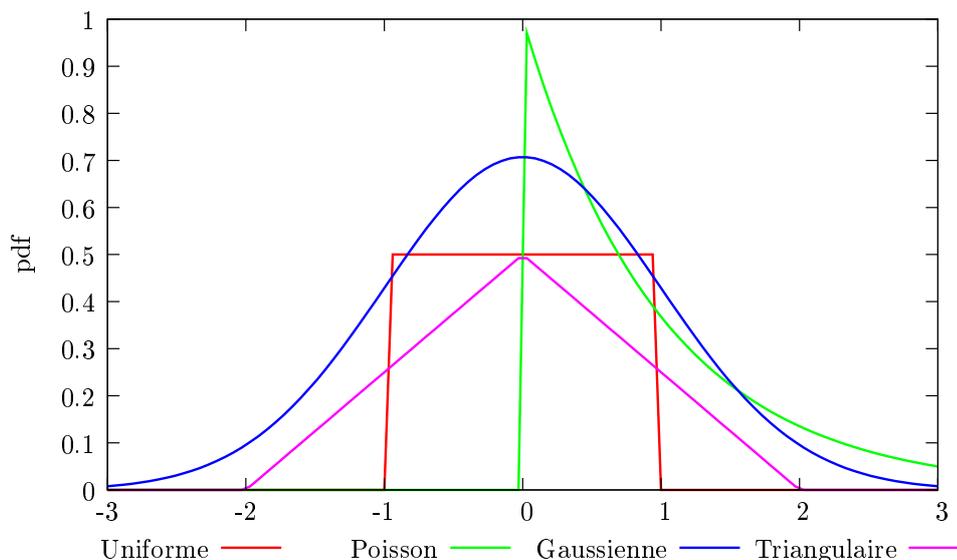


FIGURE B.1 – Densité de probabilité des lois continues usuelles

La notion de variable aléatoire constitue un concept fondamentale de la théorie des probabilités.

Définition 18 (Variable aléatoire) Soient $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace de probabilité et E un espace muni d'une tribu \mathcal{E} . On appelle variable aléatoire à valeurs dans E toute application mesurable X de Ω dans E , c'est-à-dire telle que

$$\forall A \in \mathcal{E} : X^{-1}(A) \in \mathcal{F}. \quad (\text{B.8})$$

Remarque : Les variables aléatoires que nous traiterons seront soit continues à valeurs dans \mathbb{R}^d , soit discrètes à valeurs dans \mathbb{Z} . Dans les deux cas, il s'agit de la même définition.

•

Une variable aléatoire se caractérise par sa loi.

Définition 19 (Loi d'une variable aléatoire) Soit X une variable aléatoire de (Ω, \mathcal{F}) dans (E, \mathcal{E}) . L'application $\mathbb{P}_X : \mathcal{E} \rightarrow [0; 1]$ telle que

$$\forall A \in \mathcal{E} : \mathbb{P}_X(A) = \mathbb{P}(X^{-1}(A)) \quad (\text{B.9})$$

définit une mesure de probabilité sur l'espace mesurable (E, \mathcal{E}) , appelée mesure image de \mathbb{P} par X . La mesure \mathbb{P}_X est appelée distribution ou loi de X . Par abus de notation, on notera souvent \mathbb{P} au lieu de \mathbb{P}_X .

Les notions de variable aléatoire, fonction de répartition et de densité de probabilité s'étendent à \mathbb{R}^d avec $d \in \mathbb{N}^*$

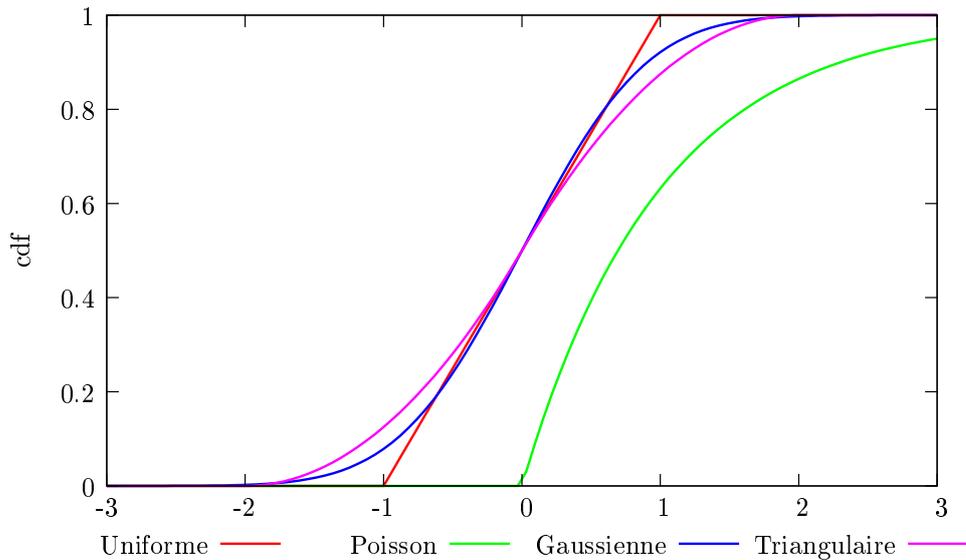


FIGURE B.2 – Fonction de répartition des lois continues usuelles

Définition 20 (Vecteur aléatoire) *Un vecteur aléatoire de $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d), \mathbb{P})$ est un vecteur de \mathbb{R}^d dont chacune des composantes est une variable aléatoire de $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathbb{P})$.*

Dans cette thèse, nous auront à considérer des suites de variables aléatoires, par exemple dans le cadre des approximations par polynôme du chaos successives de degré P . Nous étudierons les convergences dans l'espace L^2 des variables aléatoires de variance finie. Plus généralement, nous définissons la convergence dans L^p , $p \in \mathbb{N}^*$.

Définition 21 (Convergence L^p) *On dit que la suite X_n de variables aléatoires d'un espace normé converge dans L^p vers X si :*

- les X et X_n sont dans $L^p(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$;
- $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E} [\|X - X_n\|^p] = 0$.

On note $X_n \xrightarrow{L^p} X$.

Les cas les plus importants sont la convergence en moyenne ($p = 1$) et la convergence quadratique ($p = 2$).

Il existe également la convergence presque sûr, la convergence en probabilité (chapitre 17 de [JJ00]) et la convergence en loi (chapitre 18 de [JJ00]). Nous ne définissons pas ces notions ici car nous ne les utilisons pas dans ce manuscrit.

La notion de moment statistique d'une variable aléatoire réelle nous permettra entre autre de calculer la base polynômiale orthonormale par rapport à la loi de la variable aléatoire.

Définition 22 (Moment statistique d'une variable aléatoire réelle) *Soit X une variable aléatoire réelle de loi \mathbb{P}_X . Le moment statistique d'ordre p , $p \in \mathbb{N}$, de X est défini par*

$$\begin{aligned}\mu^p &= \int_{\mathbb{R}} x^p \, d\mathbb{P}_X(x) \\ &= \int_{\Omega} X(\omega)^p \, d\mathbb{P}(\omega).\end{aligned}$$

Pour terminer, définissons un processus stochastique.

Définition 23 (Processus stochastique) *Un processus stochastique est un ensemble de variables aléatoires indexé par $y \in \mathcal{D}$, un compact de \mathbb{R} . Pour tout y dans \mathcal{D} , F_y est une variable aléatoire.*

Nous noterons $F_y(\omega)$ le processus stochastique indexé par y .

Définition 24 (Histogramme) *Soit X une variable aléatoire réelle. On dispose de n réalisations de X : x_1, x_2, \dots, x_n . L'histogramme \hat{f} de X est :*

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}\{|x - x_i| \leq \frac{1}{2}\} \quad (\text{B.10})$$

avec h dépendant du nombre de classes k de l'histogramme : $kh = \max_i x_i - \min_i x_i$. Il existe différentes heuristiques pour le choix de k :

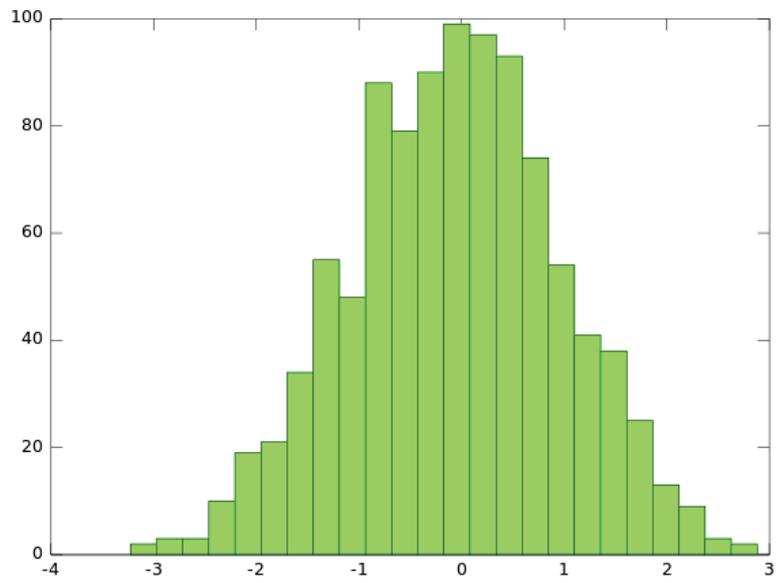
$$k = \lfloor \sqrt{n} \rfloor \quad (\text{B.11})$$

$$\text{ou } \lceil \log_2(n) + 1 \rceil \quad (\text{B.12})$$

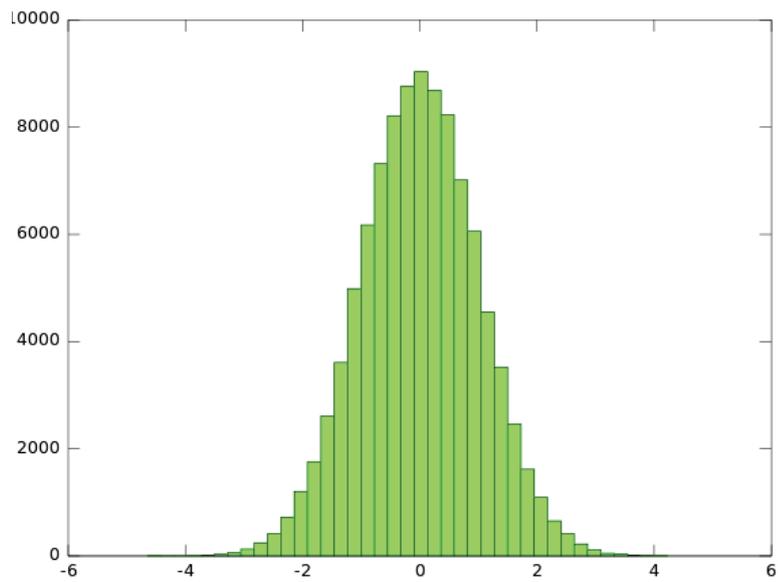
$$\text{ou } \lceil \frac{10}{3} \log(n) + 1 \rceil \quad (\text{B.13})$$

$$\text{ou } \lceil 2n^{\frac{1}{3}} \rceil \quad (\text{B.14})$$

Pour de plus amples précisions sur la théorie de probabilité, nous renvoyons le lecteur aux ouvrages et cours [E.08, Shi07, lj07, JJ00, A.N00].



(a) 1000 tirages



(b) 100000 tirages

FIGURE B.3 – Exemple d’histogramme d’une variable aléatoire gaussienne, évolution en fonction du nombre de tirages

Annexe C

Rappels sur les méthodes de propagation d'incertitudes non spectrales

Objectifs : Nous effectuons un bref rappel sur deux méthodes de propagation d'incertitudes non spectrales très utilisées dans la littérature [AH07, Sap06, Sud07, SK00] : la méthode de Monte-Carlo, non intrusive et la méthode de perturbation, intrusive. Les méthodes sont illustrées sur une analyse de second moment (détermination de moyenne et variance) sur un système de lois de conservation quelconque 1D stochastique. •

Dans cette annexe, on se donne un système de lois de conservation hyperbolique non linéaire 1D

$$\partial_t u + \partial_x f(u) = 0, u \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n. \quad (\text{C.1})$$

Ξ est une variable aléatoire de mesure de probabilité $d\mathcal{P}$, de moyenne μ et de variance σ^2 . Supposons que l'incertitude porte sur la condition initiale $u^0 : (x, \omega) \in \mathcal{D} \times \Omega \mapsto u^0(x, \Xi(\omega)) \in \mathbb{R}^n$ mais l'étude est généralisable à d'autres sources d'incertitudes.

C.1 Méthode de Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo est la méthode de propagation d'incertitudes la mieux connue et la plus utilisée [Sap06]. Elle repose sur l'application directe de deux théorèmes importants : la loi forte des grands nombres et le théorème centrale limite.

Théorème 17 (Loi forte des grands nombres) *Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées telles que $\mathbb{E}[X_n^2] < \infty$. Alors l'estimation*

$(\overline{X}_n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie par

$$\overline{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n X_k$$

converge presque sûrement vers $\mathbb{E}[X_1]$.

