



N° d'ordre : 2625

THÈSE

présentée pour obtenir

le titre de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

École doctorale : **Mécanique Energétique Génie Civil et Procédés**

Spécialité : **Dynamique des Fluides**

par

Julien LAURENCEAU

Surfaces de réponse par krigeage pour l'optimisation de formes aérodynamiques.

soutenue le 26 juin 2008 devant le jury composé de :

G. CARRIER	Ingénieur de recherche à l'Onera, Châtillon	Examineur
J.-A. DÉSIDÉRI	Directeur de recherche, INRIA, Sophia-Antipolis	Rapporteur
M. MEAUX	Ingénieur de recherche à Airbus, Toulouse	Examineur
B. MOHAMMADI	Professeur à l'Université Montpellier II	Rapporteur
J. NOAILLES	Professeur émérite à l'ENSEEIH, Toulouse	Examineur
P. SAGAUT	Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie, Paris	Directeur de thèse
M. VISONNEAU	Directeur de recherche, École Centrale, Nantes	Examineur

Thèse préparée à Airbus et au CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique)

Réf. CERFACS : TH/CFD/08/62

Remerciements

Je remercie M. J.-A. Désidéri et M. B. Mohammadi d'avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse, ainsi que M. G. Carrier, M. M. Meaux, M. J. Noailles, M. P. Sagaut et M. M. Visonneau pour leur participation à mon jury de thèse.

Lors de cette thèse CIFRE, j'ai partagé mon temps entre le service méthodes aérodynamiques d'Airbus (EGAMT) et le service CFD (plus particulièrement l'équipe AAM) du CERFACS. Ce fut un réel plaisir d'un point de vue professionnel autant que personnel de faire partie de ces deux équipes aux compétences énormes et de bénéficier des moyens de ces deux structures (désolé pour les scripts qui font booter kali). Je salue donc P. Larrieu, G. Chevalier et J.-F. Boussuge d'être parvenu à une telle atmosphère de travail.

Je tiens aussi à remercier les nombreuses personnes d'origines diverses avec qui j'ai partagé du temps, des idées, des astuces ou du code lors de ces trois années et sans qui cette thèse ne serait pas ce qu'elle est.

Je voudrais saluer mon initiateur, J. Peter, qui m'a fait découvrir le monde merveilleux de l'optimisation de formes aérodynamiques lors d'un stage DEA-ingénieur à l'ONERA.

Je remercie P. Sagaut, mon directeur de thèse, pour sa confiance sans faille et ses conseils avisés.

Merci également à M. Montagnac, mon tuteur CERFACS, pour son aide tout au long de cette thèse. Son recul et sa logique m'ont beaucoup apporté, notamment lors de la rédaction.

Je remercie spécialement M. Meaux, mon tuteur Airbus. Sa vivacité d'esprit et son intérêt ont été un parfait stimulateur et nos nombreuses discussions débridées sur l'optimisation et bien d'autres sujets très enrichissantes.

Enfin, merci à mon entourage et particulièrement à Sarah qui m'a soutenue activement durant la dernière ligne droite.

Table des matières

Introduction	9
I Optimisation numérique et outils de conception aérodynamique à Airbus	13
I.1 Définition d'un problème d'optimisation	14
I.1.1 Optimisation multi-objectif de Pareto	15
I.1.2 Optimisation multi-objectif par combinaison	16
I.1.2.1 Equivalence des objectifs par leur valeur absolue	17
I.1.2.2 Equivalence des objectifs par leur variation admissible	18
I.2 Choix d'un algorithme d'optimisation	19
I.2.1 Problèmes abordés	20
I.2.2 Exploration, exploitation	21
I.2.3 Robustesse d'un optimum	21
I.2.4 Algorithmes d'optimisation globale	21
I.2.5 Algorithmes d'optimisation locale	22
I.2.6 Bilan comparatif entre algorithmes d'optimisation globale et locale	23
I.3 Présentation de la chaîne d'optimisation OPTaliA	23
I.3.1 Initialisation du problème et paramétrisation	23
I.3.2 Déformation de maillage	26
I.3.3 Simulation numérique	26
I.3.4 Post-traitement et évaluation des fonctions (traînée, portance)	26
I.3.5 Evaluation du gradient	27
I.3.5.1 Méthode des différences finies	27
I.3.5.2 Méthode de l'état adjoint discret	27
I.3.6 Quelques chiffres	28
I.3.7 Algorithme d'optimisation	29
I.3.8 Gestion du processus d'optimisation	29
I.4 Intérêt des surfaces de réponse	29
I.4.1 Surfaces de réponse globales	30
I.4.2 Surfaces de réponse locales	30
I.5 Bilan	31
II Construction efficace de surfaces de réponse par Krigeage et Cokrigeage	33
II.1 Introduction	33
II.2 Article « Building Efficient Response Surfaces of Aerodynamic Functions with Kriging and Cokriging »	34
II.3 Compléments	48

II.3.1	Krigeage et corrélation spatiale	48
II.3.2	L'échantillonnage	49
II.3.2.1	Taille de l'échantillonnage	49
II.3.2.2	Echantillonnage global	51
II.3.2.3	Critères d'échantillonnage pour la recherche de minimum	52
II.3.2.3.1	Critère LCB	52
II.3.2.3.2	Critère EI	52
II.3.2.3.3	Critère LCI	52
II.3.3	Cokrigeage et interpolation du gradient	52
II.3.3.1	Parallélisation du Cokrigeage	53
II.3.3.2	Cokrigeage indirect tronqué en direction	53
II.3.3.3	Cokrigeage indirect tronqué en échantillon	53
II.4	Bilan	53
III	Optimisation fluide structure biniveau par surfaces de réponse globales	55
III.1	Intégration aérodynamique d'une installation motrice	56
III.2	Optimisation multidisciplinaire	57
III.2.1	Introduction	57
III.2.2	Couplage géométrique et couplage physique	59
III.2.3	Optimisation intégrée, FIO	60
III.2.4	Optimisation intégrée biniveau, BLISS	61
III.3	Application à l'optimisation fluide-structure de la position d'un moteur	64
III.3.1	Fonctions objectifs et variables de forme, haut-niveau	65
III.3.2	Analyse bas-niveau structure du mât	65
III.3.3	Analyse bas-niveau aérodynamique de la configuration fuselage-aile-mât-nacelle	67
III.3.4	Optimisation haut-niveau	68
III.3.5	Résultats	70
III.3.5.1	Surface de réponse structure	70
III.3.5.2	Surface de réponse aérodynamique	73
III.3.5.3	Résultats de l'optimisation haut-niveau	73
III.3.6	Bilan	76
IV	Comparaison d'algorithmes d'optimisation par gradient et surface de réponse locale	79
IV.1	Introduction	79
IV.1.1	Environnement de l'étude comparative	80
IV.1.2	Optimiseurs par surfaces de réponse locales	81
IV.2	Acte de colloque « Comparison of Gradient and Response Surface Based Optimization Frameworks Using Adjoint Method »	82
IV.2.1	Résumé de l'optimisation à 6 variables du profil RAE2822	107
IV.2.2	Résumé de l'optimisation à 45 variables de l'aile AS28	108
IV.3	Optimisation à 48 variables d'un avion complet (configuration AS28)	109
IV.4	Compléments	115
IV.4.1	Discussion sur la définition du problème	115
IV.4.1.1	Déformations positives	115
IV.4.1.2	Trainée de frottement	116
IV.4.1.3	Portance et trainée induite	116
IV.4.1.4	Irrégularité du champ de déformation	117
IV.4.2	Validation des solutions obtenues	118
IV.5	Bilan	120

Conclusion	123
A Critères de raffinement d'échantillonnage à pondération dynamique	135
A.1 Les critères employés	135
A.1.1 Critères à pondération dynamique entre fonction et erreur	135
A.1.1.1 Critère LCB dynamique (LCB_b_{dyn})	136
A.1.1.2 Critère LCB par incrément de confiance (LCB_b_{dyntr})	136
A.1.1.3 Critère LCB par incrément de méfiance (LCB_b_{dynctr})	137
A.2 Résultats	137
A Étude de la fonction de Hicks-Henne	141
A.1 Fonction de Hicks-Henne	141
A.2 Dérivée par rapport à l'amplitude	142
A.3 Dérivée par rapport au pôle	142
A.4 Dérivée par rapport à l'exposant	143

Introduction

L'avion est un système complexe et plusieurs années sont nécessaires pour sa conception. Cette dernière est un travail collaboratif entre plusieurs milliers d'ingénieurs de disciplines très variées : aérodynamique, structure, systèmes, propulsion, etc. Elle représente pour l'industriel un coût important, en raison notamment des performances toujours accrues des nouveaux avions. La réduction des coûts de conception repose en partie sur la maîtrise de la durée du cycle de conception, d'où l'importance de développer des outils efficaces pour les concepteurs.

Pour les concepteurs aérodynamiciens, l'objectif n'est pas simplement de faire voler l'avion en générant une force de portance suffisante, mais surtout de minimiser la force de traînée s'opposant au mouvement de l'avion.

Une réduction de traînée entraîne directement une consommation de carburant inférieure. Cette économie est capitale puisqu'elle peut se traduire, soit par une distance franchissable plus importante, soit par une masse de carburant inférieure qui permet d'augmenter le nombre de passagers. Par exemple, sur un gros porteur, une réduction de 1% de la traînée est équivalente à une masse réduite de plusieurs tonnes. Ce pourcent de réduction de traînée peut aussi se traduire, après une année d'exploitation, par environ 300 000 litres de carburant économisés.

Il existe de nombreux moyens pour réduire la traînée d'un avion [113], dont les principaux sont :

- le profilage de la forme externe de l'avion,
- le profilage de la forme des excroissances (antennes, sondes, etc.),
- la réduction de la rugosité du carénage externe,
- l'ajout de dispositifs de contrôle d'écoulement (générateurs de tourbillons, fentes, jets, décharges électriques, etc.).

Le cadre de cette thèse est la conception de formes générant un minimum de traînée (profilage de l'avion).

Certaines relations simples liant traînée et forme existent. Par exemple, la traînée de frottement est générée par le frottement de l'air sur le carénage externe de l'avion. Ainsi, les aérodynamiciens savent que pour la réduire il faut diminuer la surface du carénage externe. Cependant, ce n'est pas l'unique source de traînée. Pour évaluer la traînée totale d'une forme, il faut déterminer l'écoulement à son voisinage. Cependant, il est impossible de maîtriser intuitivement les relations existantes entre forme et traînée. Le concepteur peut faire appel à son expérience pour proposer une déformation qui lui semble intéressante, mais doit s'en remettre à la simulation numérique pour évaluer le gain éventuel. C'est la méthode empirique par essai et erreur. Elle n'est pas adaptée aux problèmes de réduction de traînée car elle nécessiterait de nombreux essais pour parvenir à éventuellement améliorer la traînée. Or, plusieurs heures sont nécessaires pour évaluer la performance d'une seule forme.

Pour résoudre ce problème efficacement, il suffit de considérer la traînée comme une fonction mathématique dépendant de la déformation. Ainsi, il devient possible d'utiliser un algorithme d'optimisation pour rechercher automatiquement le minimum de cette fonction. Cet algorithme s'inscrit dans un processus itératif nécessitant

un certain nombre d'évaluations de fonction. Le savoir-faire du concepteur intervient alors au niveau de la définition du domaine d'étude. C'est l'optimisation numérique de formes aérodynamiques.

En plus de l'outil de simulation numérique, le processus d'optimisation de formes nécessite la mise en place d'un algorithme d'optimisation et d'outils de déformation de formes. L'efficacité du processus repose sur l'ensemble de tous ces outils et de la manière dont ils sont connectés. Cependant, l'algorithme d'optimisation occupe une place importante puisque c'est le chef d'orchestre du processus. Dans ce contexte, ce travail de thèse vise à améliorer un outil d'optimisation de formes aérodynamiques à travers l'étude de nouveaux algorithmes d'optimisation.

L'optimisation est une discipline très importante du monde de l'informatique. En effet, un classement des dix algorithmes les plus importants du XX^{ème} siècle en science et ingénierie a été établi en 2000 [32]. Le deuxième algorithme de ce classement est un algorithme d'optimisation, la méthode du simplexe pour les problèmes linéaires. Cette méthode, établie en 1947 par G. Dantzig, n'est bien entendu pas la seule. Il en existe de très nombreuses : simplexe, plus forte pente, Newton, quasi-Newton, programmation quadratique séquentielle, région de confiance, algorithme génétique, recuit simulé, essais particuliers, surfaces de réponse, etc. Cette diversité s'explique par la variété des problèmes que l'optimisation est capable de résoudre, par exemple :

- concevoir une forme aérodynamique optimale,
- trouver le plus court chemin entre deux points pour un GPS,
- établir l'ordonnancement d'objets de dimensions diverses de manière à en rentrer le maximum dans un volume restreint, etc.

Malheureusement, il n'existe pas d'algorithme d'optimisation qui permette de résoudre tous ces problèmes. Etant donné que le nombre de problèmes d'optimisation possibles est infini, un théorème [121] a montré qu'un algorithme adapté à une certaine classe de problèmes sera inadapté pour le reste des problèmes. Pour que l'outil d'optimisation aérodynamique soit efficace, son algorithme d'optimisation doit être adapté aux spécificités des problèmes de minimisation de traînée.

D'un point de vue général, les problèmes d'optimisation de formes aérodynamiques sont très fréquemment résolus par des méthodes de descente par gradient. Cette méthode a l'avantage de converger très rapidement. Comme l'évaluation de la traînée nécessite une simulation numérique coûteuse en temps de calcul, elle permet d'obtenir rapidement une forme plus performante. De plus, elle s'accommode bien des problèmes à grand nombre de variables, notamment grâce à l'utilisation du vecteur gradient. En pratique, son défaut majeur est qu'elle converge trop vite vers un optimum local. Elle améliore la performance de la forme mais, en général, un autre algorithme pourrait, sur le même problème, parvenir à une meilleure amélioration.

Parmi les algorithmes d'optimisation globale, ceux basés sur les surfaces de réponse semblent les plus prometteurs. Une surface de réponse est tout simplement un modèle approché de la fonction à optimiser. A partir de quelques évaluations, il est possible d'interpoler la fonction sur tout le domaine d'étude en utilisant, par exemple, une méthode de Krigage. Bien que cette interpolation mène à une perte de précision par rapport à la fonction obtenue par simulation numérique de l'écoulement autour de la forme, elle a l'avantage de pouvoir être évaluée à un coût de calcul dérisoire. L'emploi de surfaces de réponse permet, lors du processus d'optimisation, de substituer la fonction par son approximation et de réduire ainsi le coût de calcul. Toutefois, la fonction étudiée étant complexe, la surface de réponse est en général incapable de la reproduire de manière totalement fiable. Cela peut être évité en limitant la complexité de la fonction, par exemple en se limitant à un faible nombre de variables. La plupart des optimisations de formes aérodynamiques utilisant cette méthode dans le contexte de la simulation numérique haute fidélité se contentent de problèmes ainsi simplifiés.

Plus récemment, l'utilisation de surfaces de réponse employant l'approche de Cokrigage a été suggérée pour améliorer leur précision. Le Cokrigage permet de construire des surfaces de réponse interpolant non seulement l'information sur la fonction, mais aussi sur son gradient. Cette information additionnelle permet à la surface de réponse d'être plus précise. Cette thèse traite d'optimisation de formes par méthodes à base de surfaces de réponse par Krigage et Cokrigage.

Les formes étudiées sont principalement des ailes en régime de croisière. Les ailes ont pour fonction principale de générer la portance, mais sont aussi une importante source de traînée. Le régime de croisière a été choisi car un avion long-courrier y passe la majorité de son temps de vol. En outre, dans ces conditions, l'écoulement autour de l'avion y est complexe. L'avion vole à une vitesse élevée et la vitesse de l'air par rapport à l'avion est localement supérieure à la vitesse du son (écoulement transsonique), notamment sur l'extrados¹ de l'aile. Il se trouve que de petites déformations de l'aile se traduisent par de fortes variations de la traînée. Une variation d'un pourcent peut être la conséquence d'une déformation locale de quelques centimètres alors que l'aile mesure plusieurs mètres. Il faut donc déterminer en tout point de l'aile l'amplitude et la direction de la déformation à appliquer pour réduire la traînée. Ce champ surfacique de vecteurs est déterminé grâce à quelques dizaines de bosses de Hicks-Henne, au total le nombre de variables envisagé est de l'ordre de la cinquantaine.

L'outil d'optimisation à améliorer est bâti autour d'une méthode de descente par gradient (type quasi-Newton BFGS). C'est l'outil OPTaliA employé en conception à Airbus. Il utilise pour la simulation numérique de l'écoulement le logiciel *elsA* (développé par l'ONERA). L'écoulement est modélisé par le système d'équations RANS. La traînée est calculée par une méthode de type champ lointain. Cet outil est capable de calculer efficacement le vecteur gradient² par l'intermédiaire de la résolution du système adjoint discret d'*elsA*.