L'hypothèse $X_n \in L^2(\Omega)$ peut être relaxée (voir [Sap06]) mais dans le cadre de notre étude, les variables aléatoires sont considérées de carrés intégrables.

Théorème 18 (Théorème Central Limite) *Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(\overline{X}_n)_{n \in \mathbb{N}}$ définies comme précédemment. Notons $\mathbb{E}[X_1] = \mu$ et $\text{Var}(X_1) = \sigma^2$. La variable aléatoire $Y_n = \sqrt{n}(\overline{X}_n - \mu)$ converge en loi vers une loi normale de moyenne 0 et de variance σ^2 .*

Supposons maintenant que l'objectif de notre étude soit de calculer la quantité $\mu_g = \int g(u) d\mathcal{P}$ où g est une fonction de u solution du système (C.1). Le principe de la méthode de Monte Carlo est le suivant :

- Il s'agit de simuler N réalisations de la variable aléatoire Ξ , paramétrée par ξ , notée $(\xi_n)_{n \in \{0, \dots, N\}}$ suivant la distribution $d\mathcal{P}$.
- D'après la loi forte des grandes nombres $\mu_g^N = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N g(u(x, t, \xi_n))$ est un estimateur convergeant de μ_g . En prenant $g(u) = u$ et $g(u) = (u - \mu_g)^2$ on obtient des estimateurs convergeant de la moyenne et la variance de u .
- D'après le théorème Central Limite, la vitesse de convergence de la méthode est en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}})$. Il permet également de donner un intervalle de confiance asymptotique pour l'estimation. Pour la moyenne par exemple, on a

$$|\mu_g - \mu_g^N| \leq a_{\alpha/2} \frac{\sigma_g^N}{\sqrt{N-1}}$$

où $\sigma_g^N = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (g(u(x, t, \xi_n)) - \mu_g^N)^2$, $a_{\alpha/2} = -G^{-1}(1 - \frac{\alpha}{2})$ avec $G(x) = \mathcal{P}(\Xi \leq x)$ la fonction de répartition de Ξ . Des intervalles de confiance similaires peuvent être obtenus pour la variance [Sap06].

La méthode de Monte Carlo, du fait de son utilisation non intrusive, présente l'avantage d'être transparente aux problèmes des non linéarités et à la présence de discontinuités de la solution (cf. chapitre 2). La vitesse de convergence est connue, en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}})$ quelque soit la régularité de la solution et la dimension stochastique. Il est possible de définir des intervalles de confiance est d'ainsi évaluer *a posteriori* la précision de l'estimation.

Le principal inconvénient de cette méthode est sa vitesse de convergence faible nécessitant un nombre de réalisation N très grand. Des modifications de la méthode existent pour améliorer cette vitesse. Ces méthodes seront différentes selon que l'on s'intéresse à une étude de second moment, une étude de probabilité d'échec ou une étude spectrale (voir [AH07, GS98, Sap06] par exemple). Nous pensons par exemple aux méthodes de Quasi-Monte-Carlo. Dans ce cas, les points ne sont plus choisis de manière aléatoire (s'intéresser aux séries à discrétance faible pour plus de détails). Ces méthodes présentent néanmoins le désavantage de ne plus posséder une vitesse de convergence indépendante de la dimension stochastique.

C.2 Méthode par perturbations

Les méthodes par perturbations sont basées sur le développement en série de Taylor des variables du système autour de la valeur moyenne des paramètres d'entrée :

$$u = u_0 + u_1\varepsilon + u_2\frac{\varepsilon^2}{2} + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \quad (\text{C.2})$$

où ε désigne une perturbation de la variable aléatoire d'entrée Ξ autour de sa moyenne μ ($\varepsilon = \Xi - \mu$). Considérons que ξ paramétrise Ξ et on a par conséquent

$$\begin{aligned} u_0(x, t) &= u(x, t, \mu), \\ u_1(x, t) &= \frac{\partial u}{\partial \xi}(x, t, \mu), \\ u_2(x, t) &= \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2}(x, t, \mu). \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Il s'agit d'injecter alors le développement précédent dans (C.1) et on identifie les coefficients de $1, \varepsilon, \frac{\varepsilon^2}{2}$ pour obtenir le nouveau système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u_0 + \partial_x f(u_0) &= 0, \\ \partial_t u_1 + \partial_x (\nabla_u f(u_0) u_1) &= 0, \\ \partial_t u_2 + \partial_x (\nabla_u f(u_0) u_2 + \nabla_{u,u}^2 f(u_0) u_1^2) &= 0, \end{cases} \quad \text{où } (u_0, u_1, u_2)^t \in \mathbb{R}^{3 \times n}. \quad (\text{C.4})$$

Une fois le système résolu (méthode intrusive), il est possible de déduire des u_0, u_1, u_2 une approximation des moyenne et variance de u . En effet, en prenant la moyenne du développement (C.2), on obtient l'estimation

$$\mathbb{E}[u] = u_0 + \mathbb{E}[\varepsilon]u_1 + \frac{1}{2}\mathbb{E}[\varepsilon^2]u_2, \quad (\text{C.5})$$

avec par définition $\mathbb{E}[\varepsilon] = \int_{\omega \in \Omega} (\Xi(\omega) - \mu) d\mathcal{P}(\omega) = 0$ et $\mathbb{E}[\varepsilon^2] = \int_{\omega \in \Omega} (\Xi(\omega) - \mu)^2 d\mathcal{P}(\omega) = \sigma^2$. D'où

$$\mathbb{E}[u] = u_0 + \frac{1}{2}\sigma^2 u_2. \quad (\text{C.6})$$

En effectuant les mêmes calculs sur $\mathbb{E}[(u - \mathbb{E}[u])^2]$, on obtient l'estimation de la variance

$$\text{Var}(u) = u_1 \sigma^2. \quad (\text{C.7})$$

La méthode de perturbations a l'avantage d'être peu coûteuse et de présenter un fort intérêt pour la modélisation (voir particulièrement [Jao01] qui s'intéresse aux perturbations tridimensionnelles d'un écoulement de base monodimensionnel grâce à ces méthodes). Elle est efficace surtout pour des études de second moment [Sud07, SK00, AH07].

Elle présente l'inconvénient d'être sensible à l'augmentation en dimension stochastique (augmentation conséquente du nombre n_b de coefficients de développement à calculer avec la dimension $n_b = 2d + 1$, même si cette dépendance n'est que linéaire). Son domaine de validité reste également limité aux systèmes linéaires. En effet, la jacobienne du flux de (C.4) est donnée par

$$J = \begin{pmatrix} \nabla_u f(u_0) & 0 & 0 \\ \nabla_{u,u}^2 f(u_0) u_1 & \nabla_u f(u_0) & 0 \\ \nabla_{u,u}^2 f(u_0) u_2 + \nabla_{u,u,u}^3 f(u_0) u_1^2 & 2u_1 \nabla_{u,u}^2 f(u_0) & \nabla_u f(u_0) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.8})$$

dont les valeurs propres sont celles de la jacobienne du flux $\nabla_u f(u)$ du système (C.1) mais dont la multiplicité est multipliée par 3. Le nouveau système est faiblement hyperbolique et ses solutions ne sont pas stables en temps long (instabilité à croissance linéaire).

Annexe D

Sélection du degré gPC par validation croisée leave one out

Objectifs : Nous présentons dans ce chapitre l'estimation de l'erreur L^2 , et d'autres quantités, par validation croisée [DKLM05] leave one out en dimension stochastique un. Nous étendons ensuite cela aux dimensions stochastiques supérieures en réalisant de la validation croisée par groupe. Nous l'appliquons à la sélection du degré de troncature d'une approximation gPC. •

Dans ce chapitre, nous abordons une thématique explorée de manière annexe durant la thèse. Il s'agit de la sélection par validation croisée, et plus précisément par leave one out, du degré de troncature polynômial gPC. Pour cela, nous présentons pour commencer comment modifier les poids d'intégration de la quadrature lorsqu'un point est enlevé.

Nous abordons en fin de chapitre des pistes afin de traiter le cas de la dimension stochastique supérieure à un.

D.1 Modification de la quadrature

Lors de la procédure de validation croisée, qui en l'occurrence correspond à une 1-validation croisée ou leave one out, nous retirons un point de quadrature pour déterminer une prédiction par chaos polynômial en ce point en utilisant le reste de quadrature. Il n'est en effet pas conseillé de calibrer un modèle sur une base et de le valider sur la même base, cf. [Sap06]. Le cas de l'interpolation polynôme met bien en évidence les défauts d'une telle pratique : l'erreur commise sur les points d'apprentissage est par définition nulle. Donc l'erreur estimée sur les points d'apprentissage est nulle ce qui n'est en général pas le cas. On comprend alors la nécessité de séparer les points d'apprentissage et les

points de validation, ce que réalise la validation croisée.

Il est nécessaire de modifier les poids de quadrature afin de conserver une bonne qualité d'intégration après qu'un point de la quadrature ait été retiré. Désormais et sans perte de généralité, le point retiré sera le dernier point x_{N_q} .

Pour cela, la quadrature initiale comprenant N_q points, nous requérons que la quadrature amputée d'un point intègre exactement tous les polynômes de degrés inférieurs ou égaux à $N_q - 2$. Soit un polynôme $Q \in \mathbb{R}_{N_q-2}[X]$. Ce polynôme, s'écrit dans la base de Lagrange au dessus de $\{x_1, \dots, x_{N_q-1}\}$

$$Q(x) = \sum_{k=1}^{N_q-1} Q(x_k) L_k(x), \quad (\text{D.1})$$

où

$$L_k(x) = \prod_{j=1, j \neq k}^{N_q-1} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}. \quad (\text{D.2})$$

L'intégration du polynôme Q vaut

$$\int_{\Omega} Q(x) d\mathbb{P}(x) = \sum_{k=1}^{N_q-1} Q(x_k) \int_{\Omega} L_k(x) d\mathbb{P}(x). \quad (\text{D.3})$$

Nous introduisons les poids $\{\alpha_1, \dots, \alpha_{N_q-1}\}$ de $\{x_1, \dots, x_{N_q-1}\}$ que nous cherchons à déterminer. La contrainte d'intégration exacte pour $Q \in \mathbb{R}_{N_q-2}[X]$ donne

$$\int_{\Omega} Q(x) d\mathbb{P}(x) = \sum_{k=1}^{N_q-1} \alpha_k Q(x_k). \quad (\text{D.4})$$

Les égalités (D.3) et (D.4) devant être vérifiées pour tout polynôme $Q \in \mathbb{R}_{N_q-2}[X]$, il en découle que pour $k \in \{1, \dots, N_q - 1\}$:

$$\alpha_k = \int_{\Omega} L_k(x) d\mathbb{P}(x). \quad (\text{D.5})$$

Or, la quadrature initiale nous permet de calculer exactement cette intégrale.

$$\int_{\Omega} L_k(x) d\mathbb{P}(x) = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i L_k(x_i) \quad (\text{D.6})$$

$$= \omega_k L_k(x_k) + \omega_{N_q} L_k(x_{N_q}) \text{ les autres } L_k(x_i) \text{ étant nuls} \quad (\text{D.7})$$

$$= \omega_k + \omega_{N_q} L_k(x_{N_q}) \quad (\text{D.8})$$

Finalement, pour $k \in \{1, \dots, N_q - 1\}$:

$$\alpha_k = \omega_k + \omega_{N_q} L_k(x_{N_q}). \quad (\text{D.9})$$

Nous disposons alors d'une quadrature tronquée $(x_1, \alpha_1), \dots, (x_{N_q-1}, \alpha_{N_q-1})$ capable d'intégrer exactement les polynômes de degrés inférieurs ou égaux à $N_q - 2$. Nous montrons sur la figure D.1 ce que donne la modification des points de la quadrature pour une quadrature initiale de Gauss-Legendre à 16 points.

Remarque : Nous avons vérifié numériquement que les quadratures mises à jour intègrent effectivement les polynômes de degrés inférieurs ou égaux à $N_q - 2$. •

Remarque : Les nouveaux poids α somment à un. En effet,

$$\sum_{k=1}^{N_q-1} \alpha_k = \sum_k^{N_q-1} w_k + w_{N_q} \sum_{k=1}^{N_q-1} L_k(x_{N_q}). \quad (\text{D.10})$$

Or le polynôme $1 - \sum_{k=1}^{N_q-1} L_k(x)$ est de degré $N_q - 2$ et présente $N_q - 1$ zéros $(x_1, x_2, \dots, x_{N_q-1})$. Il est donc toujours nul. Donc $\sum_{k=1}^{N_q-1} L_k(x_{N_q}) = 1$. Donc

$$\sum_{k=1}^{N_q-1} \alpha_k = \sum_{k=1}^{N_q-1} w_k + w_{N_q} = 1. \quad (\text{D.11})$$

•

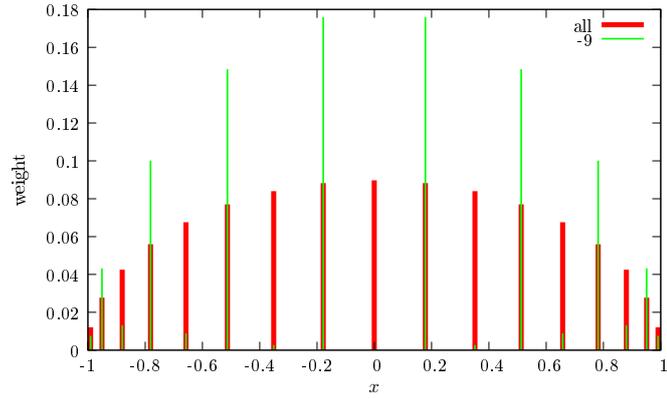
Nous remarquons que les poids modifiés peuvent être négatifs comme sur la figure D.1(b) ou bien plus petits que les poids originaux sur la figure D.1(a) (le septième proche de -0.4).