Le chapitre I introduit les notions d'optimisation essentielles à la bonne compréhension des applications qui suivront. Il décrit aussi globalement l'outil d'optimisation de formes aérodynamiques OPTaliA.

Le chapitre II porte sur la construction de surfaces de réponse pour modéliser efficacement les fonctions usuellement étudiées en aérodynamique. Pour cela, les formulations retenues sont le Krigeage pour interpoler une fonction à partir d'une base de données d'évaluations de la fonction seule, et le Cokrigeage pour interpoler une fonction à partir d'une base de données d'évaluations de la fonction et de son gradient. Les méthodes de distribution des échantillons (points de construction) dans le domaine d'étude y sont aussi abordées. Une étude de l'influence du nombre d'échantillons et du nombre de variables sur la précision des surfaces de réponse y est menée. Une nouvelle formulation de Cokrigeage indirect tronqué en échantillon est aussi introduite. Elle permet de réduire le coût de calcul, trop important, du Cokrigeage en dimension élevée.

Dans cette thèse, les surfaces de réponse sont classifiées en deux catégories : locales et globales. Une surface de réponse locale est considérée efficace seulement en ses points de construction. Une surface de réponse globale est considérée efficace sur le domaine d'étude complet.

Le chapitre III traite d'une optimisation par surfaces de réponse globales. Le problème étudié est de type multidisciplinaire, c'est à dire qu'une forme doit être conçue pour être performante du point de vue de plusieurs disciplines simultanément. Ici, deux disciplines sont abordées : l'aérodynamique et la structure. L'application traite de l'intégration d'une installation motrice sous l'aile d'un avion. L'optimisation multidisciplinaire de formes est une branche particulière de l'optimisation de formes pour laquelle des méthodes spécifiques sont utilisées afin de prendre en compte les contraintes liées à la répartition des tâches entre services experts. Chez un industriel tel qu'Airbus, l'aérodynamique et la structure sont du ressort de deux départements différents qui utilisent des outils différents. Les méthodes d'optimisation multidisciplinaire permettent de coopérer efficacement tout en maintenant une certaine autonomie entre disciplines. Pour résoudre ce problème, une méthode d'optimisation biniveau est adoptée. Elle est basée sur des surfaces de réponse globales pour connecter les disciplines entre elles. La validité de cette application est discutée à travers, d'une part une étude d'erreur d'approximation et d'autre part à partir d'un front de Pareto.

Le chapitre IV est centré sur la discipline aérodynamique. L'étude menée dans ce chapitre part du constat que pour avoir un outil d'optimisation efficace, l'algorithme d'optimisation doit être particularisé aux problèmes traités en aérodynamique [121]. Un nouvel algorithme d'optimisation par surfaces de réponse locales est proposé. Il est mis en œuvre sous la forme de deux versions : une à base de Krigeage et une à base de Cokrigeage. Pour juger de la validité de ces algorithmes, ils sont comparés à un algorithme de référence utilisant une méthode de descente par gradient. Trois cas tests représentatifs des problèmes rencontrés en conception

1. L'extrados est la surface supérieure (orientée vers le ciel). L'intrados est la surface inférieure de l'aile (orientée vers le sol).
2. Gradient : sensibilité de la fonction par rapport aux variables de forme.

aérodynamique sont traités : un profil d'aile à 6 variables de forme, une aile isolée à 45 variables et un avion complet à 48 variables. Afin de juger des qualités de ces algorithmes, des critères de comparaison sont mis en place. Ils caractériseront notamment leurs performances en terme d'exploitation et d'exploration.

Optimisation numérique et outils de conception aérodynamique à Airbus

Nomenclature

Cd	Coefficient de traînée
Cd_f	Coefficient de traînée de frottement
Cd_p	Coefficient de traînée de pression
Cd_{vp}	Coefficient de traînée de pression visqueuse
Cd_w	Coefficient de traînée de choc
Cd_i	Coefficient de traînée induite
Cd_{sp}	Coefficient de traînée parasite
\mathcal{D}	Domaine d'étude des variables
E	Energie totale du fluide (n_X)
\mathcal{F}	Domaine des solutions admissibles
F	Vecteur des fonctions objectifs (n_F)
G	Vecteur des fonctions contraintes (n_G)
HH	Fonction de déformation de Hicks-Henne
k	Vecteur des coefficients d'équivalence (n_F)
n_α	Nombre de variables, dimension de \mathcal{D}
n_{calc}	Nombre de vecteurs variables à évaluer pour converger
n_F	Nombre de fonctions objectifs
n_G	Nombre de fonctions contraintes
n_{pop}	Taille de la population
n_X	Nombre d'éléments du maillage
R	Résidu des équations RANS discrétisées
U	Vecteur vitesse du fluide ($3n_X$)
W	Vecteur des variables conservatives ($5n_X$)
X	Maillage (n_X)
α	Vecteur des variables (n_α)
λ	Vecteur adjoint ($5n_X$)
ρ	Masse volumique du fluide (n_X)

Indices

i	$\in [1, n_F]$
j	$\in [1, n_\alpha]$

k k-ième itération $\in [1, +\infty[$

Exposants

* Valeur optimale
 NF Intégration champ proche
 FF Intégration champ lointain

Dans ce chapitre, nous allons aborder toutes les notions utiles à la bonne compréhension et à la reproductibilité des travaux effectués durant cette thèse. Etant donnée la variété des domaines connexes à l'optimisation de formes aérodynamiques par simulation numérique, seuls les points clés seront décrits avec mention de références bibliographiques pour certains points d'approfondissement.

L'optimisation automatique peut s'appliquer à n'importe quel système tant qu'il est possible de le formaliser par un problème d'optimisation et de le modéliser.

Dans cette thèse, l'optimisation est utilisée dans trois contextes différents. Tout d'abord, pour modéliser des données issues de simulations numériques par une surface de réponse, l'optimisation permet de choisir parmi une famille de surfaces celle qui minimise l'erreur ; le réglage des paramètres de construction d'une surface de réponse est un problème d'optimisation. Ensuite, lors de la conception de la structure primaire de l'avion, la masse doit être optimisée tout en respectant des contraintes de charge structurelle. Les variables de conception sont les dimensions et positions des poutres, panneaux et renforts. Enfin, d'un point de vue aérodynamique, il faut optimiser la traînée en respectant la contrainte de portance grâce à des déformations du carénage externe de l'avion.

Ces problèmes peuvent être traités de manière empirique par essai et erreur (« trial and error method »), mais leur résolution par l'optimisation procure de nombreux avantages. Elle permet :

- d'atteindre la meilleure performance pour un problème donné,
- de gagner du temps en augmentant la réactivité de la boucle de conception,
- d'aider le concepteur à mieux comprendre les phénomènes physiques en œuvre,
- de trouver une solution à un problème trop complexe à résoudre de manière empirique.

I.1 Définition d'un problème d'optimisation

L'optimisation est une branche des mathématiques, plus particulièrement de l'analyse fonctionnelle, qui étudie les méthodes permettant de trouver un minimum d'une fonction. C'est par la formulation du problème d'optimisation que le lien entre les mathématiques et la conception aérodynamique est réalisé. Un problème d'optimisation est défini par :

- L'espace des variables, $D \subset \mathcal{R}^{n\alpha}$.
- La (les) fonction(s) contrainte(s) d'égalité ou inégalité à respecter déterminant l'espace d'étude, $\mathcal{D} \subset D$.
- La fonction objectif $F(\alpha)$, à minimiser sur \mathcal{D} .

Le problème consiste à trouver le minimum (global) α^* de la fonction F sur \mathcal{D} . La fonction objectif peut être multimodale et admettre des optima locaux respectant la condition suivante,

$$\alpha^* \in \mathcal{D} \text{ minimum local de } F \Leftrightarrow \exists \mathcal{S}_{\mathcal{D}} \subset \mathcal{D}, \mathcal{S}_{\mathcal{D}} \text{ voisinage de } \alpha^* \text{ tel que } \forall \alpha \in \mathcal{S}_{\mathcal{D}}, F(\alpha^*) \leq F(\alpha). \quad (\text{I.1})$$

Autrement dit, un minimum se trouve au fond d'une vallée notée $\mathcal{S}_{\mathcal{D}}$.

La fonction représentée en figure I.1 admet trois minima. Le meilleur des minima, α_2^* , est le minimum global, les autres sont des minima locaux.

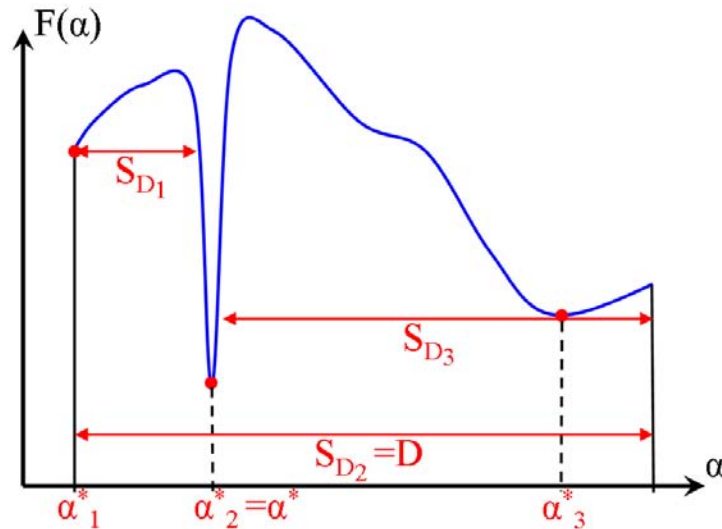


FIG. I.1 – Illustration de la notion de minimum.

Les problèmes étudiés dans le cadre de cette thèse considèrent uniquement des contraintes de bornes sur la valeur des variables et aucunes contraintes générales. A partir d'une forme initiale, il s'agira de déterminer le champ de déformation permettant de minimiser la traînée de l'avion en condition de vol de croisière.

Lorsque la fonction objectif est dérivable, une condition nécessaire pour caractériser un minimum est connue sous la condition de Karush-Kuhn-Tucker (KKT [13]) qui en l'absence de contraintes s'écrit,

$$\alpha^* \in \mathcal{D} \text{ est un minimum} \Rightarrow \nabla F(\alpha^*) = 0. \quad (I.2)$$

Si de plus la fonction est convexe sur \mathcal{D} , alors la réciproque est vraie [13]. Cette condition peut s'étendre aux problèmes à variables bornées en considérant le gradient projeté (élimination de la composante normale à la frontière).

Il est difficile de résumer la performance d'un système complexe tel qu'un avion à travers une seule fonction objectif. En général, le travail des concepteurs consiste à trouver un compromis entre plusieurs objectifs antagonistes. En optimisation, ces problèmes multi-objectifs peuvent être traités de deux manières :

- optimisation multi-objectif de Pareto,
- optimisation multi-objectif par combinaison.

I.1.1 Optimisation multi-objectif de Pareto

En considérant plusieurs fonctions objectifs, le problème n'admet plus une seule solution mais un ensemble de solutions appelé front de Pareto. Un optimum de Pareto est un état dans lequel un objectif ne peut pas être amélioré sans en détériorer un autre. Une telle solution est dite non dominée. La relation de dominance entre deux solutions s'exprime par la relation,

$$\forall (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathcal{D}, \alpha_1 \prec \alpha_2 \Leftrightarrow \begin{cases} \forall i, F_i(\alpha_1) \leq F_i(\alpha_2) \\ \exists \tilde{i} / F_{\tilde{i}}(\alpha_1) < F_{\tilde{i}}(\alpha_2) \end{cases}. \quad (I.3)$$

Le front de Pareto est défini comme l'ensemble des solutions non dominées. En général, c'est une hypersurface d'un espace de dimension n_F sans particularité. Il peut être discontinu (souvent à cause de contraintes), non borné ou non convexe.

Cette notion est très simple à appréhender de manière graphique en traçant le domaine des solutions admissibles. Le front de Pareto est un sous-ensemble de la frontière de ce domaine. Par exemple, la figure I.2 représente les solutions admissibles pour un problème de minimisation de deux objectifs. Dans ce cas, le front est une courbe définie par une fonction bornée, discontinue et convexe par morceaux.

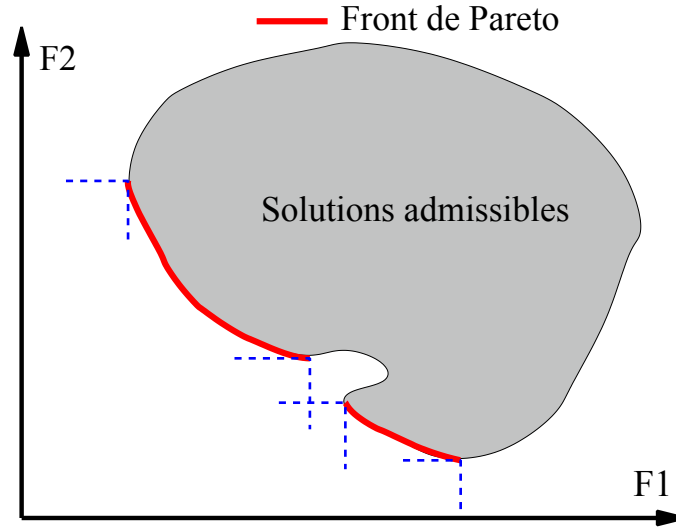


FIG. I.2 – Front de Pareto et relation de dominance.

Les extrémités d'un front continu sont obtenues en résolvant chacun des problèmes mono-objectifs de manière isolée. Ce sont donc les points intérieurs au front qui correspondent aux compromis intéressants au sens de Pareto. Un optimum équilibré du point de vue de Pareto se situera au centre du front, équidistant des bornes du front.

Ce front de Pareto est une bonne base de discussion permettant d'étudier plusieurs solutions concurrentes. Il est utile pour définir *a posteriori* un bon compromis (ou plusieurs) entre les fonctions objectives. Toutefois, l'obtention d'un tel ensemble de solutions optimales est beaucoup plus coûteux en évaluations de fonctions que la résolution d'un problème mono-objectif, d'autant plus coûteux que le nombre de fonctions est important. Il est très utilisé pendant la phase d'avant-projet, où les fonctions étudiées sont rapides à évaluer. Lorsque que le coût de calcul des fonctions est important, il faut se contenter de rechercher un point unique de ce front en effectuant *a priori* un compromis entre les objectifs [60, 87].

I.1.2 Optimisation multi-objectif par combinaison

De nombreux algorithmes d'optimisation ne traitent que les cas mono-objectifs. Un problème multi-objectif peut être reformulé en un problème mono-objectif en déterminant des coefficients d'équivalence k_i entre les objectifs F_i pour effectuer une combinaison linéaire (agrégation des objectifs).

$$F(\alpha) = \sum_i k_i F_i(\alpha). \quad (I.4)$$

Le vecteur \vec{k} peut être interprété comme la normale à un hyperplan dans l'espace des solutions admissibles \mathcal{F} de dimension n_F . Un hyperplan sépare le domaine R^{n_F} en deux parties. L'hyperplan H de normale \vec{k} et passant par $s_0 \in \mathcal{F}$ est support du domaine convexe \mathcal{F} si et seulement si tous les points du domaine \mathcal{F} sont contenus d'un seul côté de cet hyperplan :

$$H_{\vec{k}} \text{ support de } \mathcal{F} \text{ en } s_0 \in \mathcal{F} \Leftrightarrow \begin{cases} \forall s \in \mathcal{F}, \overrightarrow{(s - s_0)} \cdot \vec{k} \geq 0 \\ \text{ou} \\ \forall s \in \mathcal{F}, \overrightarrow{(s - s_0)} \cdot \vec{k} \leq 0 \end{cases}. \quad (I.5)$$

Le point s_0 fait forcément partie de la frontière du domaine \mathcal{F} . Les ouvrages de Boyd et Vandenberghe [13] ou de Hiriart-Urruty et Lemaréchal [46] décrivent plus exhaustivement ces notions d'optimisation convexe.

Il est possible qu'un minimum obtenu par résolution du problème multi-objectif par combinaison selon le vecteur \vec{k} appartienne au front de Pareto. Pour cela il faut qu'un hyperplan de normale \vec{k} support du domaine des solutions admissible \mathcal{F} existe. De plus, il faut que cet hyperplan soit support de \mathcal{F} en un point appartenant au front de Pareto. Finalement, l'optimum de Pareto correspondant au vecteur d'équivalence \vec{k} se trouve, lorsqu'il existe, à l'intersection entre le front et l'hyperplan support de normale \vec{k} . Par exemple, sur la figure I.3 les solutions s_1 , s_2 et s_3 appartiennent au front de Pareto. Pourtant, la solution s_2 ne pourra jamais être obtenue en résolvant le problème multi-objectif par combinaison.