D.2 Validation croisée

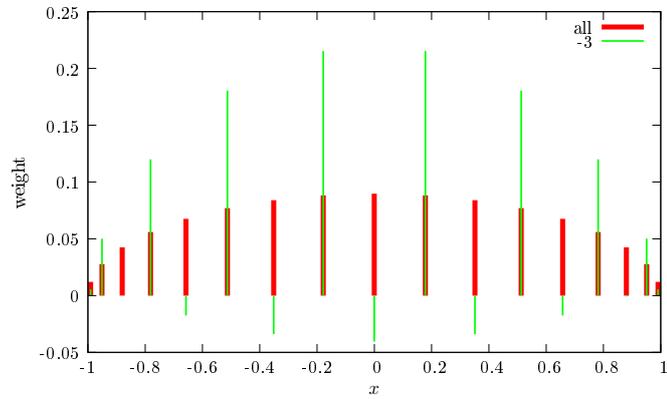
L'essence de la validation croisée est de dissocier la base de calibration (dans le contexte de l'intégration numérique il s'agit de la quadrature), et la base de validation afin principalement d'éviter le sur apprentissage.

Afin de sélectionner l'ordre de troncature P du modèle gPC, nous mettons en œuvre une 1-validation croisée.

Fixons, pour le moment, le degré de troncature P . Il s'agit de prédire le modèle u par chaos polynômial de degré P en chacun des points de la quadrature initiale en utilisant le reste des points de quadrature et les poids mis à jour (cf. ci-dessus section D.1). Cette prédiction sera notée $y_{-i}^P(x_i)$ pour mettre en évidence que la quadrature ne comprend pas le point x_i , que le polynôme est de degré P et que la prédiction a lieu au point x_i . En effectuant cela pour chaque point i de la base initiale, nous obtenons les prédictions $y_{-1}^P(x_1), y_{-2}^P(x_2), \dots, y_{-N_q}^P(x_{N_q})$. Nous les utilisons pour calculer un critère $C(P)$ quantifiant la qualité du polynôme du chaos tronqué à l'ordre P .



(a) Amputée de point du milieu



(b) Amputée du point 3

FIGURE D.1 – Mise à jour des poids de quadrature quand un point de quadrature est retiré. En rouge, nous présentons la quadrature pleine et en vert les poids de la quadrature amputée d'un point.

D.3 Critères de sélection

Nous donnons quelques exemples de critères éventuels. Le premier correspond à l'erreur L_2 au carré.

$$C(P) = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i [y_{-i}^P(x_i) - u(x_i)]^2 \quad (D.12)$$

Le deuxième correspond à l'erreur L_1 .

$$C(P) = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i |y_{-i}^P(x_i) - u(x_i)| \quad (D.13)$$

Les suivants portent sur les moments statistiques et viennent de l'importance de calculer les $2P + 1$ premiers moments statistiques :

$$C(P) = \max_{0 \leq s \leq 2P+1} \left| \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i [y_{-i}^P(x_i)]^s - m_s \right|, \quad (D.14)$$

où $m_s = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i u(x_i)^s$.

$$C(P) = \frac{1}{2P+1} \sum_{s=0}^{2P} \left| \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i [y_{-i}^P(x_i)]^s - m_s \right| \quad (D.15)$$

$$C(P) = \sqrt{\frac{1}{2P+1} \sum_{s=0}^{2P} \left(\sum_{i=1}^{N_q} \omega_i [y_{-i}^P(x_i)]^s - m_s \right)^2} \quad (D.16)$$

Nous utiliserons le critère en norme quadratique car le polynôme du chaos converge dans cette norme.

D.4 Exemples numériques

Dans cette section, nous présentons quelques résultats numériques sur des cas test continus et discontinus.

D.4.1 Cas Legendre

Ce cas permet de valider la sélection du degré sur un cas test polynômial. Le modèle est $u(x) = \phi_0(x) + \phi_3(x) + \phi_{10}(x)$. Où les ϕ_k désignent les polynômes de Legendre.

On s'attend à ce que pour un nombre suffisant de calculs, ce soit le degré 10 qui soit sélectionné. Effectivement, on retrouve ce résultat sur la figure D.3. Cette figure montre le degré sélectionné par la validation leave one out en fonction du nombre de points de quadrature de Gauss-Legendre, le degré théorique pour la quadrature de Gauss-Legendre $P = N_q - 1$, le degré qui aurait été sélectionné si on avait accès à l'erreur L^2 . On remarque qu'il faut 10 points de quadrature pour que le P exact sélectionné soit 10 ce qui correspond au pouvoir intégrateur théorique de Gauss-Legendre. Il faut 22 points pour que le P leave one out sélectionné soit 10. On perd ici le facteur 2 de l'intégration de Gauss-Legendre.

La figure D.4 confirme que disposant de suffisamment de points de quadrature, on estime correctement l'erreur L^2 pour un modèle gPC de degré 10. Par contre, au delà du degré

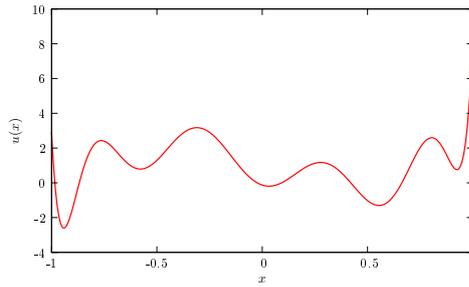


FIGURE D.2 – Modèle Legendre

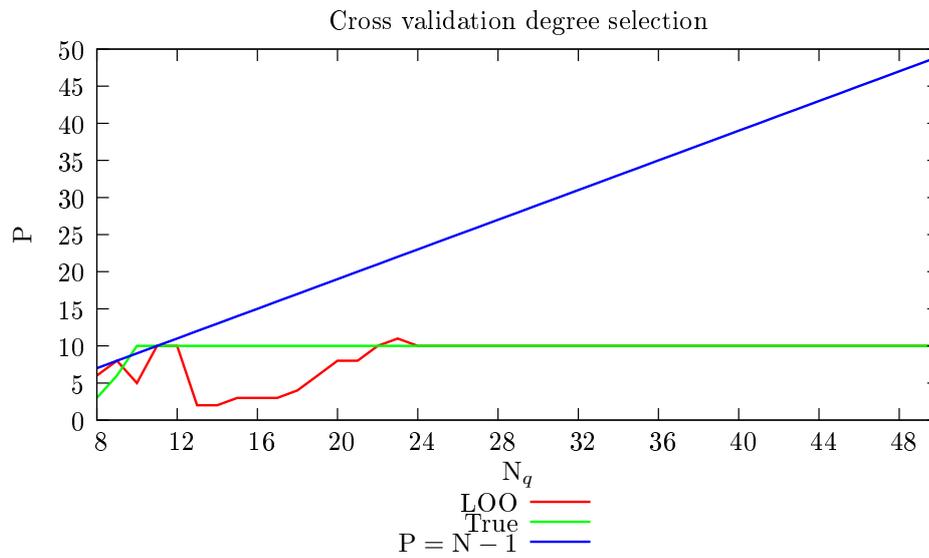


FIGURE D.3 – Degré polynômial sélectionné en fonction du nombre de points de quadrature sur la cas Legendre

12, la quadrature ne comprend pas assez de points pour évaluer correctement par leave one out l'erreur L^2 .

En conclusion, si le modèle est vraiment polynômial, la validation croisé leave one out permet de trouver son degré lorsque le nombre de points de quadrature est suffisant.

D.4.2 Cas sinus

Le cas sinus est là pour visualiser ce qui se passe pour un modèle continu non polynômial, donc contenant une infinité de modes dans la projection gPC.

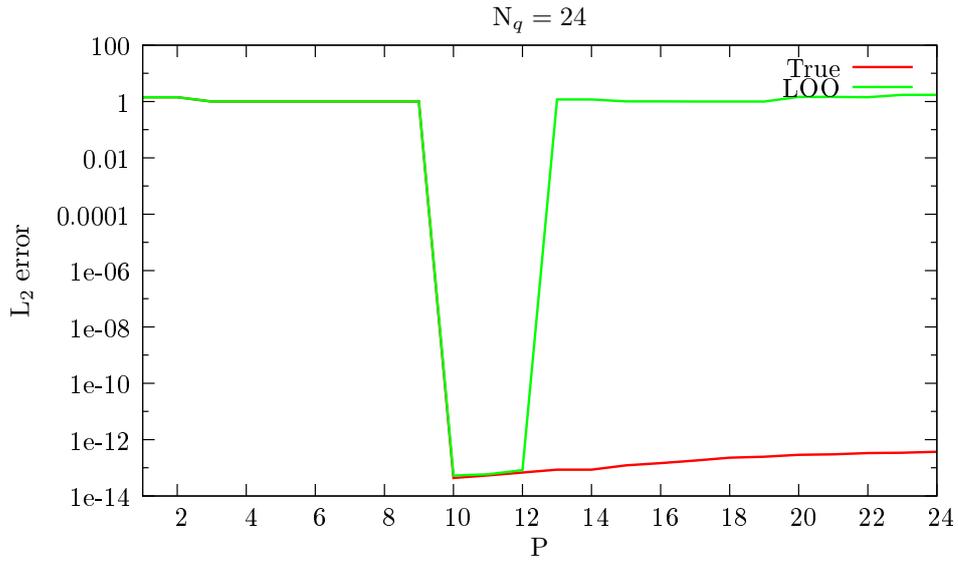
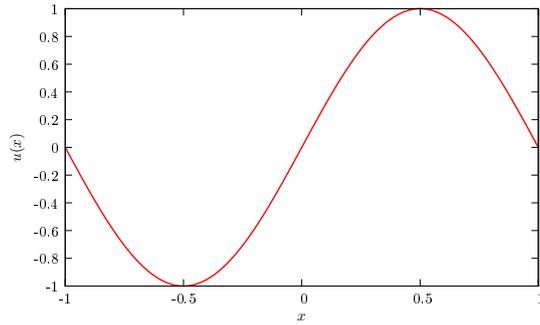


FIGURE D.4 – Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas Legendre

Pour ce cas,

$$u(x) = \sin(2\pi x). \quad (\text{D.17})$$



D.4.3 Cas choc

Nous passons maintenant à l'étude de cas discontinu en commençant par le plus simple qui soit : deux paliers constant séparés par une discontinuité.

Pour ce cas,

$$u(x) = \mathbb{I}_{[-1; -0.5]}(x). \quad (\text{D.18})$$

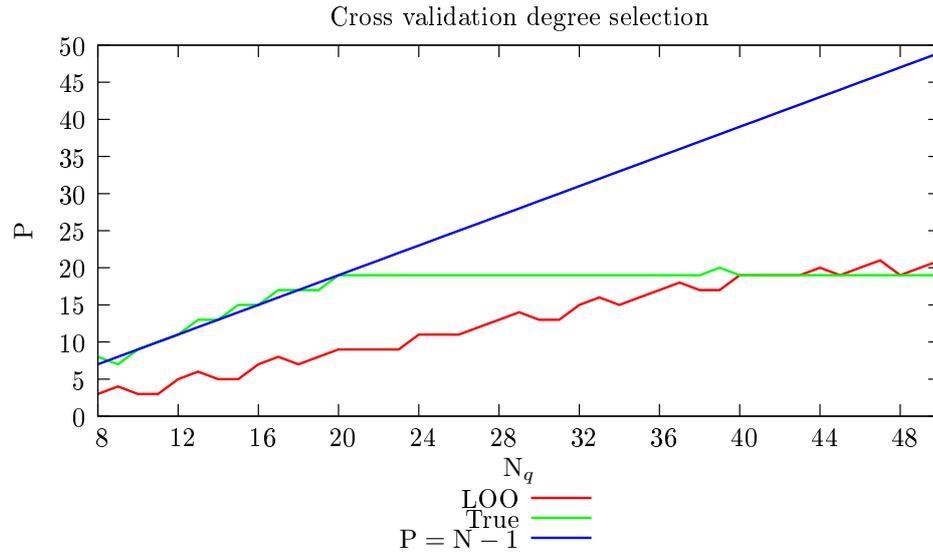


FIGURE D.5 – Degré polynôme sélectionné en fonction du nombre de points de quadrature sur la cas sinus

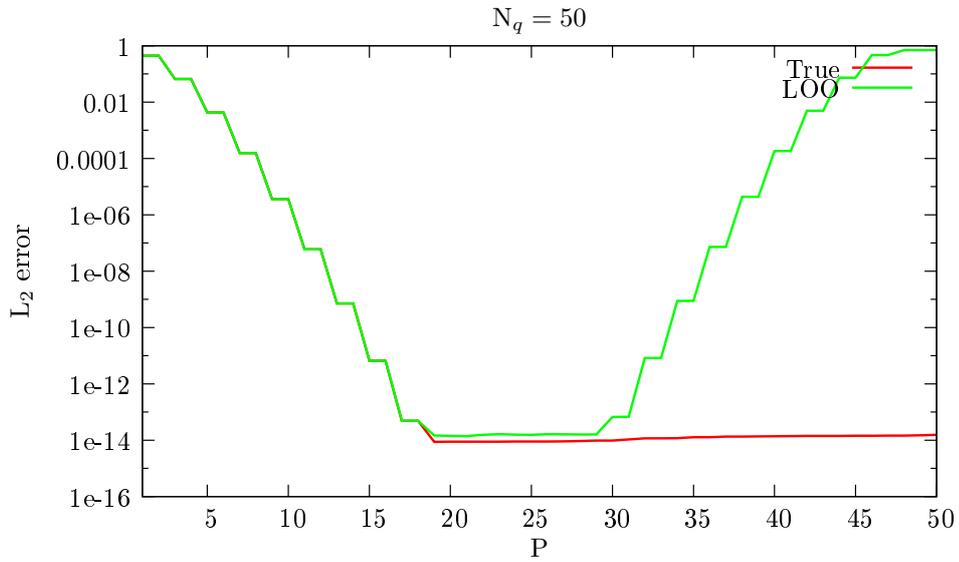


FIGURE D.6 – Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas sinus

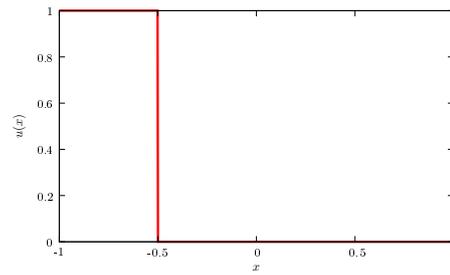


FIGURE D.7 – Modèle choc

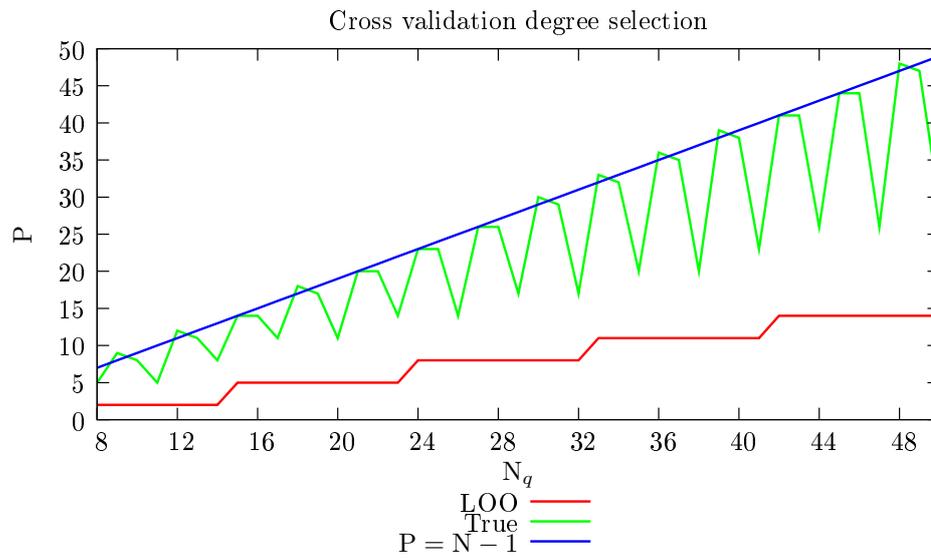


FIGURE D.8 – Degré polynômial sélectionné en fonction du nombre de points de quadrature sur la cas choc

D.4.4 Cas bichoc

Pour ce cas,

$$u(x) = 2\mathbb{I}_{[-1; -\frac{1}{3}]}(x) + \mathbb{I}_{[-\frac{1}{3}; \frac{1}{3}]}(x). \quad (\text{D.19})$$

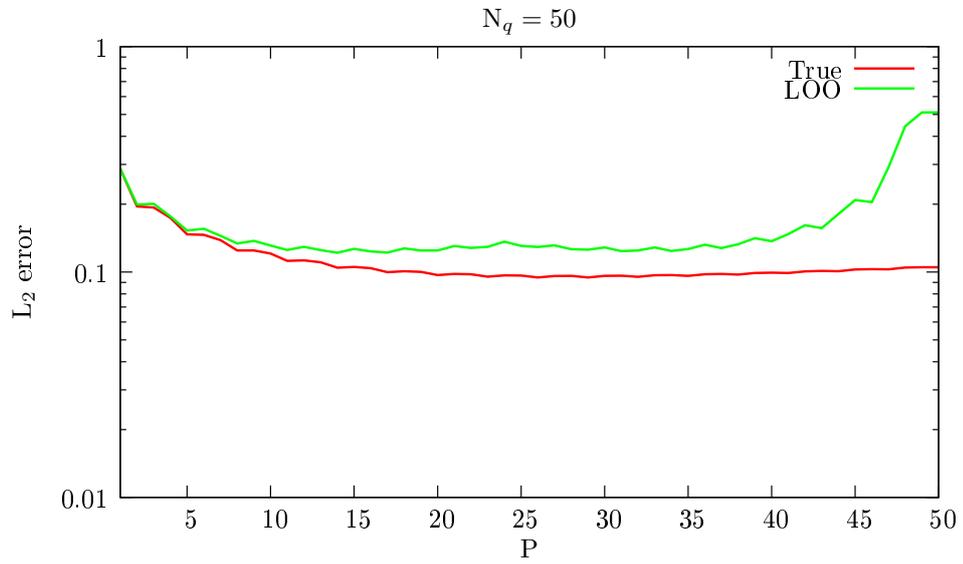


FIGURE D.9 – Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas choc

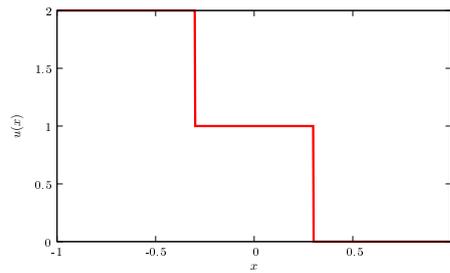


FIGURE D.10 – Modèle bichoc

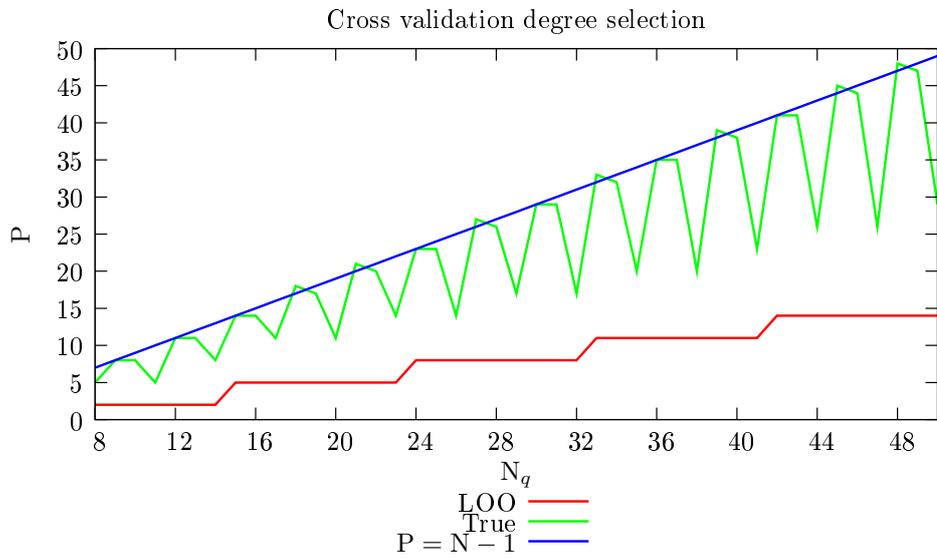


FIGURE D.11 – Degré polynômial sélectionné en fonction du nombre de points de quadrature sur la cas bichoc

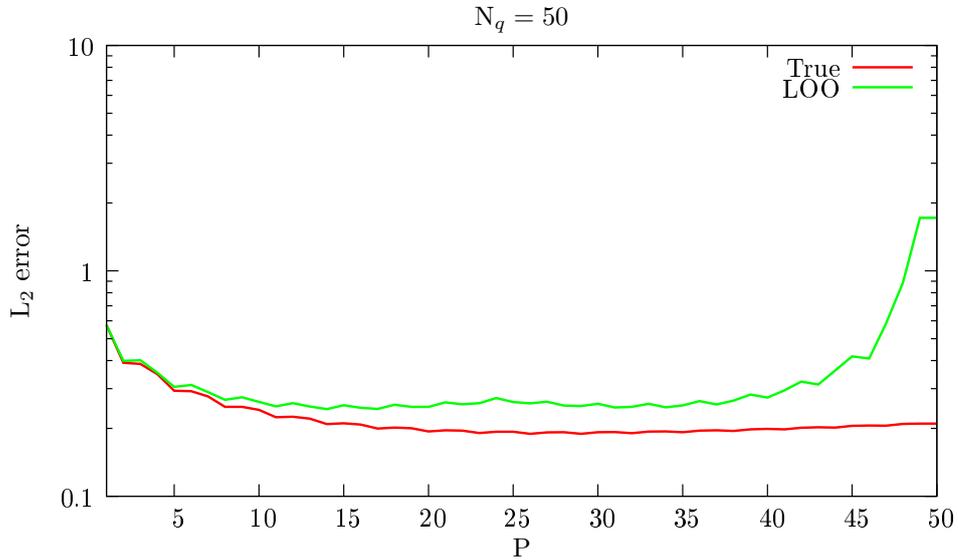


FIGURE D.12 – Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas bichoc

D.5 Dimension stochastique supérieure

Nous avons considéré ici le cas de la dimension stochastique un. Il est possible d'étendre cette approche à la dimension stochastique supérieure à un. En particulier, concernant les cubatures tensorisées pleines, ce que nous abordons. Il s'agit alors d'une tensorisation de quadratures de dimension un. Notons ici d la dimension stochastique, $d > 1$. Nous devons répondre à la question suivante : comment mettre à jour les poids de cubature si on retire le point $(x_{i,1}, \dots, x_{i,d})$?

Afin d'estimer l'erreur L^2 à P fixé, il est possible de procéder par leave one out comme dans le cas de la dimension un ci-dessus. En dimension supérieure, cela est plus compliqué. Il est alors possible de procéder par leave k out en retirant de la cubature un groupe de points et en calibrant gPC avec le reste de la cubature. Par exemple en dimension deux, on peut retirer une ligne ou une colonne de la cubature. En dimension d , on peut retirer ce qui correspond à une ligne, c'est-à-dire l'ensemble des points ayant la même composante dans une certaine direction (voir la figure D.13 en dimension deux). Dans cette direction, on obtient une quadrature 1D amputée d'un points. On applique alors la méthode de la section D.1 afin de la mettre à jour. Puis on tensorise cette nouvelle quadrature 1D avec les $d - 1$ autres quadratures 1D dans les autres directions afin d'obtenir la cubature de dimension d à la quelle on a retiré un ligne au sens de la dimension d .

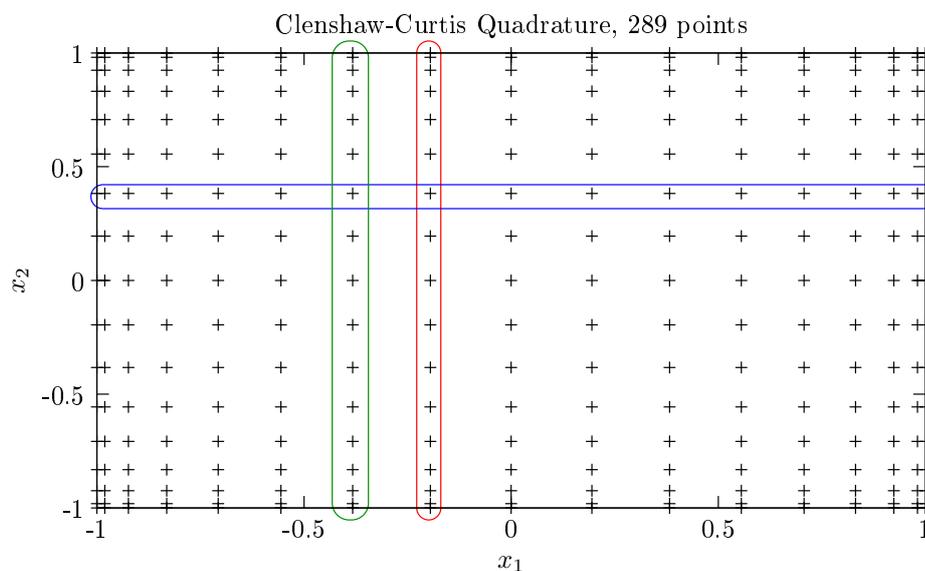


FIGURE D.13 – Quadrature numérique tensorisée pleine de Clenshaw-Curtis, 289 points (17^2), 17 points par dimension. On peut retirer une colonne (vert ou rouge) ou une ligne (bleu) afin de calibrer gPC avec la quadrature privée pour calculer l'erreur sur les points retirés.