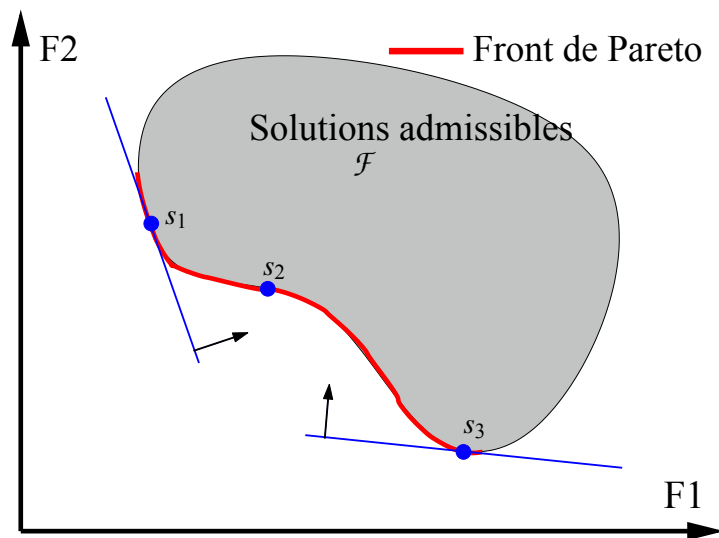


FIG. I.3 – Hyperplan support et front de Pareto.

La figure I.4 montre que l'augmentation du poids associé à la fonction objectif $F1$ se traduit par un optimum plus performant vis-à-vis de cette fonction $F1$ (et moins performant vis-à-vis de $F2$). Ce résultat se généralise à tout front de Pareto convexe : lorsque l'on augmente le poids associé à un des objectifs, l'optimum global sera plus performant vis-à-vis de cet objectif.

Lorsque le domaine des solutions admissibles est convexe, chaque optimum constituant le front de Pareto correspond à la solution d'un problème résolu par méthode de combinaison en utilisant un certain vecteur de coefficients d'équivalence. La réciproque n'étant pas vraie, le choix de ces coefficients n'est pas trivial [27,28] et des méthodes de détermination existent comme la programmation par objectif (« Goal Programming ») ou l'intersection de frontière selon la normale (« Normal Boundary Intersection ») [29].

I.1.2.1 Equivalence des objectifs par leur valeur absolue

Pour les fonctions physiques, il existe généralement des coefficients d'équivalence canoniques. Ainsi, lorsque la fonction objectif est la traînée totale d'une forme, les différentes composantes phénoménologiques de la traînée (frottement, pression) ont naturellement le même poids car la même unité physique. Or, ces coefficients d'équivalence physiques ne prennent en compte que la valeur absolue des objectifs et sont totalement indépendants du domaine d'étude \mathcal{D} . Cela correspond à une mise à l'échelle des objectifs par leur valeur absolue.

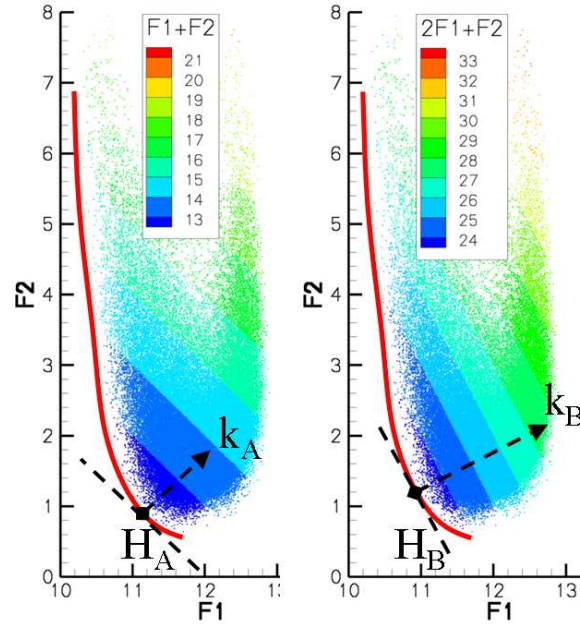


FIG. I.4 – Front de Pareto et coefficients d'équivalence. $\vec{k}_A = (1; 1)$ et $\vec{k}_B = (2; 1)$.

$$F(\alpha) = Cd(\alpha) = 1 \cdot Cd_f(\alpha) + 1 \cdot Cd_p(\alpha), \quad (I.6)$$

$$k_1 = k_2 = 1.$$

De la même manière, les problèmes aérodynamique-structure sont souvent résolus en utilisant des coefficients d'équivalence canoniques obtenus en multipliant la fonction objectif masse par la traînée initiale et la fonction objectif traînée par la masse initiale.

$$F(\alpha) = k_1 \cdot M(\alpha) + k_2 \cdot C_d(\alpha), \quad (I.7)$$

$$k_1 = 1, k_2 = \frac{M^{init}}{C_d^{init}}.$$

Le défaut de cette formulation est qu'elle conduit souvent à un optimum appartenant à une extrémité du front de Pareto. Le problème multi-objectif n'est donc pas équilibré au sens de Pareto. Une fonction objectif (ou plusieurs) dominent les autres. Ces fonctions dominées pourraient être complètement ignorées. Le problème ainsi simplifié serait équivalent, il aurait le même optimum global.

I.1.2.2 Equivalence des objectifs par leur variation admissible

La méthode décrite ici s'inspire de la méthode d'intersection de frontière selon la normale [29] qui permet de déterminer des coefficients d'équivalence correspondant à des optima équidistants sur le front de Pareto. Elle a pour objet de déterminer le plus simplement possible un compromis équilibré au sens de Pareto. Elle est issue des observations faites lors des différents cas d'application de cette thèse, notamment sur l'optimisation bi-objectif du chapitre III.

Si l'on cherche à obtenir un optimum équilibré entre les objectifs, on peut faire des suppositions sur la forme du domaine de Pareto pour essayer de déterminer *a priori* un compromis en son centre. Dans les cas abordés en ingénierie, où les variables sont bornées, le front de Pareto peut être considéré borné par les solutions aux problèmes mono-objectifs ; aucune fonction objectif ne tend vers l'infini. Supposons de plus que le front soit convexe et dérivable. Après avoir déterminée l'amélioration admissible grâce aux variations de formes autorisées par le domaine d'étude, $\Delta F_i(\mathcal{D})$, soit en considérant n_F optimisations mono-objectifs, soit en l'estimant, un ensemble de n_F points définissant un hyperplan $H_{\Delta F}$ est alors connu. Sur l'exemple bi-objectif de la figure I.5,

l'hyperplan $H_{\Delta F}$ est défini par le vecteur \vec{h} correspondant aux solutions aux problèmes mono-objectifs, $F_{k=(1,0)}^*$ et $F_{k=(0,1)}^*$ ¹.

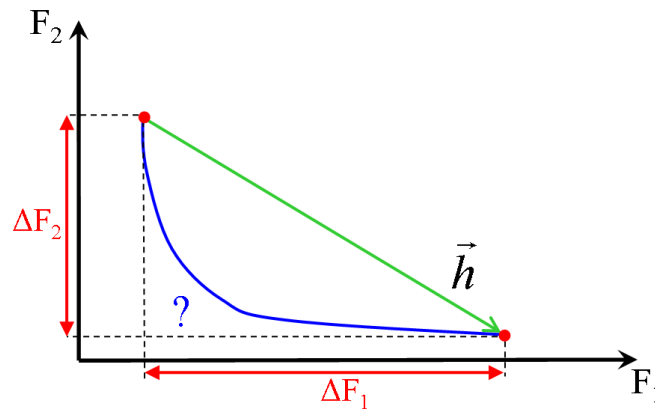


FIG. I.5 – Equivalence des objectifs par leur variation admissible.

D'après le théorème des accroissements finis, tout front de Pareto dérivable admettra au moins un point dont la tangente correspondra au vecteur \vec{h} . Comme le front est convexe, cela permet d'affirmer qu'il existe un hyperplan parallèle à $H_{\Delta F}$ qui est effectivement support du front de Pareto. Or, le vecteur \vec{k} ,

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta F_1(\mathcal{D})} \\ \frac{1}{\Delta F_2(\mathcal{D})} \end{pmatrix}, \quad (I.8)$$

est normal à cet hyperplan,

$$\vec{k} \cdot \vec{h} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta F_1(\mathcal{D})} \\ \frac{1}{\Delta F_2(\mathcal{D})} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta F_1(\mathcal{D}) \\ -\Delta F_2(\mathcal{D}) \end{pmatrix} = 0. \quad (I.9)$$

Finalement, la mise à l'échelle des objectifs par leur variation admissible correspond aux coefficients d'équivalence,

$$k_i = \frac{1}{\Delta F_i(\mathcal{D})}. \quad (I.10)$$

I.2 Choix d'un algorithme d'optimisation

L'algorithme d'optimisation converge, selon un processus itératif, vers une solution. Les processus d'optimisation réels (cf. Figure I.7) peuvent être représentés de manière simplifiée (cf. Figure I.6) en considérant deux éléments : l'optimiseur et l'évaluateur. A chaque itération, l'optimiseur propose un ou plusieurs vecteurs de variables de forme à évaluer qui forment une population de taille n_{pop} . L'évaluateur doit alors calculer les fonctions objectives ou contraintes et éventuellement leurs sensibilités par rapport aux variables (gradients).

Face à la diversité des problèmes pouvant être résolus par l'optimisation, de nombreuses méthodes existent. Malheureusement, aucune n'est capable de traiter efficacement tous les cas. En effet, Wolpert et Macready [121] ont démontré que si l'on considère l'ensemble de tous les problèmes d'optimisation possibles, alors aucun algorithme n'est meilleur qu'un autre (« no free lunch theorems for optimization »). Le choix d'un algorithme

1. La solution utopique du problème multi-objectif qui serait aussi optimale pour chacun des problèmes mono-objectifs est appelée point de Nadir.

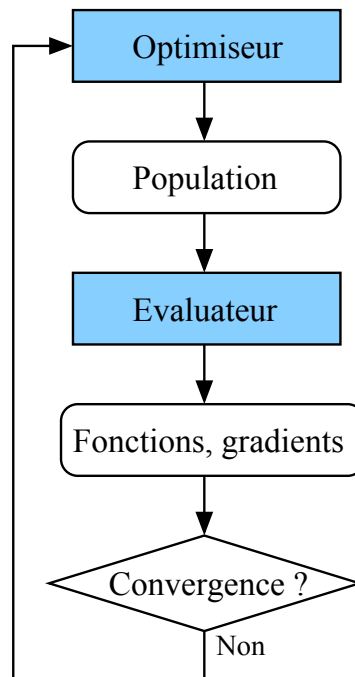


FIG. I.6 – Processus général d’optimisation.

ne peut donc pas se faire par comparaison sur des cas tests généraux, mais doit aussi étudier des problèmes représentatifs des applications envisagées.

Pour choisir la méthode la plus adaptée à un problème, les caractéristiques principales prises en compte sont :

- la capacité à traiter des problèmes mono- ou multi-objectifs,
- la capacité à éviter les minima locaux pour converger vers le minimum global,
- la rapidité de convergence, c’est-à-dire le nombre de vecteurs variables à évaluer pour converger (qui peut être rapporté à la dimension du domaine d’étude),
- la nécessité du calcul de gradients.

I.2.1 Problèmes abordés

En optimisation haute-f délicité, l’évaluation des fonctions et de leurs gradients est très coûteuse ; le temps de restitution nécessaire à une évaluation est de plusieurs heures de calcul sur supercalculateur. Pour l’industriel, le temps de restitution total de l’optimisation doit être de l’ordre d’une semaine. Ainsi, la première contrainte du processus d’optimisation est d’obtenir une solution en moins de 100 itérations au total.

Le nombre de fonctions étudiées est faible (un ou deux objectifs et quelques contraintes). Le chapitre III traite d’une optimisation multidisciplinaire de la position d’une installation motrice résolue par combinaison linéaire entre fonctions objectifs aérodynamique (traînée) et structure (masse). Les optimisations décrites au chapitre IV sont mono-objectifs, elles ne considèrent que la traînée aérodynamique.

Le nombre de variables est souvent important, de l’ordre d’une centaine $n_\alpha = O(100)$, mais les cas tests considérés ici en optimisation par surfaces de réponse ne dépasseront pas 48 variables.

Le facteur dominant dans la complexité des problèmes abordés est donc le nombre de variables. La rapidité de convergence de l’algorithme ne doit pas dépendre trop fortement de la dimension du problème.

I.2.2 Exploration, exploitation

Pour un algorithme d'optimisation, l'exploration est sa capacité à explorer le domaine des variables pour rechercher la meilleure vallée, c'est à dire celle qui contient l'optimum global. A l'inverse, l'exploitation est sa capacité à converger rapidement vers le minimum d'une vallée donnée à partir d'un vecteur variables initial.

Ces deux notions sont très souvent employées pour décrire les algorithmes d'optimisation. Toutefois, il n'y a pas de définition communément admise permettant de les mesurer. La comparaison d'algorithmes d'optimisation du chapitre IV sera effectuée grâce à quelques critères représentant ces deux notions. Ces critères sont définis en IV.1.1.

I.2.3 Robustesse d'un optimum

La robustesse d'un optimum est aussi une notion déterminante pour les concepteurs et qui ne doit pas être négligée lors du choix de l'algorithme d'optimisation. La forme à optimiser est modélisée de manière déterministe par un maillage ; cette forme est donc optimisée en négligeant les incertitudes liées par exemple aux procédés de fabrication ou aux simplifications du problème (le couplage aéroélastique fluide-structure). Pour diminuer la probabilité que les performances de la forme optimisée ne soient pas vérifiées en réalité, on peut éliminer les minima non-robustes. Un minimum robuste est peu sensible aux incertitudes ; il est situé au fond d'une vallée large, de faible courbure. Sur l'exemple de la figure I.1, le minimum α_2^* n'est pas robuste et, bien qu'il soit plus performant que α_3^* , on pourra privilégier ce dernier.

De la même manière, en aérodynamique, on recherche un optimum robuste vis-à-vis des conditions de vol (Mach, incidence) [45, 82, 91]. Cela amène à la conception multipoint : au lieu d'optimiser l'avion uniquement en condition de croisière, on va plutôt l'optimiser sur tout un domaine de vol.

Pour l'algorithme d'optimisation, cela signifie qu'il n'est pas toujours nécessaire de chercher à atteindre l'optimum global. Une exploration limitée peut permettre de filtrer les optima non robustes en ignorant les vallées trop escarpées. Finalement, il faut trouver un bon compromis entre exploration et exploitation.

I.2.4 Algorithmes d'optimisation globale

Les algorithmes d'optimisation globale recherchent l'optimum global. En théorie, cette recherche nécessite l'exploration complète du domaine des solutions admissibles. Elle est coûteuse en nombre d'évaluations de fonctions. En pratique, il est impossible de vérifier le caractère globale d'un minimum à moins d'admettre des hypothèses sur la régularité de la fonction objectif.

Le gros désavantage des méthodes globales est que leur coût augmente, dans le pire des cas, exponentiellement avec la complexité du problème (nombre de variables n_α et nombre de fonctions n_F) [13]. Bellman [10] a décrit ce concept en tant que malédiction dimensionnelle (« curse of dimensionality »).

La distribution de points selon une grille est une méthode d'optimisation à exploration seule. Bellman nous indique que si l'on veut trouver le minimum global d'une fonction de n_α variables avec une erreur relative sur les variables inférieure à ϵ , alors il faudra effectuer $n_{calc} = O((1/\epsilon)^{n_\alpha})$ évaluations. Par exemple, sur un problème de dimension $n_\alpha = 10$, si l'on veut localiser à 10% près les variables optimales, il faut $n_{calc} = \frac{1}{0.1}^{10}$ évaluations. Même pour une fonction évaluée en seulement une seconde, il faut plus de 10000 jours pour obtenir la solution.

Bien que la plupart des méthodes globales (algorithme génétique, recuit simulé, séparation et évaluation, etc.) utilisent des méthodes stochastiques pseudo-aléatoires pour l'exploration, comme la mutation des algorithmes génétiques, ce coût exponentiel est toujours latent [5, 33]. Ainsi, pour garantir la diversité de population d'un algorithme génétique, Goldberg [41] recommande une taille de population croissant exponentiellement avec la dimension.

$$n_{pop} = O(2^{n\alpha}) \quad (I.11)$$

Les optimiseurs globaux ne sont pas adaptés aux problèmes de grande complexité et aux problèmes où l'évaluation des fonctions est coûteuse. Lorsque la fonction est multimodale, ils permettent l'obtention de meilleures solutions que les méthodes locales sans garantie sur le caractère globale de la solution obtenue.

I.2.5 Algorithmes d'optimisation locale

Les optimiseurs les plus rapides partent d'une solution initiale et l'exploitent en déterminant un chemin de descente vers le minimum le plus proche. La solution obtenue dépend donc de la solution initiale. L'utilisation du gradient, une information vectorielle, améliore beaucoup la rapidité de convergence et est primordiale pour limiter la dépendance au nombre de variables. Cependant, les méthodes de descente basées sur le gradient ne traitent que les problèmes mono-objectifs.

La méthode de la plus forte pente (« steepest descent ») utilise directement l'opposé du gradient comme direction de descente. Cette méthode simple n'est toutefois pas la plus rapide.