Conclusion

Nous avons montré théoriquement et numériquement comment, par validation croisée leave one out, sélectionner le degré de troncature gPC et estimer l'erreur L^2 de l'approximation gPC. Nous avons étendu cela au cas de la dimension stochastique supérieure à un en procédant par leave k out.

Cette approche leave one out peut être utilisée afin de comprendre comment se comporte gPC sur le modèle à approcher. Il s'agit d'un outil pour l'utilisateur. Elle ne doit pas être introduite en boîte noire dans gPC afin d'éviter à l'utilisateur d'avoir à choisir un degré de troncature polynômial P . Il serait utile d'appliquer cette méthode afin de tracer pour chaque un nombre de quadrature donnée, l'erreur L^2 en fonction du degré P estimée par validation croisée. Faire cela pour différents niveaux de quadratures emboîtées pour obtenir plusieurs courbe de convergence en fonction de P serait encore davantage instructif.

Annexe E

Calcul des racines positives de $c - x \tan(ax) = 0$ et $x + c \tan(ax) = 0$

Objectifs : Dans ce chapitre, nous expliquons comment nous trouvons les racines des équations $c - x \tan(ax) = 0$ et $x + c \tan(ax) = 0$ intervenant dans le calcul des valeurs propres du développement de Karhunen-Loève. •

a est un réel strictement positif. Nous notons :

$$h_1(x) = c - x \tan(ax) \tag{E.1}$$

$$h_2(x) = x + c \tan(ax). \tag{E.2}$$

Ces fonctions sont définies et dérivables sur $[0; +\infty[$ privé de $\{\frac{\pi}{2a} + \frac{k\pi}{a}, k \in \mathbb{N}\}$. Notons I cet intervalle. On cherche les racines de h_1 et h_2 . Pour cela, on utilisera l'algorithme de Newton. Il faudra alors bien choisir l'initialisation de l'algorithme. Nous expliquons ici comment nous procédons.

E.1 Équation $c - x \tan(ax) = 0$

Proposition 3 *La fonction h_1 est décroissante sur I .*

Preuve. En effet, la dérivée de h_1 vaut pour tout x dans I

$$h_1'(x) = -\tan(ax)(1 + ax) - ax. \tag{E.3}$$

Sachant que pour tout x dans I on a $\tan(ax) \geq ax$, alors :

$$\begin{aligned} \tan(ax) &\geq ax \\ -\tan(ax) &\leq -ax \\ -\tan(ax)(1+ax) &\leq -ax(1+ax) \\ -\tan(ax)(1+ax) - ax &\leq -ax(1+ax) - ax \\ h_1'(x) &\leq -ax(1+ax) - ax \\ h_1'(x) &\leq 0 \end{aligned}$$



$k \in \mathbb{N}$. Sur l'intervalle $]\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}; \frac{k\pi}{a} + \frac{\pi}{2a}[$, h_1 est continue et tend vers plus infini en $\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}$ et vers moins l'infini en $\frac{k\pi}{a} + \frac{\pi}{2a}$. Or elle est croissante. D'après le théorème des valeurs intermédiaires, elle s'annule une unique fois sur cet intervalle. On note x_k cette racine. Elle vérifie donc

$$c \tan(ax_k) = \frac{1}{x_k}. \quad (\text{E.4})$$

Proposition 4 *La quantité $x_k - \frac{k\pi}{a}$ tend vers 0 lorsque k tend vers l'infini.*

Preuve. Lorsque k tend vers l'infini, x_k tend vers l'infini, et donc $\tan(ax_k)$ vers 0 par valeurs positives. Donc, par définition, pour tout ε strictement positif, il existe un rang k_0 à partir duquel on a :

$$0 \leq \tan(ax_k) \leq \tan a\varepsilon. \quad (\text{E.5})$$

Par π périodicité on a :

$$\tan(a(\frac{k\pi}{a})) \leq \tan(ax_k) \leq \tan(a(\varepsilon + \frac{k\pi}{a})). \quad (\text{E.6})$$

Par croissance de tangente :

$$\frac{k\pi}{a} \leq x_k \leq \varepsilon + \frac{k\pi}{a}. \quad (\text{E.7})$$

Par conséquent, $x_k - \frac{k\pi}{a}$ tend vers 0 lorsque k tend vers l'infini.

On change alors de variable pour se placer autour de $\frac{k\pi}{a}$: $y_k = x_k - \frac{k\pi}{a}$. En revenant à l'équation E.4, il vient :

$$c \tan(ay_k) = \frac{1}{y_k + \frac{k\pi}{a}}. \quad (\text{E.8})$$

On réalise un développement limité en y_k autour de 0 à l'ordre un. Il vient :

$$cay_k = \frac{1}{y_k + \frac{k\pi}{a}}. \quad (\text{E.9})$$

On obtient une équation polynômiale de degré 2. En la résolvant, on obtient une approximation de y_k puis de x_k :

$$x_k \simeq \frac{k\pi}{2a} + \sqrt{\left(\frac{k\pi}{2a}\right)^2 + \frac{c}{a}}. \quad (\text{E.10})$$

On utilise cette estimation comme initialisation de l'algorithme de Newton pour déterminer une bonne estimation de x_k .

E.2 Équation $x + c \tan(ax) = 0$

Proposition 5 *La fonction h_2 est décroissante sur l'intervalle I .*

Preuve. En effet, la dérivée de h_2 est pour tout x dans I :

$$h_2'(x) = -\tan(x) - ax(1 + \tan^2(x)). \quad (\text{E.11})$$

Sachant que ax est positif, on a :

$$\tan(ax) \geq ax \quad (\text{E.12})$$

$$-\tan(ax) \leq -ax \quad (\text{E.13})$$

$$-\tan(ax) - ax \leq -2ax \quad (\text{E.14})$$

$$-\tan(ax) - ax - ax(1 + \tan^2(ax)) \leq -2ax - ax(1 + \tan^2(ax)) \quad (\text{E.15})$$

$$h_2'(x) \leq -2ax - ax(1 + \tan^2(ax)) \quad (\text{E.16})$$

$$h_2'(x) \leq 0. \quad (\text{E.17})$$



$k \in \mathbb{N}$. Sur l'intervalle $]\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}; \frac{k\pi}{a} + \frac{\pi}{2a}[$, h_1 est continue et tend vers plus infini en $\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}$ et vers moins l'infini en $\frac{k\pi}{a} + \frac{\pi}{2a}$. Or elle est croissante. D'après le théorème des valeurs intermédiaires, elle s'annule une unique fois sur cet intervalle. On note x_k cette racine. Elle vérifie donc

$$c \tan(ax_k) = -x_k \quad (\text{E.18})$$

qui s'écrit aussi

$$\frac{1}{c \tan(ax_k)} = -\frac{1}{x_k}. \quad (\text{E.19})$$

Proposition 6 *La quantité $y_k = x_k - \left(\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}\right)$ tend vers 0 lorsque k tend vers l'infini.*

Preuve. D'après l'équation E.18, $\tan(ax_k)$ tend vers moins l'infini lorsque k tend vers plus l'infini. Or x_k appartient à l'intervalle $]\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}; \frac{k\pi}{a} + \frac{\pi}{2a}[$ dans lequel la fonction tangente est croissante. Par définition de la limite, pour tout ε strictement positif, il existe un rang k_0 à partir duquel on a :

$$\tan(ax_k) \leq \tan\left(a\left(-\frac{\pi}{2a} + \varepsilon\right)\right). \quad (\text{E.20})$$

Par π périodicité on a aussi :

$$\tan(ax_k) \leq \tan\left(a\left(\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a} + \varepsilon\right)\right). \quad (\text{E.21})$$

Par croissance de tangente sur l'intervalle :

$$\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a} \leq x_k \leq \frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a} + \varepsilon. \quad (\text{E.22})$$



On reprend l'inégalité E.19 en y_k :

$$\frac{1}{c \tan(ay_k - \frac{\pi}{2})} = -\frac{1}{y_k + \left(\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}\right)} \quad (\text{E.23})$$

$$\frac{1}{c} \tan(ay_k) = \frac{1}{y_k + \left(\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a}\right)}. \quad (\text{E.24})$$

On réalise un développement limité en y_k autour de 0 :

$$ay_k \left(y_k + \left(\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a} \right) \right) - c = 0. \quad (\text{E.25})$$

Il s'agit d'une équation polynômial de degré deux. En la résolvant, on obtient la solution en y_k puis en x_k :

$$x_k \simeq \frac{1}{2} \left(\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a} \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{k\pi}{a} - \frac{\pi}{2a} \right)^2 + \frac{c}{a}}. \quad (\text{E.26})$$

On utilise cette approximation comme initialisation de l'algorithme de Newton pour calculer numériquement la racine k de l'équation $h_2(x) = 0$.

E.3 Algorithme de Newton

L'algorithme de Newton permet de calculer numériquement une solution de l'équation $f(x) = 0$ en partant d'une initialisation x_0 suffisamment proche de la solution afin que

la procédure itérative converge. Les approximations successives sont notées x_n . À chaque itération, on approche f par sa tangente au points x_n d'équation :

$$y = f'(x_n)(x - x_n) + f(x_n). \quad (\text{E.27})$$

L'approximation $n + 1$ sera l'intersection de la tangente avec l'axe des abscisses :

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (\text{E.28})$$

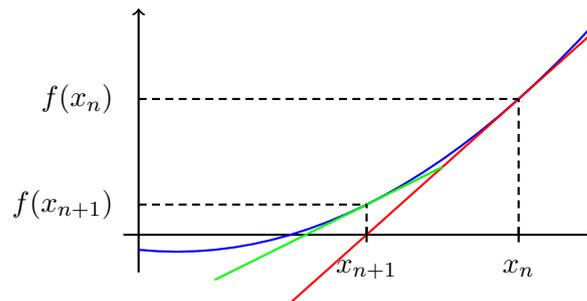


FIGURE E.1 – Principe de l'algorithme de Newton

Annexe F

Analyse de sensibilité de Sobol

Objectifs : Dans cette section, nous introduisons l'analyse de sensibilité de Sobol et son estimation par polynôme du chaos. •

Soit u un modèle et X la variable incertaine en entrée de dimension d .

F.1 Définitions des indices de Sobol

Il s'agit de quantifier la contribution de chacune des variables à la variance totale. Il est aussi possible de quantifier les contributions des interactions entre différentes variables d'entrée.

Définition 25 (Indice de Sobol d'ordre 1) *L'indice de Sobol S_i (d'ordre 1) mesure la contribution de l'entrée X_i à la variance totale. Il est défini de la façon suivante :*

$$S_i = \frac{\text{Var} [\mathbb{E} [u(X)|X_i]]}{\text{Var} [u(X)]}. \quad (\text{F.1})$$

Définition 26 (Indice de Sobol d'ordre 2) *L'indice de Sobol $S_{i,j}$ mesure la contribution de l'interaction des entrées X_i et X_j à la variance totale. Il est défini de la façon suivante :*

$$S_i = \frac{\text{Var} [\mathbb{E} [u(X)|X_i, X_j]]}{\text{Var} [u(X)]}. \quad (\text{F.2})$$

De la même manière, on peut définir un indice de Sobol de l'interaction X_{i_1}, \dots, X_{i_n} .

Définition 27 (Indice de Sobol d'ordre n) *L'indice de Sobol d'ordre n entre $X_{i_1}, \dots,$*

X_{i_n} est défini de la façon suivante :

$$S_i = \frac{\text{Var} [\mathbb{E} [u(\mathbf{X}) | X_{i_1}, \dots, X_{i_n}]]}{\text{Var} [u(\mathbf{X})]}. \quad (\text{F.3})$$

Remarque : Un indice de Sobol est compris entre 0 et 1. Plus il est proche de 1 et plus les variables considérées par l'indice ont de l'importance. •

Remarque : Les indices de Sobol sont liés à la décomposition ANOVA de u . Celle-ci correspond à l'écriture de u sous la forme

$$u(\mathbf{X}) = u_0 + \sum_{i=1}^d u_i(X_i) + \sum_{i<j}^d u_{i,j}(X_i, X_j) + \sum_{i<j<k}^d u_{i,j,k}(X_i, X_j, X_k) + \dots \quad (\text{F.4})$$

Les indices de Sobol correspondent aux variances des termes de cette décomposition divisées par la variance totale. Par exemple S_i est la variance u_i sur la variance totale et $S_{i,j}$ est la variance de $u_{i,j}$ sur la variance totale. •

F.2 Calcul des indices de Sobol par polynômes du chaos

Lorsque u est un modèle coûteux numériquement, on peut utiliser le chaos polynômial afin d'approcher les valeurs des indices de Sobol.

Le développement gPC de u s'écrit sous la forme est :

$$u(\mathbf{X}) = u_0 + \sum_{i_1, \dots, i_d} u_{i_1, \dots, i_d} \phi_{i_1, \dots, i_d}(\mathbf{X}) \quad (\text{F.5})$$

avec différentes possibilités pour tronquer le développement. Les indices i_k désignent les degrés polynômiaux partiels par rapport à la variable X_k .

À partir de ce développement, on peut calculer la variance totale :

$$V = \sum_{i_1, \dots, i_d} (u_{i_1, \dots, i_d})^2. \quad (\text{F.6})$$

Afin de calculer l'indice de Sobol d'ordre 1 S_k , il faut calculer la variance des termes ayant uniquement X_k comme contribution, c'est-à-dire ayant tous les degrés partiels nuls sauf celui de X_k qui est strictement positif. L'indice de Sobol S_k s'écrit formellement,

$$S_k = \frac{1}{V} \sum_{\substack{i_j=0, j \in \{1, \dots, d\} \setminus \{k\} \\ i_k > 0}} (u_{i_1, \dots, i_d})^2. \quad (\text{F.7})$$

De même, l'indice de Sobol $S_{k,l}$ s'écrit :

$$S_{k,l} = \frac{1}{\bar{V}} \sum_{\substack{i_j=0, j \in \{1, \dots, d\} \setminus \{k,l\} \\ i_k > 0, i_l > 0}} (u_{i_1, \dots, i_d})^2. \quad (\text{F.8})$$

F.3 Validation sur une fonction test

Afin de valider la procédure de calcul numérique des indices de Sobol, nous utilisons la fonction de Ishigami de trois variables définie de la façon suivante :

$$Y = g(X_1, X_2, X_3) = \sin(X_1) + a \sin^2(X_2) + bX_3^4 \sin(X_1) \quad (\text{F.9})$$

où les variables aléatoires X_1 , X_2 et X_3 sont indépendantes et uniformes sur $[-\pi; \pi]$.

La variance ainsi que les indices de Sobol sont connus de manière analytique :

$$V(Y) = \frac{1}{2} + \frac{3a^2}{8} + \frac{b^2\pi^8}{18} + \frac{b\pi^4}{5} - \frac{a^2}{4} \quad (\text{F.10})$$

$$S_1 = \frac{1}{V(Y)} \frac{1}{2} \left(1 + b\frac{\pi^4}{5}\right)^2 \quad (\text{F.11})$$

$$S_2 = \frac{1}{V(Y)} \frac{a^2}{8} \quad (\text{F.12})$$

$$S_3 = 0 \quad (\text{F.13})$$

$$S_{1,2} = 0 \quad (\text{F.14})$$

$$S_{1,3} = \frac{1}{V(Y)} b^2 \pi^8 \frac{8}{225} \quad (\text{F.15})$$

$$S_{2,3} = 0 \quad (\text{F.16})$$

$$S_{1,2,3} = 0. \quad (\text{F.17})$$

Nous avons choisi les paramètres suivants pour effectuer la validation :

- quadrature de Gauss-Legendre ;
- 12 points de quadrature par dimension (3 ici) ;
- degré gPC de 10 ;
- $a = 7$;
- $b = 0.05$.

Le tableau F.3 suivant compare les valeurs numériques théoriques et les valeurs numériques approchées par gPC. On obtient une précision à 10^{-5} .

Indice	Analytique	Estimation	Différence
S_1	0.2185185644270133	0.2185196840920164	1.119665003102011e-06
S_2	0.686894643648693	0.6868930393314093	1.604317283687706e-06
S_3	0	2.8486349185377e-28	2.8486349185377e-28
$S_{1,2}$	0	1.916875412079086e-28	1.916875412079086e-28
$S_{1,3}$	0.09458679192429377	0.09458727657657424	4.846522804746733e-07
$S_{2,3}$	0	1.427911903094086e-28	1.427911903094086e-28
$S_{1,2,3}$	0	1.9625181991727e-29	1.9625181991727e-29
$V(Y)$	8.916942440349825	8.916896750921662	4.568942816263188e-05

TABLE F.1 – Comparatif entre les indices de Sobol analytiques de la fonction d’Ishigami et l’estimation gPC

Bibliographie

- [AG02] G.A. Athanassoulis and P.N. Gavriliadis. The truncated Hausdorff moment problem solved by using kernel density functions. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 17/3 :273–291, 2002.
- [AGSX09] R. Archibald, A. Gelb, R. Saxena, and D. Xiu. Discontinuity Detection in Multivariate Space for Stochastic Simulations. *J. Comp. Phys.*, 228(7) :2676–2689, 2009.
- [AH07] L. M. Arriola and J. M. Hyman. Being Sensitive to Uncertainties. *Comp. Sci. and Engrg.*, 2007.
- [Akh65] N.I. Akhiezer. *The Classical Moment Problem*. Oliver & Boyd, 1965.
- [A.N00] Shiryaev A.N. *Probability*. Springer, 2000.
- [Bay64] T. Bayes. Essay towards solving a problem in the doctrine of chances. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 1764.
- [BBS09] J.O. Berger, J.M. Bernardo, and D. Sun. The formal definition of reference priors. *The Annals of Statistics*, 37(2) :905–938, 2009.
- [Bha11] A. Bhagatwala. *SHOCK-TURBULENCE INTERACTION AND RICHTMYER-MESHKOV INSTABILITY IN SPHERICAL GEOMETRY*. PhD thesis, Stanford University, DEPARTMENT OF AERONAUTICS AND ASTRONAUTICS, 2011.
- [Bla09] G. Blatman. *Adaptive sparse polynomial chaos expansions for uncertainty propagation and sensitivity analysis*. PhD thesis, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, 2009.
- [BOPB12] S. Balasubramanian, G. C. Orlicz, K. P. Prestridge, and B. J. Balakumar. Experimental study of initial condition dependence on Richtmyer-Meshkov instability in the presence of reshock. *Physics of Fluids*, 24(3) :034103, 2012.
- [Bro02] M. Brouillette. The richtmyer-meshkov instability. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 34(1) :445–468, 2002.
- [CC70] S.C. Crow and G.H. Canavan. Relationship between a wiener-hermite expansion and an energy cascade. *J. Fluid Mech.*, 41 :387–403, 1970.

- [CEA09] CEA. Chocs : Mélange turbulents compressibles. Technical report, CEA DAM, 2009.
- [Cho74] A.J. Chorin. Gaussian fields and random flow. *J. Fluid Mech.*, 85 :325–347, 1974.
- [CM47a] R.H. Cameron and W.T. Martin. The orthogonal development of non-linear functionals in series of fourier-hermite functionals. *The Annals of Mathematics*, 48(2) :385–392, 1947.
- [CM47b] R.H. Cameron and W.T. Martin. The Orthogonal Development of Non-Linear Functionals in Series of Fourier-Hermite Functionals. *Annals of Math.*, 48 :385–392, 1947.
- [D⁺10] B. Després et al. *Lois de Conservations Eulériennes, Lagrangiennes et Méthodes Numériques*, volume 68. Springer Verlag, 2010.
- [DKLM05] F.M. Dekking, C. Kraaikamp, H.P. Lopuhaa, and L.E. Meester. *A Modern Introduction To Probability and Statistics*. Springer, 2005.
- [DPL13] B. Després, G. Poëtte, and D. Lucor. Review of robust uncertainty propagation in systems of conservation laws with the entropy closure method. In H. Bijl, D. Lucor, S. Mishra, and C. Schwab, editors, *Uncertainty Quantification in Computational Fluid Dynamics*, volume 92 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 105–149. Springer-Verlag, 2013.
- [dR06a] É. de Rocquigny. La maîtrise des incertitudes dans un contexte industrielle partie : une approche méthodologique globale basée sur des exemples. *Journal de la Société française de statistique*, 147(3) :33–71, 2006.
- [DR06b] É. De Rocquigny. La maîtrise des incertitudes dans un contexte industriel. 2nde partie : revue des méthodes de modélisation statistique physique et numérique. *Journal de la Société française de statistique*, 147(3) :73–106, 2006.
- [DRDT08] É. De Rocquigny, N. Devictor, and S. Tarantola. *Uncertainty in industrial practice*. Wiley Online Library, 2008.
- [E.08] Herbin E. *Probabilités*. Centrale Paris, 2008.
- [EC07] Eaux Cédric. *Analyse mathématique et numérique d’un modèle multiphysique multivitesse pour l’interpénétration de fluides miscibles*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2007.
- [Gau82] W. Gautschi. On generating orthogonal polynomials. *SIAM*, 1982.
- [Gau96] Walter Gautschi. *Orthogonal polynomials : applications and computation*, volume 5. Oxford University Press, 1996.
- [Gau04] Walter Gautschi. *Orthogonal Polynomials : Computation and Approximation*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, 2004.

- [GDH11] Poëtte G., Lucor D., and Jourden H. A stochastic surrogate model approach applied to calibration of unstable fluid flow experiments. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences*, 2011.
- [GFWG10] D. Galbally, K. Fidkowski, K. Willcox, and O. Ghattas. Non-linear model reduction for uncertainty quantification in large-scale inverse problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 81(12) :1581–1608, 2010.
- [GG84] Stuart Geman and Donald Geman. Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images. *PAMI*, 6 :721–741, 1984.
- [GRS95] W.R. Gilks, S. Richardson, and D.J. Spiegelhalter. *Markov Chain Monte Carlo in practice*. Chapman & Hall, 1995.
- [GS90] Alan E. Gelfand and Adrian F. M. Smith. Sampling-based approaches to calculating marginal densities. *Journal of the American Statistical Association*, 85(410) :398–409, 1990.
- [GS98] J. Glimm and D.H. Sharp. Prediction and the Quantification of Uncertainty. Technical report, Department of Applied Mathematics and Statistics, University at Stony Brook and Theoretical division, Los Alamos National Laboratory, 1998.
- [GS03] R.G. Ghanem and P.D. Spanos. *Stochastic finite elements : a spectral approach*. Dover Pubns, 2003.
- [GvdSVK10a] M. I. Gerritsma, J.-B. van der Steen, P. Vos, and G. E. Karniadakis. Time-dependent generalized polynomial chaos. *J. Comput. Physics*, pages 8333–8363, 2010.
- [GvdSVK10b] Marc Gerritsma, Jan-Bart van der Steen, Peter Vos, and George Karniadakis. Time-dependent generalized polynomial chaos. *Journal of Computational Physics*, 229(22) :8333 – 8363, 2010.
- [HDYW11] M. Hahn, D. Drikakis, D. L. Youngs, and R. J. R. Williams. Richtmyer-Meshkov turbulent mixing arising from an inclined material interface with realistic surface perturbations and reshocked flow. *Phys. of Fluids*, 23 :046101, 2011.
- [HKC⁺04] D. Higdon, M. Kennedy, J.C. Cavendish, J.A. Cafeo, and R.D. Ryne. Combining field data and computer simulations for calibration and prediction. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26 :448, 2004.
- [Jao01] S. Jaouen. *Étude Mathématique et Numérique de Stabilité pour des Modèles Hydrodynamiques avec Transition de Phase*. Thèse de doctorat, Université Paris 6, 2001.
- [Jao07] S. Jaouen. A Purely Lagrangian Method for Computing Linearly-Perturbed Flows in Spherical Geometry. *J. Comp. Phys.*, 225 :464–490, 2007.
- [Jay68] E.T. Jaynes. Prior probabilities. *Systems Science and Cybernetics, IEEE Transactions on*, 4(3) :227–241, 1968.