La méthode de référence en terme de rapidité de convergence est la méthode de Newton-Raphson de recherche de gradients nuls. C'est aussi la moins robuste et elle nécessite le calcul de la matrice Hessienne H (formée des dérivées secondes). De plus, le calcul de cette matrice est délicat en pratique car les fonctions étudiées ne sont pas forcément C^2 et le calcul analytique de cette matrice est fastidieux et coûteux.

$$\left[\begin{array}{l} \textbf{Itération de la méthode de Newton-Raphson :} \\ 1. \text{ Calculer le vecteur de descente} \\ \quad H(\alpha_k) \cdot d_k = -\nabla F(\alpha_k) \\ 2. \text{ Mise à jour des variables} \\ \quad \alpha_{k+1} = \alpha_k + d_k \end{array} \right. \quad (I.12)$$

Afin d'améliorer la robustesse de la méthode de Newton, les algorithmes de type quasi-Newton construisent itérativement une approximation de la matrice Hessienne, en utilisant seulement l'évolution des gradients et en supposant que la fonction peut être approchée localement par un développement limité quadratique autour de l'optimum. La formulation itérative la plus courante est celle de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) [114].

$$\left[\begin{array}{l} \textbf{Itération d'une méthode de descente quasi-Newton :} \\ 1. \text{ Calculer une approximation de la hessienne } \hat{H}_k \text{ à partir de } \nabla F(\alpha_k) \text{ et } \nabla F(\alpha_{k-1}) \\ 2. \text{ Calculer la direction descente} \\ \quad \hat{H}_k(\alpha_k) \cdot d_k = -\nabla F(\alpha_k) \\ \quad \|d_k\| = 1 \\ 3. \text{ Recherche linéaire, déterminer } a_k > 0 \text{ en minimisant} \\ \quad \min_{a_k} (F(\alpha_k + a_k d_k)) \\ 4. \text{ Mise à jour des variables} \\ \quad \alpha_{k+1} = \alpha_k + a_k d_k \end{array} \right. \quad (I.13)$$

Lorsque la fonction étudiée est bruitée, ces méthodes locales peuvent présenter des problèmes de convergence.

Ces algorithmes par gradients sont les plus rencontrés en optimisation aérodynamique de formes pour la conception détaillée, mais les méthodes de région de confiance (« trust region ») [2] ou de programmation quadratique séquentielle (« Sequential Quadratic Programming ») [114] sont de plus en plus utilisées et d'efficacité semblable.

Jameson et Vassberg [52] ont montré et vérifié sur un problème analytique non linéaire que la convergence de l'algorithme de la plus forte pente dépend quadratiquement du nombre de variables,

$$n_{calc} = O(n_{\alpha}^2), \quad (\text{I.14})$$

alors que le nombre d'évaluations nécessaires pour la convergence d'un algorithme de type quasi-Newton évolue linéairement avec le nombre de variables,

$$n_{calc} = O(n_{\alpha}). \quad (\text{I.15})$$

I.2.6 Bilan comparatif entre algorithmes d'optimisation globale et locale

Les observations générales précédentes ont été confirmées sur des problèmes aérodynamiques, notamment par comparaison d'algorithmes [90, 119]. Le coût des algorithmes d'optimisation globale dépendant trop fortement de la complexité du problème, leur emploi est limité aux problèmes de faible complexité (faible nombre de variables et de fonctions) et pour lesquels les fonctions étudiées ne sont pas trop coûteuses [90]. Ces algorithmes sont adaptés à l'optimisation préliminaire de l'avion, car les fonctions étudiées sont rapides à évaluer et les paramètres définissant l'architecture globale de l'avion ne sont pas trop nombreux. De plus, cette phase de recherche du meilleur concept devant être exploratoire, les méthodes globales multi-objectifs sont particulièrement recommandées.

Les méthodes d'optimisation locale utilisant le gradient sont idéales pour obtenir le plus rapidement possible une solution à un problème mono-objectif dont le nombre de variables peut être important. Elles sont donc employées en conception détaillée.

D'autres classifications sont parfois utilisées pour différencier les algorithmes d'optimisation :

- stochastique/heuristique.

Les méthodes stochastiques sont celles qui font intervenir le pseudo-aléatoire. Par exemple, la procédure de mutation d'un algorithme génétique fait appel au pseudo-aléatoire. Ces méthodes sont généralement des méthodes globales.

- ordre 0/ordre 1/ordre 2.

Les méthodes d'ordre 0 utilisent l'information sur la fonction, celles d'ordre 1 requièrent aussi l'information du gradient et celles d'ordre 2 nécessitent en plus le calcul de la matrice Hessienne.

I.3 Présentation de la chaîne d'optimisation OPTaliA

La chaîne OPTaliA² [73, 82] d'optimisation automatique de formes aérodynamiques est utilisée pour la conception détaillée de l'avion à Airbus. C'est un outil d'optimisation haute-fidélité car aucun modèle réduit n'est employé entre le solveur aérodynamique et l'optimiseur. En conception détaillée, les paramètres de forme pilotant l'architecture globale de l'avion sont faibles et les déformations envisagées sont généralement de faibles amplitudes afin de limiter l'impact sur les autres disciplines. La forme issue de la phase de projet antérieure (conception avant-projet) permet d'initialiser l'optimisation locale.

I.3.1 Initialisation du problème et paramétrisation

La définition du problème d'optimisation dans OPTaliA est représentée par la phase « Init » sur la figure I.7. Elle consiste à définir le maillage de la forme initiale et une paramétrisation associée. La paramétrisation définissant les degrés de liberté autorisés sur la forme s'effectue grâce à des fonctions analytiques de Hicks-Henne [43], chacune définie par trois variables, l'amplitude A , la position p et l'expansion β (cf. Figure I.8) à

2. OPTaliA : OPTimisation en Aérodynamique

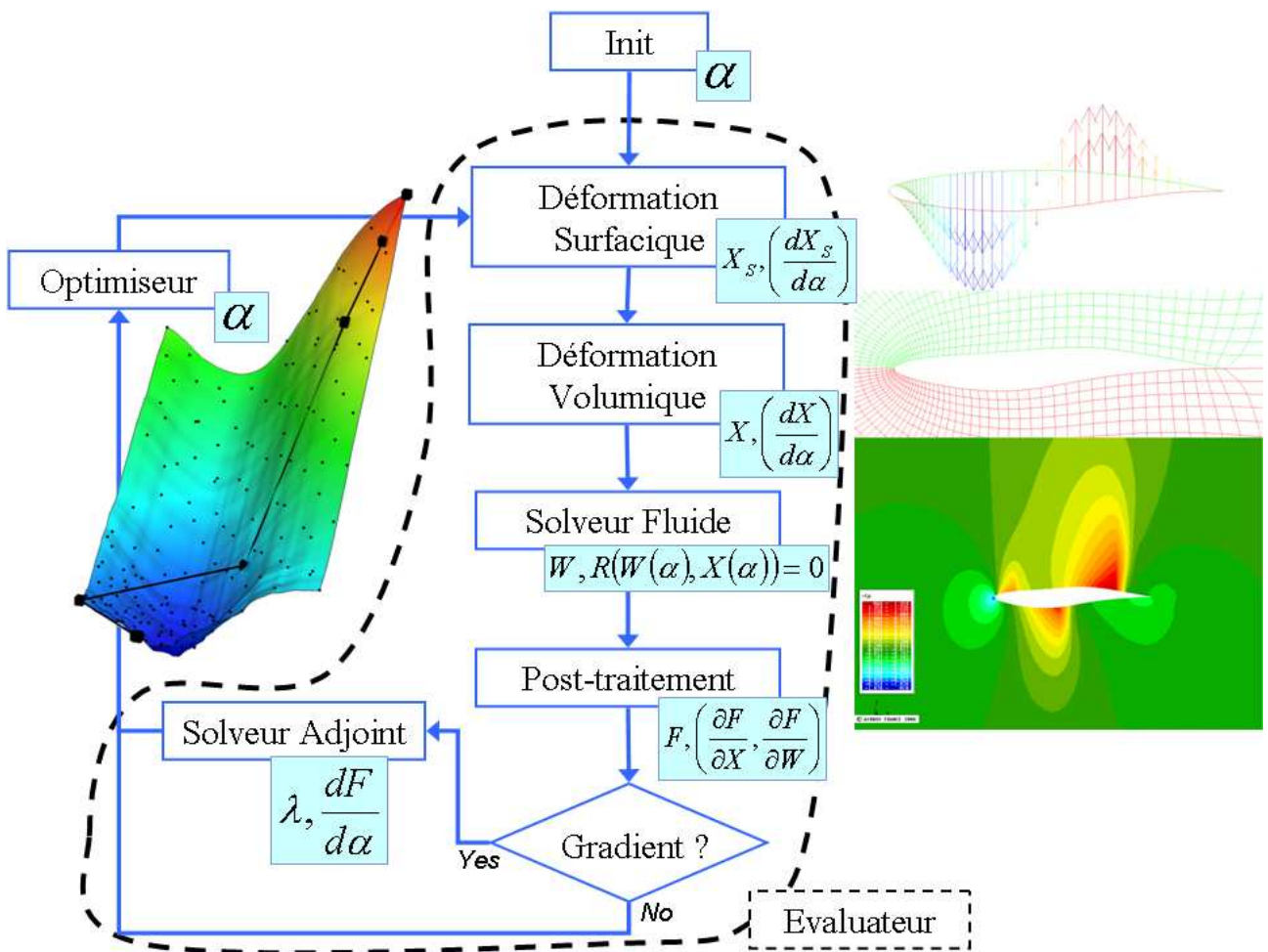


FIG. I.7 – Processus d’optimisation par méthode de gradient dans OPTaliA.

travers l'équation I.16. Le vecteur contenant ces variables de forme est noté α .

$$HH(x) = A \cdot \sin^\beta \left(\pi x \frac{\ln 0.5}{\ln p} \right),$$

avec $x \in [0; 1], A \in \mathfrak{R}, \beta \in [2; 10], p \in]0; 1[$. (I.16)

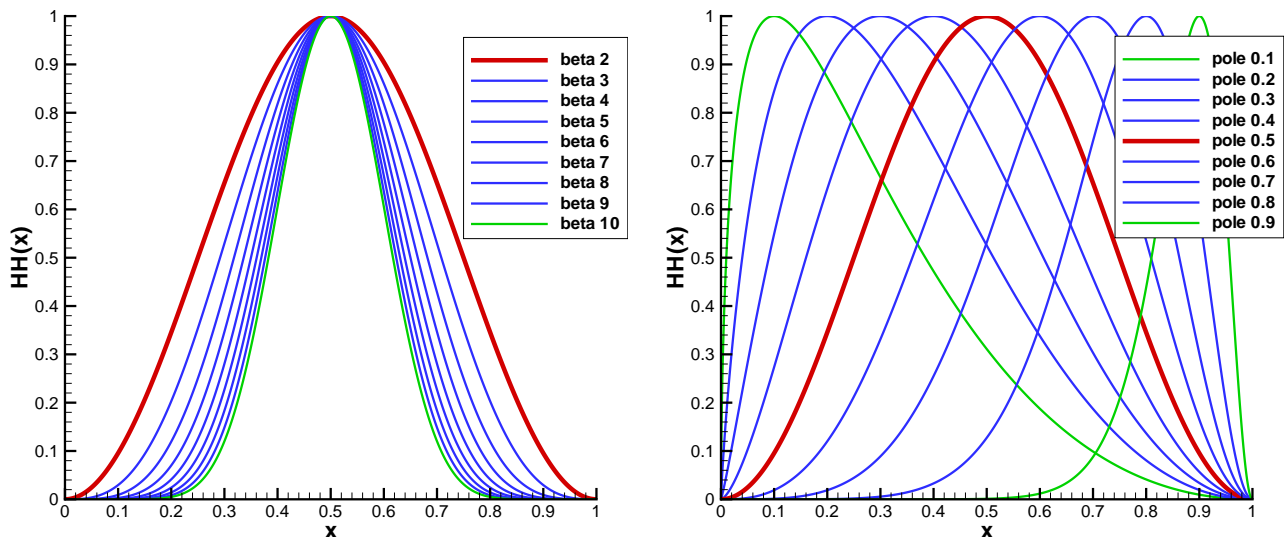


FIG. I.8 – Bosses de Hicks-Henne, influence des paramètres de forme β et p .

Ces déformations bidimensionnelles (cf. Figure I.9) sont appliquées à des lignes de maillage dans la direction définie soit par la normale courante, soit par l'axe vertical z . Dans les cas tridimensionnels (cf. Figure I.10), on utilise une spline cubique d'amplitude maximale pour la section pilote et nulle en deux sections limites définies par l'utilisateur pour étendre la déformation. L'extension selon cette troisième direction ne fait pas l'objet de variables de forme supplémentaires. Dans tous les cas, la déformation devient progressivement nulle lorsque l'on se rapproche d'une frontière topologique du domaine d'application.

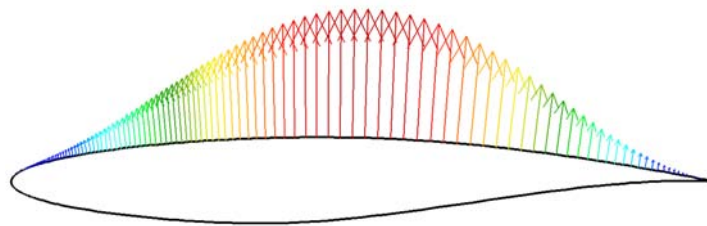


FIG. I.9 – Vecteurs de déformation de la peau d'un profil d'aile par application d'une bosse de Hicks-Henne bidimensionnelle.

D'autres techniques de paramétrisation de maillage existent comme la déformation libre (« free form deformation »), le déplacement direct de la position des nœuds de maillage surfacique, ou la méthode PARSEC. Les comparaisons de ces approches [64, 122] donnent l'avantage aux bosses de Hicks-Henne. En effet, elles ont été spécialement créées pour l'optimisation aérodynamique de sections d'ailes et nécessitent beaucoup moins de variables qu'une paramétrisation considérant directement les nœuds de maillage surfacique et permettent d'atteindre des formes complexes tout en garantissant une déformation lisse (tangente nulle en zéro et un, cf. Figure I.8).

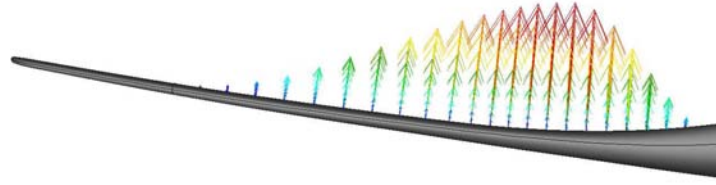


FIG. I.10 – Vecteurs de déformation de la peau d’une aile par application d’une bosse de Hicks-Henne tridimensionnelle.

I.3.2 Déformation de maillage

Les bosses ainsi définies permettent de calculer un champ de déformation surfacique des parois du maillage. Cette déformation surfacique est ensuite propagée au maillage volumique, noté X , en utilisant une méthode mixte entre intégrale et interpolation transférée [30, 82]. La méthode intégrale est la plus coûteuse en temps de calcul, mais c’est aussi celle qui conserve le mieux la qualité du maillage. Elle est utilisée pour déplacer les nœuds des frontières de chaque bloc. La méthode d’interpolation transférée est très rapide, mais nécessite la connaissance préalable des déplacements des frontières. Elle est utilisée pour déplacer les nœuds intérieurs aux blocs.

Par rapport à une stratégie de génération de maillage, la déformation de maillage a plusieurs avantages. Tout d’abord, il est possible de calculer la sensibilité du maillage par rapport aux variables de forme, $\frac{dX}{d\alpha}$, par une méthode analytique. De plus, le temps nécessaire à la déformation est inférieur au temps nécessaire à la génération d’un maillage (surtout en l’absence de mailleur automatique).

I.3.3 Simulation numérique

Une fois le maillage $X(\alpha)$ obtenu, l’écoulement du fluide autour de la nouvelle forme doit être simulé. Le code de calcul *elsA* [17] développé par l’ONERA résout les équations de Navier-Stokes moyennées (approche RANS) pour la simulation d’écoulements compressibles. Dans le cadre de notre travail, le modèle de turbulence choisi pour compléter le système est le modèle de Spalart-Allmaras à une équation. La discrétisation de ce système d’équations s’effectue par une formulation volume fini dans laquelle les inconnues sont affectées aux centres des cellules de discrétisation [47]. Le domaine de calcul est modélisé par un maillage, X , multidomaine structuré par bloc.

Pour la discrétisation spatiale, le schéma décentré de Roe est utilisé. Afin d’étendre à l’ordre 2 ce schéma, la méthode MUSCL et le limiteur dérivable de Van Albada utilisés pour extrapoler les flux de Roe. Le schéma de résolution numérique temporel est le schéma Euler rétrograde (implicite). Sa résolution est effectuée par la méthode LU-SSOR (« Lower Upper Symmetric Successive Over Relaxation »). Afin d’améliorer la vitesse de convergence, les techniques multigrille et de pas de temps local sont employées.