- [Jay80] E.T. Jaynes. Marginalization and prior probabilities. *Bayesian Analysis in Econometrics and Statistics*, A. Zellner, ed., North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1980.
- [Jay89] E.T. Jaynes. *Papers on probability, statistics and statistical physics*, volume 50. Springer, 1989.
- [JC06] L.Masse S. Jaouen and B. Canaud. Hydrodynamic Instabilities in Ablative Tamped Flows. *Phys. Plas.*, 13 :122701, 2006.
- [JJ00] Protter P. Jacob J. *Probability Essentials*. Springer, 2000.
- [JMCR04] S. Jaouen J.-M. Clarisse and P.-A. Raviart. A Godunov Type Method in Lagrangian Coordinates for Computing Linearly-Perturbed Planar-Symmetric Flows of Gas Dynamics. *J. Comp. Phys.*, 198 :80–105, 2004.
- [Jou05] Hervé Jourden. *HERA : A Hydrodynamic AMR Platform for Multi-Physics Simulations*, volume Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer, 2005.
- [JP06] H. Jourden and S. Del Pino. Arbitrary High-Order Schemes for the Linear Advection and Wave Equations : Application to Hydrodynamics and Aeroacoustics. *C.R. Acad. Sci. paris, Ser. I*, 342 :441–446, 2006.
- [JSK02] M. Jardak, C.H. Su, and G.E. Karniadakis. Spectral polynomial chaos solutions of the stochastic advection equation. *Journal of Scientific Computing*, 17(1) :319–338, 2002.
- [Kee82] D Keefe. Inertial Confinement Fusion. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 32(1) :391–441, 1982.
- [Kee05] Andreas Keese. *Numerical solution of systems with stochastic uncertainties : a general purpose framework for stochastic finite elements*. PhD thesis, Technische Universität Braunschweig, Mechanik-Zentrum, 2005.
- [KL51] S. Kullback and R.A. Leibler. On information and sufficiency. *The Annals of Mathematical Statistics*, 22(1) :79–86, 1951.
- [KLM06] OM Knio and OP Le Maître. Uncertainty propagation in cfd using polynomial chaos decomposition. *Fluid dynamics research*, 38(9) :616–640, 2006.
- [KO01] M.C. Kennedy and A. O’Hagan. Bayesian calibration of computer models. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology)*, 63(3) :425–464, 2001.
- [KS51] S. Karlin and L.S. Shapley. Geometry of moment spaces. Technical report, DTIC Document, 1951.
- [KS05] J. Kaipio and E. Somersalo. *Statistical and computational inverse problems*, volume 160 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer, 2005.
- [Lap74] P.S. Laplace. *Mémoire sur la probabilité des causes par les évènements*. De l’Imprimerie Royale, 1774.

- [LBP12] D. Lucor, A. Birolleau, and G. Poëtte. Bayesian inference acceleration using iterative polynomial chaos. *Communications In Computational Physics*, 2012. Accepté.
- [LBP13] D. Lucor, A. Birolleau, and G. Poëtte. Iterative polynomial approximation adapting to arbitrary probability distribution. *SIAM*, 2013. à paraître.
- [LD09] Régis Lebrun and Anne Dutfoy. A generalization of the nataf transformation to distributions with elliptical copula. *Probabilistic engineering mechanics*, 24(2) :172–178, 2009.
- [LEJS07] D. Lucor, C. Enaux, H. Jourden, and P. Sagaut. Stochastic design optimization : Application to reacting flows and detonation. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 196(49-52) :5047–5062, 2007.
- [lj07] zambotti l. lacroix j., priouret p. *probabilités approfondies*. université pierre et marie curie, paris 6, 2007.
- [LKNG04] O. Le Maître, O. Knio, H. Najm, and R. Ghanem. Uncertainty propagation using Wiener-Haar expansions. *J. Comput. Phys.*, 197 :28–57, 2004.
- [LME⁺09] E. Leinov, G. Malamud, Y. Elbaz, L.A. Levin, G. Ben-Dor, D. Shvarts, and O. Sadot. Experimental and Numerical Investigation of the Richtmyer-Meshkov Instability under Re-Shock Conditions. *J. Fluid Mech.*, 626 :449–475, 2009.
- [LMK10] O. P. Le Maître and Omar M. Knio. *Spectral Methods for Uncertainty Quantification with applications to Computational Fluid Dynamics*. Scientific Computation. Springer Netherlands, 2010.
- [LMKNG04] OP Le Maître, OM Knio, HN Najm, and RG Ghanem. Uncertainty propagation using wiener-haar expansions. *Journal of Computational Physics*, 197(1) :28–57, 2004.
- [LMS07] D. Lucor, J. Meyers, and P. Sagaut. Sensitivity analysis of LES to subgrid-scale-model parametric uncertainty using Polynomial Chaos. *Journal of Fluid Mechanics*, 585 :255–279, 2007.
- [LRN⁺04] O. Le Maître, M. Reagan, H. Najm, R. Ghanem, and O. Knio. Multi-Resolution Analysis of Wiener-Type Uncertainty Propagation Schemes. *J. Comp. Phys.*, 197 :502–531, 2004.
- [Luc11] D. Lucor. *STOCHASTIC SPECTRAL APPROACH TO UNCERTAINTY QUANTIFICATION OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2011.
- [LV06] F. Liese and I. Vajda. On divergences and informations in statistics and information theory. *Information Theory, IEEE Transactions on*, 52(10) :4394–4412, 2006.
- [MB10] A. J. Majda and M. Branicki. Asynchronous time integration for polynomial chaos expansion of uncertain periodic dynamics. *DISCRETE AND CONTINUOUS DYNAMICAL SYSTEMS*, 28(1) :199–226, 2010.

- [MB12] A. J. Majda and M. Branicki. Lessons in uncertainty quantification for turbulent dynamical systems. *DISCRETE AND CONTINUOUS DYNAMICAL SYSTEMS*, 32(9) :3133–3221, 2012.
- [Mer09] J. Mercer. Funcions of positive ans negative type and their connection with the theory of integral equations. *Philadelphia Transactions of the Royal Society*, 1909.
- [MH12] A. J. Majda and J. Harlim. *Filtering complex turbulent systems*. Cambridge University Press, 2012.
- [MM06] L. Mathelin and O. P. Le Maître. A Posteriori Error Analysis for Stochastic Finite Element Solutions of Fluid Flows with Parametric Uncertainties. *ECCOMAS CFD*, 2006.
- [MN09a] Y.M. Marzouk and H.N. Najm. Dimensionality reduction and polynomial chaos acceleration of bayesian inference in inverse problems. *Journal of Computational Physics*, 228(6) :1862–1902, 2009.
- [MN09b] Youssef M. Marzouk and Habib N. Najm. Dimensionality Reduction and Polynomial Chaos Acceleration of Bayesian Inference in Inverse Problems. *J. Comp. Phys.*, 228(6) :1862–1902, 2009.
- [MNR07a] Y.M. Marzouk, H.N. Najm, and L.A. Rahn. Stochastic spectral methods for efficient bayesian solution of inverse problems. *Journal of Computational Physics*, 224(2) :560–586, 2007.
- [MNR07b] Youssef M. Marzouk, Habib N. Najm, and Larry A. Rahn. Stochastic Spectral Methods for Efficient Bayesian Solution of Inverse Problems. *J. Comp. Phys.*, 224(2) :560–586, 2007.
- [MP84] L. R. Mead and N. Papanicolaou. Maximum Entropy in the Problem of Moments. *J. Math. Phys.*, 25 (8), 1984.
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21 :1087–1092, 1953.
- [MS64] W.C. Meecham and A. Siegel. Wiener-hermite expansion in model turbulence at large reynolds numbers. *Phys. Fluids*, 7 :1178–1190, 1964.
- [MSL11] M. Meldi, P. Sagaut, and D. Lucor. A stochastic view of isotropic turbulence decay. *Journal of Fluid Mechanics*, 668 :351–362, 2011.
- [MX09a] Y. Marzouk and D. Xiu. A stochastic collocation approach to bayesian inference in inverse problems. *CICP*, 2009.
- [MX09b] Youssef Marzouk and Dongbin Xiu. A stochastic collocation approach to Bayesian inference in inverse problems. *Communications in Computational Physics*, 6(4) :826–847, 2009.
- [MZ09] Xiang Ma and Nicholas Zabaras. An adaptive hierarchical sparse grid collocation algorithm for the solution of stochastic differential equations. *Journal of Computational Physics*, 228(8) :3084 – 3113, 2009.

- [OB67] S.A. Orszag and L.R. Bissonnette. Dynamical properties of truncated Wiener-Hermite expansions. *Phys. Fluids*, 10 :2603, 1967.
- [OLMG01] H. N. Najm O.P. Le Maître, O. M. Knio and R. G. Ghanem. A Stochastic Projection Method for Fluid Flow I : Basic Formulation. *J. Comp. Phys.*, 173 :481–511, 2001.
- [OLMG02] H. N. Najm O.P. Le Maître, O. M. Knio and R. G. Ghanem. A Stochastic Projection Method for Fluid Flow II : Random Process. *J. Comp. Phys.*, 181 :9–44, 2002.
- [OR] J.J. O’Connor and E.F. Robertson. The mactutor history of mathematics archive.
- [PDL11] G. Poëtte, B. Després, and D. Lucor. Treatment of uncertain interfaces in compressible flows. *Comp. Meth. Appl. Math. Engrg.*, 200(1-4) :284–308, 2011.
- [Per13] G. Perrin. *Random fields and associated statistical inverse problems for uncertainty quantification – Application to railway track geometries for high-speed trains dynamical responses and risk assessment*. Doctoral thesis, speciality : mechanics, Université Paris Est, 2013.
- [Pin60] M.S. Pinsker. Information and information stability of random variables and processes. *Unknown*, 1960.
- [PL11a] G. Poëtte and D. Lucor. Iterative galerkin-based spectral projection method with application to compressible gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, submitted, 2011.
- [PL11b] G. Poëtte and D. Lucor. Non Intrusive Iterative Stochastic Spectral Representation with Application to Compressible Gas Dynamics. *J. of Comput. Phys.*, 2011. DOI information : 10.1016/j.jcp.2011.12.038.
- [PLJ12] G. Poëtte, D. Lucor, and H. Jourden. A stochastic surrogate model approach applied to calibration of unstable fluid flow experiments. *Comptes Rendus Mathématique*, 350(5-6) :319–324, 2012.
- [Poe09] G. Poette. *Propagation d’Incertitudes pour les Systèmes de Lois de Conservation, Méthodes Spectrales Stochastiques*. Phd thesis, Université Pierre et Marie Curie, Institut Jean Le Rond D’Alembert, 2009.
- [PTR98] Poggi, Thorembe, and Rodriguez. Velocity Measurements in turbulent gaseous mixtures iduced by Richtmyer-Meshkov instability. *Physics of Fluids*, 10 :11, 1998.
- [Rag08] M. Ragheb. Inertial confinement fusion. Technical report, CEA DAM DIF, 2008.
- [RC04a] C. P. Robert and G. Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer-Verlag, New York, 2nd edition edition, 2004.
- [RC04b] C.P. Robert and G. Casella. *Monte Carlo statistical methods*. Springer Verlag, 2004.

- [Rob07] C.P. Robert. *The Bayesian choice : from decision-theoretic foundations to computational implementation*. Springer Verlag, 2007.
- [Sap06] G. Saporta. *Probabilités, Analyse de Données et Statistique, 2e édition*. Technip, 2006.
- [Sav72] L.J. Savage. *The foundations of statistics*. Dover Pubns, 1972.
- [Ser96a] D. Serre. *Systèmes Hyperboliques de Lois de Conservation, partie I*. Diderot, 1996. Paris.
- [Ser96b] D. Serre. *Systèmes Hyperboliques de Lois de Conservation, partie II*. Diderot, 1996. Paris.
- [Shi07] Zhan Shi. *probabilités de base*. université pierre et marie curie, paris 6, 2007.
- [SK00] B. Sudret and A. Der Kiureghian. Stochastic Finite Element Methods and Reliability - A State of the Art Report. Technical Report UCB/SEMM-2000/08, Department of civil and environmental engineering, University of California, Berkeley, 2000.
- [Sud07] B. Sudret. *Uncertainty Propagation and Sensitivity Analysis in Mechanical Models, Contribution to Structural Reliability and Stochastic Spectral Methods*. Habilitation à Diriger des Recherches, Université Blaise Pascal - Clermont II, 2007.
- [SZ94] R. Samtaney and Norman J. Zabusky. Circulation deposition on shock-accelerated planar and curved density-stratified interfaces : models and scaling laws. *Journal of Fluid Mechanics*, 269 :45–78, 6 1994.
- [Sze39] G. Szego. *Orthogonal polynomials*, volume 23. American Mathematical Society, colloquim publications, 1939.
- [Tar87] A. Tarantola. *Inverse Problem Theory - Methods for Data Fitting and Model Parameter Estimation*. Elsevier, 1987.
- [Tar05] A. Tarantola. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. SIAM : Philadelphia, 2005.
- [Tor97] E.F. Toro. *Riemann solver and numerical methods for fluid dynamics*. Springer-Verlag, 1997.
- [Try10] J. Tryoen. Adaptive anisotropic stochastic discretization schemes for uncertain conservation laws. In *ASME–FEDSM Proceedings*, Montreal, Canada, 2010.
- [VS95] Vetter and Sturtevant. Experiments on the Richtmyer-Meshkov instability of an air/SF6 interface. *Shock Waves*, 4 :247–252, 1995.
- [Wal03] J. Waldvogel. Fast construction of the fejér and clenshaw-curtis quadrature rules. *BIT Numerical Mathematics*, 43(1) :1–18, 2003.
- [Wie38a] N. Wiener. The homogeneous chaos. *American Journal of Mathematics*, 60(4) :897–936, 1938.