La résolution de ce système d’équations discrétisées donne le vecteur des variables conservatives

$$W(\alpha) = (\rho, \rho U_x, \rho U_y, \rho U_z, \rho E). \quad (I.17)$$

On note ce système discrétisé

$$R(W(\alpha), X(\alpha)) = 0. \quad (I.18)$$

I.3.4 Post-traitement et évaluation des fonctions (traînée, portance)

Le champ volumique de l’écoulement n’est pas directement exploitable par un optimiseur. Pour obtenir une fonction objectif $F(\alpha)$ scalaire, il faut utiliser des grandeurs intégrées grâce au module de post-traitement,

$$F(\alpha) = F(W(\alpha), X(\alpha)). \quad (I.19)$$

Le code *ffd41* [6, 15, 31] développé par l'ONERA emploie une approche champ-lointain pour calculer les coefficients aérodynamiques d'un avion : traînée induite Cd_i , traînée visqueuse Cd_{vp} , traînée de choc Cd_w , traînée de frottement Cd_f , traînée parasite Cd_{sp} , portance Cl et moments Cm . Le lien entre les valeurs de traînées en approche champ proche (NF) et champ lointain (FF) est,

$$Cd^{NF} = (Cd_p + Cd_f)^{NF} = (Cd_{vp} + Cd_w + Cd_i + Cd_{sp} + Cd_f)^{FF}, \quad (I.20)$$

d'où,

$$(Cd_p)^{NF} = (Cd_{vp} + Cd_w + Cd_i + Cd_{sp})^{FF}. \quad (I.21)$$

L'approche champ lointain par volume d'intégration, bien que plus complexe, a deux avantages par rapport à l'approche champ proche d'intégration à la peau :

- Elle est plus précise et moins sensible aux imprécisions numériques dues à un maillage trop grossier et à l'ajout de dissipation artificielle car elle isole leur influence par la détermination d'un terme de traînée parasite Cd_{sp} ,

$$\begin{aligned} Cd^{FF} &= Cd_{vp} + Cd_w + Cd_i + Cd_f \\ Cd^{NF} &= Cd^{FF} + Cd_{sp} \end{aligned} \quad (I.22)$$

- La décomposition de la traînée selon ses diverses sources physiques ainsi que l'identification spatiale des zones de création de traînée grâce aux volumes d'intégration permettent aux concepteurs de mieux comprendre le processus de création de traînée et ainsi d'améliorer les formes. Par exemple, l'évolution de la traînée de choc selon l'envergure est une information primordiale pour la conception d'une aile et l'intégration d'une installation motrice.

Ce code est aussi capable de calculer les sensibilités de la fonction objectif par rapport au maillage, $\frac{\partial F}{\partial X}$, et par rapport aux variables conservatives, $\frac{\partial F}{\partial W}$, nécessaires au calcul de gradient.

I.3.5 Evaluation du gradient

Plusieurs méthodes existent pour calculer le gradient, $\nabla F(\alpha)$.

I.3.5.1 Méthode des différences finies

La plus simple et la plus utilisée est la méthode des différences finies d'ordre un, estimant le gradient par les taux d'accroissement,

$$\frac{\partial F(\alpha)}{\partial \alpha_j} = \frac{F(\alpha + \delta \alpha_j) - F(\alpha)}{\delta \alpha_j}. \quad (I.23)$$

Cette méthode est extrêmement coûteuse puisqu'elle nécessite le calcul de $n_\alpha + 1$ écoulements. De plus, sa précision est fortement liée au choix du pas de différences finies $\delta \alpha_j$.

I.3.5.2 Méthode de l'état adjoint discret

Certaines méthodes analytiques permettent de calculer le gradient à un coût indépendant du nombre de variables. Ainsi, la méthode de différentiation automatique en mode inverse permet de calculer un gradient pour un coût maximal de cinq calculs de fonctions [88]. Toutefois, cette méthode est prohibitive d'un point de vue mémoire.

Dans *elsA*, une autre méthode dont le coût est indépendant du nombre de variables a été retenue : la méthode de l'état adjoint discret [39, 50]. Elle nécessite la résolution d'un système par fonctions étudiées, soit $n_F + n_G$ systèmes au total, impliquant la linéarisation du système discrétisé des équations de Navier-Stokes par rapport aux variables conservatives pour le calcul du terme $\frac{\partial R}{\partial W}$. Pour ce faire, il faut calculer le vecteur adjoint λ , solution du système linéaire

$$\lambda^t \frac{\partial R}{\partial W} = -\frac{\partial F}{\partial W} \text{ ou } \lambda^t = -\frac{\partial F}{\partial W} \left(\frac{\partial R}{\partial W} \right)^{-1}. \quad (I.24)$$

Comme $\forall \alpha, R(W, X) = 0$ (Equation I.18), il vient

$$\nabla R(W, X) = \frac{\partial R}{\partial W} \frac{dW}{d\alpha} + \frac{\partial R}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha} = 0. \quad (I.25)$$

Soit,

$$\frac{dW}{d\alpha} = - \left(\frac{\partial R}{\partial W} \right)^{-1} \frac{\partial R}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha}. \quad (I.26)$$

Or, le gradient recherché est

$$\nabla F(\alpha) = \frac{\partial F}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha} + \frac{\partial F}{\partial W} \frac{dW}{d\alpha}, \quad (I.27)$$

compte tenu de l'équation I.26,

$$\nabla F(\alpha) = \frac{\partial F}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha} - \frac{\partial F}{\partial W} \left(\frac{\partial R}{\partial W} \right)^{-1} \frac{\partial R}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha}. \quad (I.28)$$

Finalement, le gradient calculé par la méthode de l'état adjoint est

$$\nabla F(\alpha) = \frac{\partial F}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha} + \lambda^t \left(\frac{\partial R}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha} \right). \quad (I.29)$$

Le calcul de gradient par la méthode de l'adjoint discret fait intervenir un calcul de sensibilité par différences finies pour le terme $\left(\frac{\partial R}{\partial X} \frac{dX}{d\alpha} \right)$. Pour la linéarisation du flux visqueux, on utilise une approche « couche mince » pour négliger les termes de dérivation croisée et une approximation dite de « μ_t f gé », considérant les inconnues déterminées par le modèle de turbulence indépendantes des variations de forme [96]. La précision du calcul de gradient par ce solveur adjoint a été établie [8, 82, 87, 95] par des comparaisons entre gradients calculés par trois méthodes différentes (état adjoint, différences finies et équation linéarisée) sur différents cas de validations (2D, 3D, non-visqueux et visqueux). Il s'avère que sur les cas les plus complexes (écoulements visqueux transsoniques), l'erreur est de l'ordre de quelques pourcents. Le système adjoint est résolu en utilisant la même méthode de résolution que le système direct, à l'exception des techniques d'accélération de convergence. Si l'on néglige le temps de calcul nécessaire aux calculs des sensibilités $\frac{\partial F}{\partial X}$ et $\frac{\partial F}{\partial W}$, le temps de calcul nécessaire à la résolution de l'équation adjointe (Equation I.24) par la méthode *LUSSOR* est environ identique au temps de calcul d'un écoulement seul (Equation I.18), car le schéma implicite de résolution des équations *RANS* implique le calcul de la sensibilité $\frac{\partial R}{\partial W}$.

I.3.6 Quelques chiffres

Concrètement, les maillages aujourd'hui utilisés en production sont constitués de plusieurs dizaines de millions de points répartis en plusieurs centaines de blocs. Dans le cadre de cette thèse, la géométrie la plus complexe traitée (cf. chapitre IV) est un maillage à sept millions de nœuds ($n_X = 7 \times 10^6$) d'une configuration fuselage aile installation motrice nécessitant six heures de calcul sur huit processeurs AMD Opteron 275 cadencés à 2.2 Ghz pour effectuer 800 itérations.

Afin d'éviter les possibles phénomènes d'hystérésis, aucune reprise n'est effectuée pour initialiser le calcul de l'écoulement sur la forme courante (α_k) par l'écoulement simulé sur la forme précédente (α_{k-1}). Comme le temps de calcul nécessaire à l'algorithme d'optimisation est négligé, la durée du processus d'optimisation dépend linéairement du temps nécessaire à une unique simulation numérique.

Avec l'augmentation de la taille des maillages utilisés en production, la sensibilité du maillage par rapport aux paramètres de formes, $\frac{dX}{d\alpha}$, est devenue une limitation du processus d'optimisation par gradient. En effet, la mémoire nécessaire pour stocker ce terme sur l'intégralité du maillage est équivalente à autant de maillages que de variables de forme ($n_X \times n_\alpha$). Pour un maillage à $n_X = 100 \times 10^6$ nœuds occupant environ deux giga-octets de mémoire, le terme de sensibilité par rapport à cent variables de forme requiert environ deux cents giga-octets de mémoire. Même si ce terme n'existe en réalité que pour une liste de blocs impactés par les variations de forme, il nécessite un espace de stockage important dès lors que la géométrie étudiée est tridimensionnelle et le nombre de variables de forme important.

I.3.7 Algorithme d'optimisation

Historiquement, les premières optimisations numériques par Hicks *et al.* [44, 45] employèrent l'algorithme de descente par gradient *CONMIN* [115] et ce type d'algorithme est toujours largement employé dans la communauté scientifique [19, 39, 53, 66, 82, 84, 85]. La librairie d'optimisation utilisée dans OPTaliA est *DOT* [114], une évolution de la librairie *CONMIN*. Ces algorithmes d'optimisation locale sont toujours appréciés car ils convergent très rapidement. Ils sont très efficaces en terme d'exploitation, au détriment de leur capacité d'exploration. Ils nécessitent peu d'évaluations de la fonction ce qui permet de limiter la durée de l'optimisation. Bien que depuis les premières optimisations de formes aérodynamiques la puissance des ordinateurs a considérablement augmenté, le temps de calcul est toujours la principale limitation de l'optimisation.

En aérodynamique, la précision de la modélisation simulant l'écoulement évolue avec les capacités de calculs [58]. Le temps de restitution d'une simulation numérique reste grand en dépit de l'augmentation des performances informatiques. Ainsi, les simulations numériques d'écoulements potentiels utilisées en conception détaillée dans les années 80 furent remplacées progressivement par des simulations d'écoulements modélisés par les équations d'Euler puis par l'approche *RANS*. Et, on peut imaginer que dans quelques (dizaines ?) années, la simulation de tourbillons détachés (« Detached Eddy Simulation ») ou la simulation aux grandes échelles (« Large Eddy Simulation ») sera employée en production par les industriels. De la même manière, la géométrie est de plus en plus fidèle à la réalité grâce à l'augmentation du nombre de nœuds de maillage.

La pratique montre que les problèmes usuels en aérodynamique présentent de nombreux optima locaux auxquels les algorithmes d'optimisation locale ne peuvent pas échapper. En effet, la position et l'intensité du choc présent sur l'extrados d'une voilure en régime d'écoulement transsonique varient fortement avec les modifications de forme de l'extrados, même lorsqu'elles sont de faible amplitude. Dans ces conditions, la qualité de la solution obtenue par une optimisation locale dépend de la forme initiale choisie.

I.3.8 Gestion du processus d'optimisation

L'optimisation est un processus automatique ; il faut donc que chaque élément ou module impliqué soit suffisamment robuste pour être exécuté sans intervention de l'utilisateur (mode « batch »). Le logiciel OPTaliA se charge de gérer l'exécution successive de chacun des modules et l'échange de données entre ces modules. Sur la figure I.7, les données de sortie de chacun des modules sont représentées.

I.4 Intérêt des surfaces de réponse

Vis-à-vis de l'optimiseur, il apparaît sur la figure I.7 un élément virtuel, l'évaluateur, qui regroupe les éléments entourés en pointillé. Cet élément est en réalité un processus en lui-même chargé d'évaluer la fonction objectif en une entrée donnée en exécutant notamment le solveur haute-fidélité *elsA*. Comme signifié en section I.3.6, le coût d'un tel évaluateur limite les optimisations envisageables (cf. I.3.7 et I.2). Ainsi, les surfaces de réponse sont employées en optimisation pour substituer à cet évaluateur un modèle approché peu coûteux à évaluer. En effet, la surface de réponse prédit une fonction $F(\alpha)$ sur tout le domaine d'étude à partir d'une base de données d'échantillons de simulations numériques.

Les surfaces de réponse sont aussi appelées métamodèles lorsque la fonction modélisée est elle-même issue d'un autre modèle. On distinguera dans cette thèse les surfaces de réponse locales dont le domaine de validité est limité à un voisinage des points de construction et les surfaces de réponse globales dont le domaine de validité est confondu avec le domaine d'étude.

L'implémentation de surfaces de réponse dans la chaîne d'optimisation par gradients OPTaliA peut d'une part, améliorer sa capacité d'exploration et donc mener à des optima plus performants et d'autre part, rendre le processus d'optimisation plus flexible afin de pouvoir facilement piloter des processus multidisciplinaires.

I.4.1 Surfaces de réponse globales

Les surfaces de réponse globales sont considérées fiables sur tout le domaine d'étude et peuvent donc se substituer à l'évaluateur.

Pour ce faire, leur construction doit être particulièrement soignée afin d'éviter les incohérences entre le métamodèle et la simulation numérique. Ainsi, leur construction est généralement complétée par :

- une analyse de sensibilité des variables afin d'éliminer les variables qui ont peu d'influence sur l'objectif (analyse de la variance),
- une réduction des bornes du domaine d'étude éliminant les zones où la fonction ne présente pas d'intérêt,
- une validation utilisant quelques simulations numériques additionnelles pour comparaison avec le métamodèle.

Comme les surfaces de réponse sont rapides à évaluer, le choix d'un algorithme d'optimisation pour trouver leur minimum n'est pas soumis aux mêmes restrictions que lorsque l'évaluateur est le solveur haute-fidélité. Il est alors possible d'utiliser des algorithmes d'optimisation globale pour trouver l'optimum prédit par la surface de réponse [21, 24, 48, 54, 97, 112]. En outre, Wilson *et al.* [120] ont montré que la recherche d'un front de Pareto sur des surfaces de réponse représentant un problème multi-objectif est pertinente et peut donc permettre d'identifier quelques compromis intéressants à analyser en détail par des optimisations par coefficients d'équivalence.

La surface de réponse globale est un évaluateur « boîte noire » beaucoup plus flexible que les codes de simulation numérique. Issue d'une formulation analytique, elle peut être stockée facilement et peut donc être utilisée comme interface de données entre disciplines. Dans le cadre d'optimisations multidisciplinaires, les surfaces de réponse évitent le couplage de codes hétéroclites et permettent de réutiliser les mêmes outils que lors d'optimisations monodisciplinaires. Elles facilitent donc la mise en place de processus de conception concurrente [11, 69, 110, 123] tel que celui étudié au chapitre III. Sellar, Batill et Renaud [101] ont ainsi comparé la solution issue d'un processus d'optimisation par sous-domaine (méthode « Concurrent Sub Space Optimization ») utilisant un couplage par surfaces de réponse à la solution issue du processus d'optimisation complet (méthode « Fully Integrated Optimization ») et mis en avant l'économie en coût de calcul réalisée.

I.4.2 Surfaces de réponse locales

Les surfaces de réponse locales sont considérées fiables seulement au voisinage des échantillons. Moins précises, elles sont aussi plus faciles à construire car elles requièrent moins d'échantillons que les surfaces de réponse globales et moins de validation.

Au lieu de remplacer complètement l'évaluateur par une surface de réponse globale, le couplage (ou hybridation) entre une surface de réponse locale et un optimiseur permet d'améliorer ses performances. Par exemple, au lieu de toujours initialiser les optimisations locales par une déformation nulle, les tendances observées sur la surface de réponse locale peuvent guider vers une initialisation plus proche de l'optimum global [12] et donc améliorer l'exploration. Jin [56] et Ong, Nair et Keane [89] ont décrit différentes stratégies d'hybridation permettant d'améliorer la vitesse de convergence d'un algorithme génétique. L'une d'elles consiste à évaluer la plupart des générations sur surface de réponse et à n'utiliser l'évaluateur précis que lorsqu'une condition est vérifiée (par exemple toutes les 50 générations).

Les surfaces de réponse locales peuvent aussi être utilisées directement en tant qu'optimiseur. En effet, lorsque le minimum du métamodèle n'est pas situé sur un échantillon, il peut être proposé par l'optimiseur comme nouvel individu à évaluer par le code haute fidélité. Les performances des processus d'optimisation par surfaces de réponse de Booker *et al.* [12, 111] (« Surrogate Management Framework »), de Jones, Schonlau et Welch [59] (« SuperEGO ») et Cox et John [25] (« Sequential Design for Optimization »), ont permis de démontrer qu'une alternative aux algorithmes quasi-Newton jusqu'alors majoritairement utilisés pour la conception aérodynamique était possible. L'optimisation numérique de formes aérodynamiques par surfaces de réponse est aujourd'hui largement répandue dans la communauté scientifique [7, 54, 62, 92, 97, 100, 116], principalement en considérant des problèmes à faible nombre de paramètres (quelques dizaines au maximum). Le chapitre IV

décrit un tel optimiseur dont l'une des originalités est l'utilisation de surfaces de réponse interpolant le gradient en plus de la fonction.

I.5 Bilan

Ce chapitre a permis d'aborder les notions d'optimisation utilisées dans la suite de ce texte, ainsi que les spécificités de la chaîne d'optimisation aérodynamique d'Airbus, OPTaliA. L'introduction de surfaces de réponse dans cet outil vise à :

- définir un algorithme d'optimisation à coût comparable à l'algorithme par gradient de référence, mais plus performant en terme d'exploration,
- permettre la résolution de problèmes multidisciplinaires en effectuant un couplage par surfaces de réponse.

En premier lieu, il convient de bien maîtriser les aspects relatifs à la construction de ces surfaces. Le chapitre II décrit les choix retenus pour le processus de construction de métamodèles.

Construction efficace de surfaces de réponse par Krigeage et Cokrigeage

Nomenclature

cf. II.2.Article

II.1 Introduction

Les problèmes envisagés en optimisation aérodynamique de formes sont souvent limités par le coût de calcul nécessaire à l'évaluation de la fonction objectif (cf. I.2). L'emploi de surfaces de réponse, rapides à évaluer, pour approcher cet objectif sur tout le domaine d'étude des variables est un moyen d'améliorer l'efficacité d'un outil d'optimisation (cf. I.4).

L'approximation d'une fonction s'effectue en trois étapes :

- La fonction étudiée étant définie sur un domaine borné \mathcal{D} , la première étape consiste à distribuer un nombre n_s de points, ou échantillons, dans ce domaine.
- La fonction doit ensuite être évaluée en ces points.
- Une fois cette base de données d'échantillons disponible, il est alors possible d'utiliser une méthode d'approximation pour modéliser la fonction sur tout l'espace.

Les techniques de modélisation de fonctions les plus courantes ont été comparées par Jin, Chen et Simpson [55] sur treize cas tests analytiques et un cas de conception automobile par simulation numérique. Ces fonctions tests représentent différents niveaux de complexité en terme d'ordre de non linéarité et de nombre de variables (1 à 16). Elles ont été modélisées à partir de distributions d'échantillons de tailles variables, cette taille dépendant linéairement ou quadratiquement de la dimension du problème. Il s'avère que le Krigeage [99] et le réseau de neurones à fonctions radiales de base [9] sont les méthodes les plus précises. Ce résultat a été confirmé par d'autres études comparatives [103, 104] et étendu à des cas tests considérant jusqu'à 101 variables [117]. En outre, Peter *et al.* [94] ont effectué une comparaison de méthodes d'approximation sur un cas à deux variables issu d'un problème de conception aérodynamique d'aube de turbine par simulation numérique. Au lieu d'étudier seulement la précision globale des différents modèles, la capacité à détecter avec précision le minimum de la fonction (précision locale) y est aussi prise en compte. Là aussi, le Krigeage est la méthode la plus performante.

Ainsi, bien que le Krigeage soit une méthode difficile à mettre en œuvre comparée au réseau de neurones ou à la régression polynômiale [117], elle permet de prédire précisément des fonctions issues de simulations numériques présentant de fortes non linéarités. De plus, cette méthode reste valide quel que soit le nombre

d'échantillons, contrairement à un modèle polynômial d'ordre deux qui nécessite un nombre minimal d'échantillons croissant quadratiquement avec la dimension du domaine d'étude, $n_s \geq \frac{(n_{dv}+2)(n_{dv}+1)}{2}$. Enfin, comme le Krigeage est issu d'une formulation statistique, il a l'avantage d'accompagner la prédiction de la fonction d'une prédiction d'erreur. Pour ces raisons, le Krigeage est la méthode d'approximation retenue dans cette thèse.

Avant d'utiliser le Krigeage en tant que boîte noire au sein d'un processus d'optimisation, il convient de bien connaître son comportement. Les deux points clés à approfondir pour construire une approximation robuste et précise sont :

- Les méthodes d'échantillonnage (« sampling methods »). La base d'échantillons étant le seul lien entre la fonction réelle et l'approximation, elle doit concentrer autant d'information que possible.
- Le réglage du modèle, souvent effectué par optimisation numérique comme lors de la phase d'apprentissage des réseaux de neurones, des moindres carrés des régressions polynômiales, ou de la maximisation de vraisemblance du Krigeage.

II.2 Article « Building Efficient Response Surfaces of Aerodynamic Functions with Kriging and Cokriging »

L'article suivant décrit la formulation et la méthode de construction mises en œuvre dans le code de Krigeage utilisé pour les applications décrites dans cette thèse. Il a été publié dans l'AIAA Journal (volume 46, numéro 2, pages 498-507) en février 2008. Il permet d'établir les limitations associées à cette formulation afin de cibler correctement les emplois possibles du Krigeage en optimisation. A partir d'un cas test aérodynamique représentatif des fonctions étudiées en optimisation de formes aérodynamiques (II.Article.III), cet article étudie l'influence des méthodes d'échantillonnage sur la précision globale du Krigeage pour déterminer si une méthode, plus efficace que les autres, est à privilégier (II.Article.IV).

L'utilisation de surfaces de réponse interpolant le gradient de la fonction en plus de la valeur de la fonction aux échantillons est un moyen d'éviter la malédiction dimensionnelle décrite en I.2.4. Afin d'interpoler ce gradient, une formulation de type Cokrigeage [23, 76], basée sur les travaux de Morris, Mitchell et Ylvisaker [86], est décrite (II.Article.II.D). La dernière partie (II.Article.V) traite de l'influence de la dimension du domaine d'étude sur la précision globale du Krigeage et du Cokrigeage à partir du cas test précédent.

Building Efficient Response Surfaces of Aerodynamic Functions with Kriging and Cokriging

J. Laurenceau *

CERFACS, Toulouse, 31057, France

P. Sagaut †

F-75252 Paris cedex 5, France

Preprint published February 2008,

doi: 10.2514/1.32308,

AIAA Journal,

vol.46, no.2, pp. 498-507.

In this paper, we compare the global accuracy of different strategies to build response surfaces by varying sampling methods and modeling techniques. The final application of the response surfaces being aerodynamic shape optimization, the test cases are issued from CFD simulations of aerodynamic coefficients. For comparisons, a robust strategy for model fit using a new efficient initialization technique followed by a gradient optimization was applied. Firstly, a study of different sampling methods proves that including 'a posteriori' information on the function to sample distribution can improve accuracy over classical space filling methods like Latin Hypercube Sampling. Secondly, comparing Kriging and gradient enhanced Kriging on two to six dimensional test cases shows that interpolating gradient vectors drastically improves response surface accuracy. Although direct and indirect Cokriging have equivalent formulations, the indirect Cokriging outperforms the direct approach. The slow linear phase of error convergence when increasing sample

size is not avoided by Cokriging. Thus, the number of samples needed to have a globally accurate surface stays generally out of reach for problems considering more than four design variables.

Nomenclature

$CV(x)$	Leave one out cross validation error
\mathcal{D}	Domain of design variables
$dKdS(x)$	Leave one out sensitivity error
$f(x)$	Regression vector $[n_p]$
F	Regression matrix $[N \times n_p]$
L	Model likelihood estimate
N	Order of the correlation matrix
n_{dv}	Number of design variables
n_p	Dimension of regression vectors
n_s	Number of samples
p	SCF power coefficients $[n_{dv}]$
R	Correlation matrix $[N \times N]$
$r(x)$	Correlation vector $[N]$
\mathcal{S}	Domain of sample points
$SCF(.,.)$	Spatial correlation function
$S(x)$	Standard error
s^i	i-th sample
x	Vector of design variables $[n_{dv}]$
$Y_{exa}(x)$	Exact function to approximate
Y_s	Exact function at samples $[N]$
$Y(x)$	Surrogate function
$Z(x)$	Gaussian process
β	Regression coefficients $[n_p]$
σ^2	Model variance
θ	SCF correlation coefficients $[n_{dv}]$

Subscripts

k	$\in [1, n_{dv}]$
l	$\in [1, n_{dv}]$
m	$\in [1, n_{dv}]$

Superscripts

i	$\in [1, n_s]$
$-i$	i-th sample left out for model build
j	$\in [1, n_s]$

I. Introduction

NUMERICAL shape optimization in the field of delta-tailed aircraft design is more and more used since high performance computers enable RANS flow simulation around complete aircraft in a short time scale. Before building a complex optimization process around a CFD suite considering a lot of design variables, some time must be spent to identify an efficient optimizer.

*Ph.D. Student, CFD, 42 Avenue Coriolis.

†Professor, Institut Jean Le Rond d'Alembert, Universit  Pierre et Marie Curie, 4 place Jussieu.

When dealing with computer expensive simulation, the main requirement is to converge to an optimal shape in as few simulations as possible excluding most of the global optimizers such as Genetic Algorithm or Simulated Annealing that are generally applied to conceptual or preliminary design. Assuming that the sensitivity of the functions with respect to the design variables is available at a comparative computational cost of a direct function evaluation (with an adjoint method), the quickest process is then gradient based. Using this strategy, the high-fidelity aerodynamic shape optimization suite *OPTaliA* of *Airbus* showed good results.¹ Despite their efficiency, gradient algorithms suffer from some limitations. They solve only single objective problems (multiple objective functions must be combined) and are easily blocked by local optima whereas aerodynamic functions are generally multimodal. Moreover, heavily constrained problems are hard to solve efficiently.

Promising alternative approaches use response surfaces (or surrogate models) to approximate the expensive computer code on the whole domain by inexpensive models. Numerous strategies exist² and have been applied to perform aerodynamic shape optimization.³⁻⁵ Firstly, response surfaces can lead the optimization process. The surrogate management framework⁶ and trust-region framework⁷ are generally the most favored methods, but refining the response surface at its predicted optimum is also efficient particularly when taking into account uncertainty (Expected Improvement or Lower Confidence Bounding Function criteria).^{4,5,8-10} Response surfaces can be reliable discipline independent models applied to solve Multi-Disciplinary Optimization (MDO) problems when no code coupling is possible.² When the model is sufficiently accurate, the predicted optimum on the response surface can be taken as the true optimum.^{11,12} Secondly, the convergence of existing optimizers can be improved by switching between optimization on expensive model and on response surface (variable fidelity).³ Thirdly, the exploration capabilities of local optimizers can be improved by using the optimum found on the response surface as initialization. Accordingly to these different applications, two concepts of response surfaces are defined. The global response surface is considered an accurate surrogate model of the true function on the whole domain, whereas the local response surface is reliable only near sampled locations but gives information on the overall tendencies.

In this study we wanted to define how to build accurate response surfaces and assess their domain of validity before any applications to shape optimization. Kriging model was chosen to approximate the objective function for its accuracy and robustness

with small datasets.¹³ An efficient methodology is detailed within this article including numerical issues and a new technique to fit the model (section II).

The sampling quality being essential to obtain an accurate model,¹⁴ section IV compares different distribution methods. For a given domain of study, classical sampling are space filling and locations are computed without knowing the function 'a priori'. Beside other modeling techniques, the uncertainty predictions available with Kriging are very useful. Thus, methods of 'a posteriori' sequential sampling based not solely on information on the domain but also on information on the function through predicted errors are also described. In addition to the standard error of Kriging and leave-one-out cross validation errors, two new predicted error criteria are introduced (section II-B-2) and tested (section IV-B). Methods are compared by varying sample size for the reconstruction of a bidimensional aerodynamic test function. 'A posteriori' samplings were already applied to polynomial test cases^{10,15} without in-depth comparison with classical methods. As 'a posteriori' samplings are tuned to the function studied, their performance is closely related to the test case. That is why it was necessary to perform the comparison directly on an aerodynamic function. More than a sampling criterion, these predicted error are very important when using the surrogate model as optimizer in order to have a balancing between exploration of unknown locations and exploration of predicted optima on the model.

As a very powerful gradient computation method was available (adjoint state solver^{1,16,17}), it was also interesting to evaluate Cokriging (gradient enhanced) model. General comparison between Kriging and Cokriging existed only on analytic functions.^{18,19} In the fields of aerodynamic, it was proven that refining iteratively at the predicted minimum of a Cokriging response surface improved the shape of a supersonic business jet depending on up to 15 design variables,^{20,21} but the gradient information was issued from finite differences analysis and no comparison with optimization on a Kriging-based response surface was made. A graphical validation of Cokriging versus Kriging was made on the same aerodynamic test case but considering only two design variables and small datasets.²¹ The benefits of Cokriging on global response surfaces accuracy cannot be assessed by only varying the sample size as the information added to the model through gradients is dimensional. Section V compares Cokriging and Kriging accuracy on an aerodynamic test case, the number of design variables increasing from two to six. A total of 5800 CFD computations were necessary to build reference surfaces.

II. Kriging and Cokriging for Computer Experiments

A. Sampling

A surrogate model only needs a sample distribution to approximate a function, thus it must concentrate as much information as possible. In this way, the sampling must be adapted to : known specificities of the function, modeling formulation and the final application of the surrogate. Without information on the function, design optimal distribution methods using for example entropy criterion²² (or DET-MAX) give space filling locations. Numerous methods exist to evenly distribute samples.

1. 'A priori' Sampling Methods

Four 'a priori' methods requiring only information on the domain and assuming that the function is unknown a priori were used: grid, Halton, Sobol and Latin Hypercube (LHS) sampling (source code of J. Burkardt <http://www.scs.fsu.edu/~burkardt/>).

The grid distribution is the most common in engineering and was thus included in the benchmark. However, it should be used with great cares as truncated grids are to be avoided and grids in high dimension require unreachable sample sizes. The LHS method is also well known. It roughly corresponds to random sampling with guaranteed space filling properties even for small sampling size. Among the four methods presented here only LHS is applicable to high dimensions.

Quasi-random sequences enable methods such as generalized Halton or Sobol²³ to give ordered space filling sampling. These methods are very efficient on low-dimensionnal problems but unapplicable to dimensions higher than 10 without special care. Halton and Sobol are sequential methods. A distribution of $n_s + 1$ samples inherits from the previously computed n_s samples. Latin Hypercube and grid sampling are not sequential methods.

2. 'A posteriori' Sequential Sampling Methods

Maximum error sequential sampling includes information on the true function in sample distribution, explaining the denomination of 'a posteriori' sampling.

It consists in iteratively refining the sample datasets where the model exhibits its maximum of error. By construction it ensures inheritance of samples. Its main drawback is that all intermediate models must be computed. To compute a sampling of a given size the CFD simulations must be launched one at a time, whereas with 'a priori' methods the n_s computations can be launched in parallel. The only requirement is the availability of

an error criterion null at already sampled locations. 'A posteriori' samplings are tuned to the function studied.

B. Kriging

The French mathematician Georges Matheron developed in the early sixties the theory of Kriging from the seminal work of D.G. Krige on mining data. In the field of computer experiments, the Kriging method refers to the DACE formulation²² (fitted by optimization of the likelihood estimate instead of using covariogram) described in the late eighties.

1. Function Prediction

Kriging method is a statistical prediction of a function at untried inputs. It requires fitting the correlation parameters of the model to each sample distribution by solving an optimization problem.

Since computer codes are deterministic, and therefore not subject to measurement error, the usual measures of uncertainty derived from least-square residuals have no obvious meaning. Consequently, statisticians have suggested approximating responses as a combination of a polynomial regression plus localized deviations interpolating samples

$$Y(x) = f^t(x)\beta + Z(x) \approx Y_{exa}(x) \quad (1)$$

$f^t(x)\beta$ is a low-order (constant, linear or quadratic) polynomial regression model. Solving a least-square regression problem gives

$$\beta = (F^t R^{-1} F)^{-1} F^t R^{-1} Y_s \quad (2)$$

In this paper a constant regression model is used, so $n_p = 1$, $f(x) = 1$ and $F = 1$.

$Z(x)$ is the realization of a normally distributed random process with mean zero, variance σ^2 ,

$$\sigma^2 = \frac{1}{n_s} (Y_s - F\beta)^t R^{-1} (Y_s - F\beta) \quad (3)$$

and co-variance

$$\text{cov}[Z(s^i), Z(s^j)] = \sigma^2 R_{ij} \quad (4)$$

The matrix of correlation between samples R is determined by a Spatial Correlation Function (SCF).

$$R_{ij} = SCF(s^i, s^j) = \prod_k \text{scf}_k(|s_k^i - s_k^j|) \quad (5)$$

This matrix is dense symmetric positive definite with ones along diagonal and become ill-conditioned when samples are too close. The order of the Kriging correlation matrix depends only on the number

of samples considered ($N = n_s$) and not on the number of variables.

The SCF can be any function reflecting the characteristics of the output function. Exponentials or cubic splines are the most common functions. The exponential function is adapted to a wide range of physical applications and is described below

$$scf_k(x) = \exp(-\theta_k x^{p_k}), \theta_k > 0, p_k \in [1, 2] \quad (6)$$

The $2n_{dv}$ correlation parameters (θ_k, p_k) need to be fitted through an optimization process (see section II-E-1)

The cubic spline function was also used

$$scf_k(x) = \begin{cases} 1 - 6(x\theta_k)^2 + 6(x\theta_k)^3, & x < \frac{1}{2\theta_k} \\ 2(1 - x\theta_k)^3, & \frac{1}{2\theta_k} \leq x < \frac{1}{\theta_k} \\ 0, & x \geq \frac{1}{\theta_k} \end{cases} \quad (7)$$

Only n_{dv} correlation parameters $\theta_k > 0$ must be fitted. Commonly, cubic splines are less adapted to very chaotic functions than exponentials.