- [Wie38b] N. Wiener. The homogeneous chaos. *Amer. J. Math.*, 60 :897–936, 1938.
- [WK05a] X. Wan and G.E. Karniadakis. An adaptive multi-element generalized polynomial chaos method for stochastic differential equations. *Journal of Computational Physics*, 209(2) :617–642, 2005.
- [WK05b] X. Wan and G.E. Karniadakis. An adaptive multi-element generalized polynomial chaos method for stochastic differential equations. *Journal of Computational Physics*, 209 :617–642, 2005.
- [WK06] X. Wan and G.E. Karniadakis. Multi-element generalized polynomial chaos for arbitrary probability measures. *SIAM J. Sci. Comp.*, 28(3) :901–928, 2006.
- [WK07] X. Wan and G.E. Karniadakis. Multi-element generalized polynomial chaos for arbitrary probability measures. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 28(3) :901–928, 2007.
- [WK09] Xiaoliang Wan and George Em Karniadakis. Error Control in Multi-Element Generalized Polynomial Chaos Method for Elliptic Problems with Random Coefficients. *Commun. Comp. Phys.*, 5(2-4) :793–820, 2009.
- [Xiu03] D. Xiu. The wiener-askey polynomial chaos for stochastic differential equations. Technical report, DTIC Document, 2003.
- [Xiu10] Dongbin Xiu. *Numerical Methods for Stochastic Computations : A Spectral Method Approach*. Princeton Univ. Press, 2010.
- [XK02] D. Xiu and G.E. Karniadakis. The Wiener-Askey Polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations. *SIAM J. Sci. Comp.*, 24 :619–644, 2002.
- [YB96] R. Yang and J.O. Berger. *A catalog of noninformative priors*. Institute of Statistics and Decision Sciences, Duke University, 1996.
- [YZL⁺06a] Y. Yu, M. Zhao, T. Lee, N. Pestieau, W. Bo, J. Glimm, and J.W. Grove. Uncertainty quantification for chaotic computational fluid dynamics. *Journal of Computational Physics*, 217 :200–216, 2006.
- [YZL⁺06b] Y. Yu, M. Zhao, T. Lee, N. Pestieau, W. Bo, J. Glimm, and JW Grove. Uncertainty quantification for chaotic computational fluid dynamics. *Journal of Computational Physics*, 217(1) :200–216, 2006.

Table des figures

1.1	Tube à choc : perturbation initiale de l'interface	4
1.2	Tube à choc : amplification de la perturbation initiale	5
1.3	Évolution de la puissance de calcul du ordinateur Téra du CEA	7
1.4	Analyse d'incertitudes	8
1.5	Analyse d'incertitudes couplée à l'inférence bayésienne	9
2.1	Propagation d'incertitude sur θ à travers u	14
2.2	Convergence en norme L^2 du chaos polynomial classique et du chaos polynomial généralisé	17
2.3	Nombre de terme dans gPC	19
2.4	Quadratures numériques	21
2.5	Quadrature numérique tensorisée pleine de Clenshaw-Curtis	22
2.6	Densité de probabilité des trois variables aléatoires en entrée	22
2.7	Densité de probabilité des trois variables aléatoires en sortie	23
2.8	Points et poids de quadrature adaptés des trois variables aléatoires en entrée	23
2.9	Premiers polynômes de la base adaptée pour les trois variables aléatoires en entrée	24
2.10	Approximations gPC correspondant aux trois variables aléatoires en entrée	24
2.11	Densité de probabilité des trois variables aléatoires en sortie approchées par gPC	25
2.12	gPC convergence avec P pour différentes quadratures	29
2.13	Approximations gPC : cas sinus	30
2.14	gPC convergence avec P pour différentes quadratures	31
2.15	Approximations gPC : cas indic	31
2.16	Intégration-troncature	32
2.17	Histogramme cas indic	33
2.18	Diagramme procédurale de l'algorithme i-gPC	37
2.19	Polynômes de Legendre et polynômes donnés par l'algorithme de Chebyshev étant donnés les moments exacts de la loi uniforme sur $[-1; 1]$	41
2.20	Polynômes de Legendre et polynômes donnés par l'algorithme de Chebyshev étant donnés les moments perturbés à 10^{-2} de la loi uniforme sur $[-1; 1]$	42
2.21	Approximation i-gPC du cas choc	55

2.22	Convergence L^1 et L^2 de l'approximation i-gPC du cas choc	56
2.23	Histogramme i-gPC du cas choc	56
2.24	Évolution du degré de troncature i-gPC du cas choc	57
2.25	Approximation i-gPC du cas bichoc pour différentes itérations	58
2.26	Convergence en norme L^2 de l'approximation i-gPC au cours des itérations du cas bichoc	58
2.27	Histogramme i-gPC du cas bichoc	59
2.28	Approximation i-gPC du cas Legendre	59
2.29	Convergence L^1 et L^2 de l'approximation i-gPC du cas Legendre	60
2.30	Approximation i-gPC du cas Legendre sans critère d'arrêt et de limitation de degré polynomial	61
2.31	Convergence L^1 et L^2 de l'approximation i-gPC du cas Legendre sans critère d'arrêt et de limitation de degré polynomial	62
2.32	Convergence L^1 et L^2 de l'approximation i-gPC du cas Legendre avec critère d'arrêt et de limitation de degré polynomial	62
2.33	Les trois approximations i-gPC correspondant aux trois lois d'entrée	63
3.1	Fonction marche : étude de convergence par rapport au degré de troncature gPC P de l'erreur l'approximation du modèle direct et de la divergence de Kullback-Leibler de l'a posteriori	83
3.2	Fonction marche : comparaison entre les divergences de Kullback-Leibler des a posteriori obtenus avec gPC et i-gPC pour différents niveaux de quadrature	84
3.3	Fonction marche : comparaison entre les erreurs L^1 des approximations gPC et i-gPC pour différents niveaux de quadrature	84
3.4	Modèle direct exact, approximation gPC du modèle direct avec un degré polynomial 8, approximation i-gPC du modèle direct avec un degré polynomial 8	85
3.5	Un exemple réaliste : niveau de quadrature $l = 6$, $P = 4$	85
3.6	Distribution de quelques réalisations de la condition initiale incertaine	86
3.7	Burgers réalisations à $t = 1$	87
3.8	2d step	88
3.9	Burgers non visqueux 2D : étude de convergence par rapport au degré de troncature polynomial P de l'erreur d'approximation du modèle direct et de la divergence de Kullback-Leibler de l'a posteriori	88
3.10	Plusieurs réalisations de la condition initiale et de la solution au temps final pour le problème de Burgers à trois dimensions stochastiques.	90
3.11	3D Burgers non visqueux cas test, marginales par rapport à θ_i	91
3.12	Densité de masse à quatre temps différents correspondant à différentes réalisation de l'abscisse de l'interface initiale : moyenne en noir, maximum en bleu, minimum en vert.	92
3.13	Adaptation de la base polynomiale i-gPC à la solution	93
3.14	Problème de Riemann : pdfs	94

3.15	Problème de Riemann : convergence de la divergence de Kullback-Leibler, de l'erreur L^2 et de l'erreur L^1 par rapport au degré polynomial P pour différents niveaux d'intégration k de 6 à 14. Nous remarquons le comportement étrange de la divergence de Kullback-Leibler qui augmente avec le niveau d'intégration à P fixé (3.15(a)) ce qui devrait être l'inverse comme pour les erreurs L^1 et L^2 (3.15(b)). L'utilisation de i-gPC améliore la convergence de la divergence de Kullback-Leibler, de la norme L^1 et de la norme L^2 .	94
4.1	Perturbations vs. Méthode aux Moments, Burgers	110
4.2	Perturbations vs. Méthode aux Moments, Euler 1-D	113
4.3	Tube à choc	116
4.4	Instabilité de Richtmyer-Meshkov	117
4.5	Instabilité de Richtmyer-Meshkov	118
4.6	Tube à choc avec les conditions initiales de VS85	119
4.7	Interface maillée	120
4.8	Non convergence de la longueur de l'interface en fonction de la discrétisation spatiale	122
4.9	Comportement fractal de l'interface entre les fluides dans un tube à choc de Richtmyer-Meshkov	123
4.10	Études de convergence en fonction de la discrétisation spatiale	128
4.11	Exemple d'évolution de la taille de la zone d'instabilités hydrodynamiques	129
4.12	Études de convergence en fonction des discrétisations spatiale et stochastique pour la condition initiale	131
4.13	Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation spatiale	132
4.14	Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation spatiale	133
4.15	Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique	134
4.16	Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique	135
4.17	Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique	136
4.18	Convergence de la taille des instabilités en fonction de la discrétisation stochastique	137
4.19	Études de convergence en fonction de la discrétisation stochastique	139
4.20	Exemple d'évolution de la taille de la zone d'instabilités hydrodynamiques pour des paramètres de discrétisation stochastiques pertinents	140
4.21	Évolution des indices de Sobol en fonction du temps	142
4.22	Tailles de zone de mélange expérimentales [VS95]	144
4.23	Convergence des valeurs propres du noyau exponentiel pour différentes longueurs de corrélation	149

4.24	Fonctions propres du noyau exponentiel pour $L = 1$ et $\sigma = 0.1$	150
4.25	Réalisations (50) du processus stochastique pour un noyau exponentiel pour $L = 1$ et $\sigma = 0.1$	151
4.26	Réalisations (50) du processus stochastique pour un noyau exponentiel pour $L = 0.1$ et $\sigma = 0.1$	152
4.27	Pourcentage d'énergie dans le développement de Karhunen-Loève pour un noyau exponentiel	153
4.28	Toutes simulations confondues pour l'étude bayésienne sous discrétisée . .	156
4.29	Différentes TMZ a posteriori	156
4.30	Différentes TMZ a posteriori	157
4.31	Différentes TMZ a posteriori	158
B.1	Densité de probabilité des lois continues usuelles	172
B.2	Fonction de répartition des lois continues usuelles	173
B.3	Exemple d'histogramme d'une variable aléatoire gaussienne, évolution en fonction du nombre de tirages	175
D.1	Mise à jour des poids de quadrature	184
D.2	Modèle Legendre	186
D.3	Degré polynômial sélectionné en fonction du nombre de points de quadra- ture sur la cas Legendre	186
D.4	Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas Legendre . . .	187
D.5	Degré polynômial sélectionné en fonction du nombre de points de quadra- ture sur la cas sinus	188
D.6	Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas sinus	188
D.7	Modèle choc	189
D.8	Degré polynômial sélectionné en fonction du nombre de points de quadra- ture sur la cas choc	189
D.9	Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas choc	190
D.10	Modèle bichoc	190
D.11	Degré polynômial sélectionné en fonction du nombre de points de quadra- ture sur la cas bichoc	191
D.12	Erreur L^2 théorique et LOO en fonction du degré gPC, cas bichoc	191
D.13	Quadrature numérique tensorisée pleine de Clenshaw-Curtis modifiée . . .	192
E.1	Principe de l'algorithme de Newton	199

Liste des tableaux

2.1	Bases polynomiales classiques pour gPC	20
2.2	Erreur quadratique de y_i dans l'espace stochastique associé à X_i	25
2.3	Erreur quadratique de y_i dans l'espace stochastique associé à X_i	60
F.1	Comparatif entre les indices de Sobol analytiques de la fonction d'Ishigami et l'estimation gPC	204

Index

A	
analyse de second moment	177
Apriori	68
B	
Théorème de Bayes	66, 170
Cas test Bichoc	57
C	
Théorème de Cameron-Martin	27
Chaos polynomial	14
Chaos polynomial généralisé itératif	32
Algorithme de Chebychev	38
Cas test Choc	55
Christoffel	38
Convergence L^p	173
Covariance	146
Critère de sortie de l'algorithme i-gPC	54
D	
Densité de probabilité	171
E	
Espace des états	169
Équation d'Euler	90, 115
Évènements indépendants	171
Exemples numériques bayésien	81
Exemples numériques gPC	28
Exemples numériques i-gPC	54
G	
Phénomène de Gibbs	30
H	
Déterminant de Hankel	53
Problème aux moments de Hausdorff non tronqué	52
Problème aux moments de Hausdorff tronqué	52
Solution au problème de Hausdorff tronqué	53
Histogramme	174
I	
Inférence bayésienne	66
intrusive	177
K	
Karhunen-Loève	145
Divergence de Kullback-Leibler	74
L	
Cas test Legendre	57
Loi d'une variable aléatoire	172
Loi forte des grands nombres	177
M	
méthode par perturbations	177, 179
Mesure de probabilité	170
Moments	38, 173
Problème aux moments non tronqué	52
Problème aux moments tronqué	52
Réalisabilité des moments statistiques	47
Monte-Carlo	177
N	
Algorithme de Newton	198
non intrusive	177
P	
Inégalité de Pinsker	75
Probabilité conditionnelle	170
Processus stochastique	174
propriété 4.1	105

T

Théorème Central Limite 178
Tribu 169

V

Variable aléatoire 172
Variation totale 75
Vecteur aléatoire 172

Z

Zone de mélange 121