To evaluate Kriging at an unknown location a vector of correlation r between sample points and unknown is computed

$$r_i(x) = SCF(x, s^i) \quad (8)$$

Finally, the Kriging prediction equation is

$$Y(x) = f^t(x)\beta + r^t(x)R^{-1}(Y_s - F\beta) \quad (9)$$

Practically, the Kriging model can be evaluated as a black-box function by storing vectors β and $r_h s = R^{-1}(Y_s - F\beta)$. Then, the evaluation of the model at an unknown location costs only two dot products.

2. Error Prediction

With the statistical prediction of the function is also associated an uncertainty prediction. As by construction the model interpolates the function at samples, its error is null at samples.

The standard error $S(x)$ of the Kriging model grows with distance from samples, its maximum value being σ .

$$S^2(x) = \sigma^2 \left(1 - r^t(x)R^{-1}r(x) + u^t(x)(F^t R^{-1} F)^{-1}u(x) \right) \quad (10)$$

with $u(x)$ vector $n_p \times 1$

$$u(x) = F^t R^{-1}r(x) - f(x) \quad (11)$$

Other estimated errors can be computed with a technique of leave-one-out cross validation.⁹ The idea behind cross validation errors is to study the sensitivity of the model with respect to sample

dataset by altering it of one point. It implies n_s intermediate Kriging constructions and evaluations. Two predicted errors based on leave-one-out cross validation named sample sensitivity error ($dKdS(x)$) and cross validation error ($CV(x)$) are defined

$$dKdS(x) = \frac{1}{n_s} \sum_i |Y(x) - Y^{-i}(x)| \quad (12)$$

$$CV(x) = \frac{1}{n_s} \sum_i S^{-i}(x) \quad (13)$$

Kriging sensitivity error $dKdS(x)$ grows at locations where sample points give more information and is small at location where samples are redundant. Kriging standard sensitivity error $CV(x)$ is very close to the standard error. As cross validation errors are a mean of models built on altered sample datasets, they are not null at samples.

We decided to make a geometric mean between cross validation and standard errors to set them null at samples. That is why errors $dKdS(x)$ and $CV(x)$ are mixed with the standard error, and two new error predictions are introduced

$$dKdS_{mix}(x) = \sqrt{S(x)dKdS(x)} \quad (14)$$

$$CV_{mix}(x) = \sqrt{S(x)CV(x)} \quad (15)$$

Predicted errors are very useful to improve iterative process. When minimizing a function, iteratively refining at the minimum of the response surface usually leads to premature convergence.⁶ This can be improved by including exploration in the process using either a domain exploration ('Poll' step of the surrogate management framework⁶), either an infill criterion based on predicted error.¹⁰ When minimizing global error of a response surface, predicted errors can be used as sampling criteria (see MAXVAR,¹⁰ Application-driven Sequential Designs¹⁵ and IV-B).

C. Model Correlation Parameters Fit

Kriging spatial correlation parameters (θ_k, p_k) from equations 6 or 7 must always be fitted to the samples. Otherwise, if the correlation strength is underestimated (θ_k too large), the local deviation function $Z(x)$ looks like a peak function interpolating each sample and only the polynomial regression model gives information.

$$\text{for } \theta \rightarrow +\infty, \begin{cases} Z(x) \rightarrow 0 \\ Y(x) \rightarrow f^t(x)\beta \end{cases} \quad (16)$$

1. Maximization of Model Likelihood

The correlation parameters (θ_k, p_k) of the model are fitted by Maximizing its Likelihood Estimate (MLE method).

$$MLE = \max_{\theta, p} (\ln(L)) \quad (17)$$

$$\ln(L(\theta, p)) = -\frac{1}{2} \left(n_s (\ln(\sigma^2) + \ln(2\pi)) + \ln(|R|) \right) \quad (18)$$

The model likelihood L evaluation is usually very quick compared to a high-fidelity CFD computation, it only costs to compute the determinant of the correlation matrix R . Maximization of the likelihood estimate can sometimes lead to an incorrect model identifiable by high standard error or by comparing MLE to its asymptotical value.²⁴ This is due to the nature of the MLE function: quasi-null gradient on some zones, and multiple local optima.²⁵ This sometimes high-dimensional problem (from n_{dv} to $2n_{dv}$ parameters according to the correlation function) can be efficiently solved using a gradient optimization algorithm. By using a correct initialization of the correlation parameters as described in the next section (II-C-2), the optimizer converges to the global optimum in most cases. The gradient of the determinant of the correlation matrix is computed with a forward finite differences method.

2. Initialization of the Spatial Correlation Parameters

Estimating the Likelihood requires inverting the correlation matrix and for large datasets, as it is the case in V, the MLE problem becomes computer expensive. A method was developed to easily find an initial guess and the optimization boundaries for the correlation parameters. It enables to optimize the correlation parameters with a gradient optimizer (local) requiring few evaluations of the Likelihood. The parameters θ_k govern the directional strength of the correlation between two locations. The correlation decreases with distance between points. The log-Likelihood function is multimodal and has quasi null gradients for large θ_k .²⁵ The main idea is to define what a large correlation parameter (θ_k) is by introducing a scaling factor depending on the samples. It is then possible to overestimate the correlation strength with a small θ_k in order to directly study the region of the log-Likelihood exhibiting large gradients.

Considering the exponential SCF (Eqn. 6), p_k values close to 2 are best suited to smooth functions but less numerically robust that is why the initial value is $p_k = 1$.

First, assuming that all control points are correlated, the minimum correlation factor c is defined as

$$\forall (x^i, x^j) \in \mathcal{D}^2, \exists c \in]0; 1[/ \exp(-\theta_k |x_k^i - x_k^j|) \geq c \quad (19)$$

Thus, by fixing the strength of the correlation c between the two most directional-distant sample points $(\tilde{s}_k^i, \tilde{s}_k^j)$

$$\exists \theta_k > 0 / \exp(-\theta_k |\tilde{s}_k^i - \tilde{s}_k^j|) = c \quad (20)$$

Finally giving

$$\theta_k = \frac{-\ln(c)}{|\tilde{s}_k^i - \tilde{s}_k^j|} \quad (21)$$

According to our physical functions a good correlation factor is $c = 0.2$. Experience shows that underestimated θ_k parameters usually give better approximation than overestimated parameters, that is why a strong correlation factor was chosen. The initial parameters are determined by

$$\theta_k = \frac{\ln(5)}{|\tilde{s}_k^i - \tilde{s}_k^j|} \quad (22)$$

The optimization boundaries are $[10^{-3}\theta_k, 10^{+3}\theta_k]$ around the initial guess.

The same method can be applied to cubic spline functions.

D. Cokriging - Gradient Enhanced Kriging

A Cokriging model¹⁹ interpolates the function and the gradient at each sample location. As Cokriging models include more information on the true function than Kriging models, they need fewer samples to achieve a given level of accuracy. Moreover, the vectorial information provided by the gradient should be more beneficial for high-dimensional problems.

Two different formulations exist for Cokriging: direct or indirect. When using the same correlation parameters both formulations give the same results.

1. Indirect Cokriging

The indirect Cokriging method does not require Kriging source code modification. In fact, the original Kriging formulation is used with an augmented sample database. For each sample point, one point determined by a first order Taylor approximation is added in each direction. The size of the augmented sample set is $n_s(n_{dv} + 1)$. The step chosen to add those points must not be too low in order to avoid

ill-conditioning of the correlation matrix. A good compromise is $s^{n_s+ik} = s^i + 10^{-4}range_k(S)$.

$$y(s^{n_s+ik}) = y(s^i) + \frac{\partial y(s^i)}{\partial x_k} 10^{-4}range_k(S) \quad (23)$$

The indirect Cokriging applied to very dense datasets is expected to be problematic. If the delta used for the Taylor expansion is of the same order of magnitude than point density, the Taylor augmented datasets could degrade the model. Hopefully, it does not happen when approximating expensive computer codes.

2. Direct Cokriging

The direct Cokriging approach is equivalent to make one Kriging approximation for each direction of the gradient, and the link between function and gradient is conserved through an heritage of the correlation function and parameters. The vectors and matrix of size n_s are augmented to a size of $n_s(n_{dv} + 1)$.

$$Y_s = \begin{bmatrix} y(s^1), y(s^2), \dots, y(s^{n_s}), \\ \frac{\partial y(s^1)}{\partial x_1}, \frac{\partial y(s^1)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial y(s^1)}{\partial x_{n_{dv}}}, \\ \frac{\partial y(s^2)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial y(s^{n_s})}{\partial x_{n_{dv}}} \end{bmatrix} \quad (24)$$

For a constant regression model

$$f(x) = \begin{bmatrix} 1, 1, \dots, 1, \\ 0, 0, \dots, 0, \\ 0, \dots, 0 \end{bmatrix} \quad (25)$$

The augmented correlation matrix is assembled through 4 blocks, representing covariance of functions between functions, of functions between gradients, of gradients between functions and of gradients between gradients. Whereas the indirect formulation approximates the function on an augmented database, the direct formulation keeps the original database unchanged but approximates more functions ($n_{dv} + 1$).

$$\begin{cases} Cov(y(s^i), y(s^j)) = \sigma^2 SCF(s^i, s^j) \\ Cov(y(s^i), \frac{\partial y(s^j)}{\partial x_k}) = \sigma^2 \frac{\partial SCF(s^i, s^j)}{\partial x_k} \\ Cov(\frac{\partial y(s^i)}{\partial x_k}, y(s^j)) = -\sigma^2 \frac{\partial SCF(s^i, s^j)}{\partial x_k} \\ Cov(\frac{\partial y(s^i)}{\partial x_k}, \frac{\partial y(s^j)}{\partial x_l}) = \sigma^2 \frac{\partial^2 SCF(s^i, s^j)}{\partial x_k \partial x_l} \end{cases} \quad (26)$$

One should notice that the augmented correlation matrix is dense non-symmetric and its order $N = n_s(n_{dv} + 1)$ increases with the number of variables and the number of samples.

The 2 blocks of the new correlation vector are

$$r_i(x) = \begin{cases} SCF(x, s^i), [1, n_s] \\ \frac{\partial SCF(x, s^i)}{\partial x_k}, [n_s + 1, n_s(n_{dv} + 1)] \end{cases} \quad (27)$$

With the exponential function the distance (L1-norm) is elevated to a power lesser than two and is not twice differentiable. That is why cubic spline correlation functions are used with direct Cokriging. Derivatives of the cubic spline (Eqn. 7) are

$$\frac{\partial SCF(s^i, s^j)}{\partial x_k} = \begin{cases} \begin{aligned} &sign(s_k^i - s_k^j) \\ &\times (18\theta_k^3 |s_k^i - s_k^j|^2 - 12\theta_k^2 |s_k^i - s_k^j|) \\ &\times \prod_{m \neq k} [1 - 6(|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^2 \\ &+ 6(|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^3] \end{aligned} \\ -6\theta_k sign(s_k^i - s_k^j) \\ \times (1 - \theta_k |s_k^i - s_k^j|)^2 \\ \times \prod_{m \neq k} [2(1 - 6|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^3] \\ 0 \end{cases} \quad (28)$$

Assuming $k \neq l$,

$$\frac{\partial^2 SCF(s^i, s^j)}{\partial x_k \partial x_l} = \begin{cases} \begin{aligned} &\prod_{m \in \{k, l\}} [sign(s_m^i - s_m^j) \\ &\times (18\theta_m^3 |s_m^i - s_m^j|^2 \\ &- 12\theta_m^2 |s_m^i - s_m^j|)] \\ &\times \prod_{m \notin \{k, l\}} [1 - 6(|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^2 \\ &+ 6(|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^3] \end{aligned} \\ \prod_{m \in \{k, l\}} [-6\theta_m^2 sign(s_m^i - s_m^j) \\ \times (1 - \theta_m |s_m^i - s_m^j|)^2] \\ \times \prod_{m \notin \{k, l\}} [2(1 - 6|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^3] \\ 0 \end{cases} \quad (29)$$

$$\frac{\partial^2 SCF(s^i, s^j)}{\partial x_k^2} = \begin{cases} \begin{aligned} &(-12\theta_k^2 + 36\theta_k^3 |s_k^i - s_k^j|) \\ &\times \prod_{m \neq k} [1 - 6(|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^2 \\ &+ 6(|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^3] \end{aligned} \\ 12\theta_k^2 (1 - \theta_k |s_k^i - s_k^j|) \\ \prod_{m \neq k} [2(1 - 6|s_m^i - s_m^j| \theta_m)^3] \\ 0 \end{cases} \quad (30)$$

3. From Kriging to Cokriging

All Kriging functionalities are available when using Cokriging including error predictions. Cokriging models are also fitted by MLE (Eqn. 17). The MLE correlation parameters of Kriging, indirect Cokriging and direct Cokriging are different in general.

E. Numeric Implementation

1. Correlation Matrix Inversion and Robustness

Considering SCF formulation, close sample points can lead to quasi-identical columns in the correlation matrix R the matrix being then ill-conditioned²⁶ (especially with low θ_k values). The optimization of Kriging parameters implies computing very small determinants, and in order to avoid underflow truncature error the $\ln|R|$ term is computed as a sum of logarithms of eigenvalues with a LU method from LAPACK.²⁷

Typically, one can obtain a fitted Kriging with $\text{cond}(R) \approx 10^{16}$ and still a good interpolation of samples. That is why ill-conditioned matrix is not a stopping error criteria, but sample interpolation is checked after each correlation matrix inversion.

We noticed that when using the same correlation parameters the direct Cokriging correlation matrix (non-symmetric) is better conditioned than the indirect Cokriging correlation matrix (symmetric). It can be explained by the fact that the augmented sampling of the indirect method exhibits samples very close from each other.

2. Memory and Computation Time

The computational cost to build the model depends only on the correlation matrix order N . On a standard Intel Pentium4 2.8GHz processor, the estimated computation time is:

$$\begin{aligned} t_{user} &\approx 3.10^{-9}N^3 \text{ seconds} \\ \text{memsize} &\approx 8.10^{-6}N^2 \text{ Mbytes} \end{aligned} \quad (31)$$

For example, saying that the model must be built in one minute with 300 computations of the likelihood for the MLE fit, the maximum matrix order is then $N = 400$. For models approximating high-fidelity CFD solver the typical maximum number of computations authorized for an optimization is close to $n_s = 200$. The Kriging computation cost depending only on the number of samples ($N_{kriging} = n_s$) it is effectively negligible here. On the contrary, the computation cost of Cokriging models can be limiting on high dimensional problems ($N_{cokriging} = n_s(n_{dv} + 1)$). Considering an optimization problem with a hundred variables, the computation time for a single correlation matrix inversion would be $t_{user} > 6$ hours.

The ScaLAPACK user guide²⁸ (parallel version of LAPACK) recommends a maximum matrix order of 1000 per CPU.

In term of memory, a Kriging code only requires to allocate the inverted correlation matrix plus some vectors in double precision.

III. Definition of the Aerodynamic Test Case

The non-linearities observed on aerodynamic global coefficients when varying shape cannot be represented by an analytical test function. This is why a typical CFD test case was chosen. The aerodynamic function considered within this article is the far-field wave drag²⁹ of a RAE2822 airfoil in an Euler flow at a Mach number $M = 0.78$ and an angle of attack $AOA = 0.6^\circ$. The flow analysis was performed with the elsA CFD code³⁰ on a structured multiblock C-mesh (33×130). The second order Roe's upwind scheme with the Van Albada limiter is used as spatial scheme coupled with an implicit time resolution.

By modifying the shape of the transonic airfoil with Hicks-Henne sinusoidal bumps, the objective function exhibits multiple local optima and a non-linear behavior (Figure 1).

$$HH_k(u) = X_k \sin^4\left(\pi u \frac{\log 0.5}{\log \alpha_k}\right); u \in [0, 1] \quad (32)$$

The six design variables considered are amplitudes X_k of Hicks-Henne bumps on the upper part at $\alpha_k = 10\%, 80\%, 38\%, 66\%, 24\%, 52\%$ of the chord line so as the two first parameters correspond to deformations of the leading edge and of the zone where the shock occurs. The distribution is chosen so as when incrementally increasing the number of design variables, the bumps stay equidistributed on the upper surface. The amplitude of each bump is in the domain $[-5; +5]mm$, and the chord length of the airfoil is one meter.

At each update of the design variables the initial mesh is deformed using an improved integral method (iso-topology). The mesh deformation module is also able to compute the sensitivity of the mesh with respect to the shape variables needed to compute the gradient of the objective function.

The gradient information used to build the Cokriging models was computed using the discrete adjoint method.^{1, 16} In term of computational cost, a gradient calculation with the adjoint method costs about the same as one direct CFD computation, so a Cokriging model built with n_s samples costs the same as a Kriging model on $2n_s$ samples for any number of design variables. It should be noticed that the discrete adjoint formulation used within this paper ensures a coherence between direct flow

computation and gradient computation and thus a correlation between numerical residual errors at convergence.

The dimension of the problem varies from two to six, and for each problem a reference function considered exact is built using respectively 104, 208, 272, 1056 and 4160 samples. The indirect Cokriging formulation was used to build the reference functions, but as the five dimensional reference was already expensive to build with a matrix order $N = 6336$ the six dimensional reference was built with a Kriging formulation instead. The Cokriging code should be made parallel to extend this study to higher dimensions.

Due to the important number of CFD evaluations required to establish references, a coarse mesh was used. It is worth noting that this is not detrimental, since we are addressing inviscid flow simulations and that aerodynamic objective functions on finer meshes or more realistic problems exhibit the same kind of non-linearities.

A Sobol technique was used for the space filling sample distributions and the corners of the box domain were added to the distributions.

Only the first test surface with two variables can be plotted, but about the same level of complexity is expected when increasing the number of design variables.

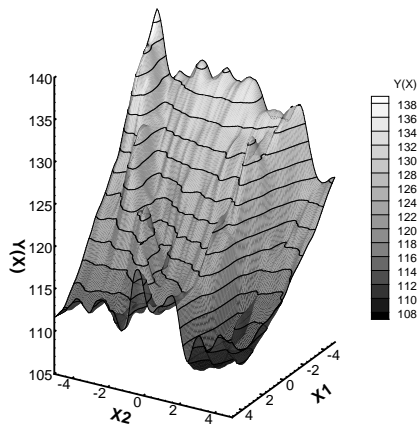


Figure 1. Aerodynamic reference surface for $n_{dv} = 2$

IV. Influence of Sampling Methods on Global Accuracy of Response Surfaces

As predicted errors are available with Kriging we wanted to determine if using them as 'a posteriori' sampling criteria could outperform 'a priori' methods. Maximum error 'a posteriori' sampling were

already applied to polynomial test cases^{10,15}, but without comparison with classical space filling designs.

The different techniques presented in II-A were compared to reconstruct our first reference function depending on two variables (Figure 1) with as few samples as possible. Figures 2 and 3 show the evolution of the exact relative root mean squared error (RMSE) when increasing the number of samples from 6 to 64. The target is the dashed line corresponding to the sampling refinement at maximum of exact error.

A. Performance of 'a priori' Sampling Methods (grid, Halton, Sobol, LHS)

The fact that LHS and grid method are not sequential explains why on Figure 2 the error converges unsmoothly when increasing sampling size. Otherwise, the lack of coherence on the convergence can also be explained by problems of correlation parameter optimization. The optimal parameters in the sense of MLE are not always the optimal parameters in the sense of minimum exact error. More particularly, grid sampling is unadapted to build Kriging because optimization of the directional correlation parameters is biased by the linear dependence existing within the spatial distribution.^{31,32}

Anyhow, regarding Figure 2 one can observe that the convergence of the error seems composed of two phases. Firstly, we observe a transitory phase of strong error reduction for small datasets with a negative power trend until reaching $n_s = 20$. Secondly, the error seems to reach a linear phase with a low negative slope. This linear phase is very costly if a low level of error is required.

The Halton method was taken as the reference for 'a priori' methods for its good overall performance with small and large datasets. However, the only method applicable to high dimensions is LHS.

B. Performance of 'a posteriori' Sequential Sampling Methods

Looking at Figure 3 it appears that all methods are quasi-equivalent to the Halton reference. The linear phase of convergence is not avoided using sampling at maximum predicted error.

Regarding 'a posteriori' methods, the $max(dKdS_{mix})$ error refinement is the best. It is understandable as the $dKdS_{mix}$ error is based on $dKdS$ error, the Kriging sensitivity to the samples. It performs better than the Halton reference for large datasets (Table 1). This is coherent with the fact that as the number of samples increases, the model is more precise and the predicted error is also more precise.

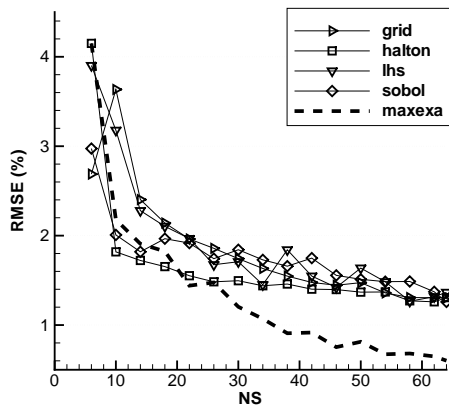


Figure 2. Evolution of error with sampling size for 'a priori' sampling methods, $n_{dv} = 2$

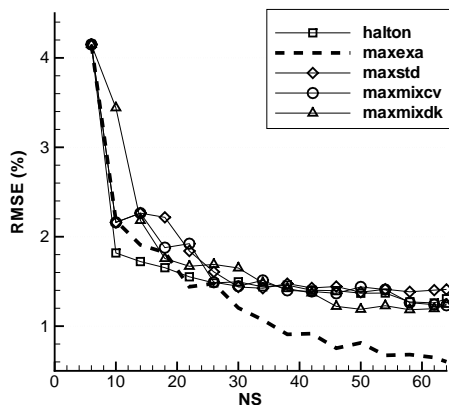


Figure 3. Evolution of error with sampling size for 'a posteriori' sampling methods, $n_{dv} = 2$

On small datasets, sampling refinement at maximum of error (even $max(Exa)$) does not outperform Halton but still produces very satisfying distributions.

When ignoring quasi-random sequence samplings, 'a posteriori' methods outmatch LHS and grid for small and large sampling size.

The fact that 'a posteriori' methods outperform only slightly space filling designs shows that the aerodynamic test function complexity is evenly distributed in the design space. In our sense this is always the case in aerodynamic optimization and global response surface are generally unaffordable.

method	$n_s = 6...25$	$n_s > 25$	$n_s \geq 6$
<i>grid</i>	2.43	1.49	1.92
<i>Halton</i>	1.96	1.39	1.76
<i>LHS</i>	2.45	1.57	2.01
<i>Sobol</i>	2.11	1.61	1.85
<i>max(Exa)</i>	2.17	0.89	1.47
<i>max(S)</i>	2.36	1.43	1.87
<i>max(CV_{mix})</i>	2.32	1.38	1.84
<i>max(dKdS_{mix})</i>	2.43	1.36	1.86

Table 1. Integrated relative RMSE for all sampling methods, $n_{dv} = 2$

V. Influence of Dimension on Global Response Surface Accuracy and Benefits of Cokriging

No general rule can be made to assess a priori the number of samples needed to achieve a given accuracy as it depends on the complexity of the unknown function. It is generally admitted that to obtain a correct global response surface, 10 samples per direction is a good starting sample size ($n_s \approx 10^{n_{dv}}$). The sample size increasing exponentially it becomes then impossible to build a global response surface on high dimensional problems. The benefits of Cokriging beside Kriging cannot be assessed by only varying the sample size^{18,19,21} because the information added to the model through gradients is dimensional. Thus the accuracy of Kriging and Cokriging will be compared by varying the sample size and the number of design variables. The dependence between number of samples and dimension is expected to be reduced with Cokriging. When dealing with approximation of expensive computer analysis, the dataset size is generally very limiting and the reconstruction was made with less than 300 samples. The comparison was conducted on an aerodynamic function (section III) in order to use the same solvers as in aerodynamic shape optimization and gradient computed with the adjoint state formulation.

A. Results

Figures 4-8 show the evolution of the exact (with respect to the reference surface) root mean squared error (RMSE in percent) when increasing the number of samples for the five problems.

Firstly it appears that the indirect Cokriging method is the best. Despite the mathematical appeal of direct Cokriging formulation its performance

are deceiving. Overall, it is worse than Kriging on the two, three and five dimensional tests (Table 2). The spikes occurring on direct Cokriging convergence correspond to wrong MLE correlation parameters. The MLE problem has more local minima representing optimal correlation parameters for each of the $n_{dv} + 1$ functions (the function itself and its derivatives Eqn. 26). In fact, the MLE of direct Cokriging sometimes gives the same parameters as MLE of Kriging and sometimes gives the same parameters as MLE of indirect Cokriging, for example on Figure 7 between 150 and 200 samples. This does not discard the method as direct and indirect Cokriging models give the same results when using the same correlation parameters, but shows that direct Cokriging models fitted by MLE are easily ill-fitted.

The convergence in two phases described previously (in section IV) appears on all tests with Kriging or Cokriging models.

The number of samples needed to switch from transitory to linear phase is roughly the same for Kriging and Cokriging (Figures 4-8). The benefits of the Cokriging models on error is obvious during the transitory phase (Table 2).

During the second phase, the low negative linear slope is the same for Kriging and Cokriging models. However, the indirect Cokriging is still more efficient due to the advance taken during the first phase (Table 2).

In term of computation cost, the indirect Cokriging does effectively need fewer samples to reach a given accuracy. As the samples are twice more expensive to compute for Cokriging (cost of the adjoint solver), they should use at least twice less samples than Kriging to reach a given accuracy to be interesting. This seems true in general. By interpolating the gradient vector at each sample the surrogate models interpolate hyperspheres instead of points and as expected the best gain is achieved on the higher dimensional problem with small datasets.

It appears on table 2 that global error increases with the number of variables. It was expected since it was not possible to have a sampling size of ten samples per direction for all tests.

n_{dv}	$n_s = 3...25$			$n_s > 25$			$n_s \geq 3$		
	Krig.	D.Cok.	I.Cok.	Krig.	D.Cok.	I.Cok.	Krig.	D.Cok.	I.Cok.
2	3.45	2.87	2.42	2.20	1.76	1.57	2.57	2.09	1.82
3	5.23	6.18	3.36	2.44	2.60	1.66	2.84	3.11	1.91
4	8.40	8.16	3.91	3.14	3.58	2.57	3.75	4.11	2.72
5	17.9	15.7	8.68	5.59	6.05	4.73	6.62	6.85	5.05
6	22.8	20.0	11.6	7.25	6.71	6.71	8.45	7.74	7.08

Table 2. Integrated relative RMSE for all formulations and tests

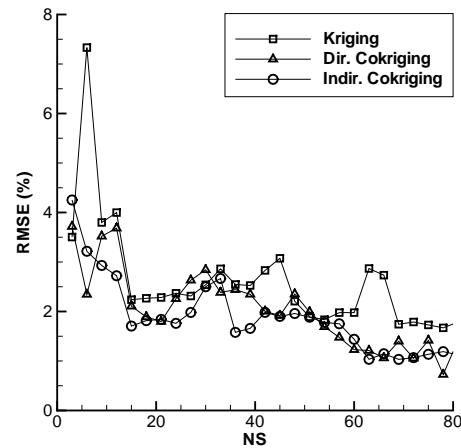


Figure 4. Evolution of Kriging and Cokriging errors with sampling size, $n_{dv} = 2$

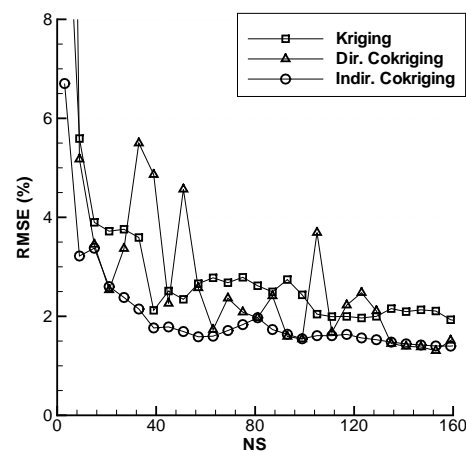


Figure 5. Evolution of Kriging and Cokriging errors with sampling size, $n_{dv} = 3$

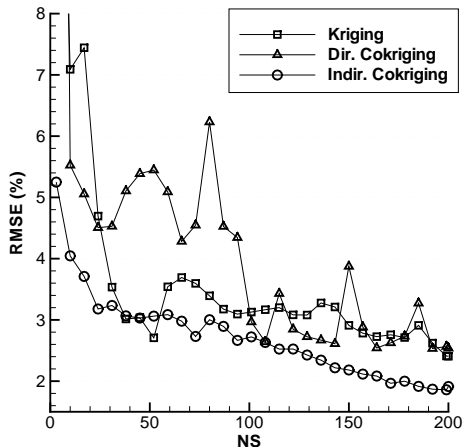


Figure 6. Evolution of Kriging and Cokriging errors with sampling size, $n_{dv} = 4$

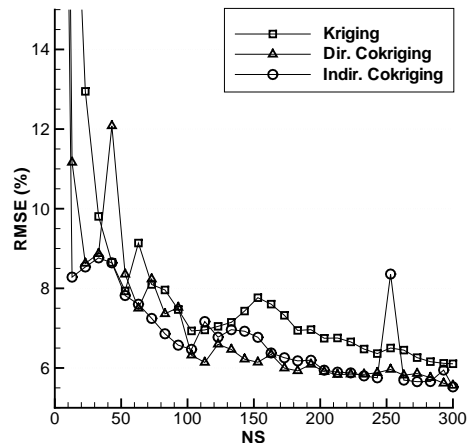


Figure 8. Evolution of Kriging and Cokriging errors with sampling size, $n_{dv} = 6$

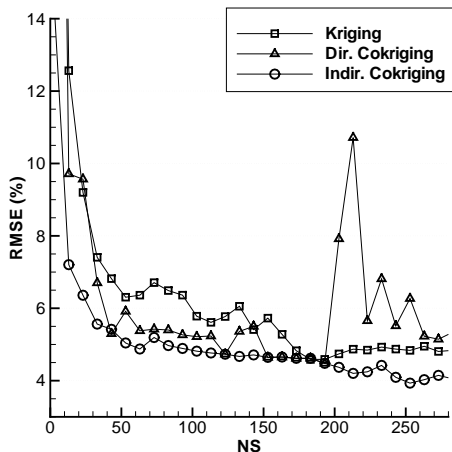


Figure 7. Evolution of Kriging and Cokriging errors with sampling size, $n_{dv} = 5$

VI. Conclusion

An efficient framework to fit Kriging correlation parameters by likelihood optimization was described. It consists in departing from a good initial guess for the parameters and then apply a gradient optimizer. It shows good overall robustness, even during the fit of computer expensive Kriging (up to order $N = 6336$).

Usually, comparison of modeling techniques are made on analytical test functions. Aerodynamic functions being highly non-linear, analytical test cases cannot represent the true level of complexity encountered in aerodynamic shape optimization.

Classical response surface frameworks use space filling 'a priori' sampling. It is possible to tune the

sample distribution to the function studied using 'a posteriori' refinement techniques to concentrate more information into the sampling. Compared to space filling designs, 'a posteriori' sampling at the maximum of exact error significantly increases accuracy of the model. Kriging being an interpolating model, any error criterion null at samples (standard error) can be used for sampling refinement. Two new predicted error criteria based on cross-validation, but satisfying this property were introduced.

The convergence of the global error when increasing the number of samples proceeds in a transitory phase of fast decrease followed by a linear phase of slow decrease. The sample size needed to reach this second phase cannot be foretold, but increases with dimension and complexity of the function studied.

Among 'a priori' techniques, quasi-random Halton give best results. Moreover, it also gives ordered samples. The new sequential sampling methods based on refinement at maximum error show fair results compared to classical sampling methods, but do not break the slow linear convergence as was expected regarding performance of refinement at maximum of exact error. From all predicted errors, the new leave one out sensitivity error introduced within this article enables to have the smallest exact error on large datasets, but needs to build all intermediate models. The fact that 'a posteriori' methods outperform only slightly space filling designs shows that the aerodynamic test function complexity is evenly distributed in the design space. In our sense this is always the case in aerodynamic optimization and global response surface are generally unaffordable.

The use of adjoint gradient information to build

Cokriging models drastically improves global accuracy, but is insufficient to break the slow convergence during the second linear phase. The computation cost induced by Cokriging formulation makes the response surface expensive to build when considering lots of design variables, but as the optimization process usually takes place on parallel computer architecture, it is possible to lessen this cost. As was stated in previous papers,¹⁹ indirect and direct Cokriging models are identical when built with the same correlation parameters. However, the sample database augmentation used to build indirect Cokriging induces bad condition number of the correlation matrix that can be avoided using the direct formulation. Despite its better conditioning, the direct Cokriging model cannot be easily fitted. In our view, the best framework to build gradient enhanced Kriging reuses correlation parameters from the indirect formulation to build a direct Cokriging. The best gain of Cokriging is observed during the transient phase, on small datasets with a large number of design variables.

Regarding the global error of reconstruction on all test cases considered within this paper, it appears that a global response surface accurate at one percent is out of reach with less than a few hundred samples except for dimension lesser than four. That is why, global response surfaces should be used only when it is possible to identify a very small set of interesting design variables or with low-fidelity solvers and large sample database.

However, physical functions generally exhibit a simple global tendency plus non-linear perturbations and it is still possible to find an optimum by iteratively refining the model at its predicted optimum. To overcome early convergence of this process it is interesting to reuse predicted error to introduce some exploration. The general tendencies found on the low-accuracy global response surface can also be used to initialize a local optimizer closer to the global optimum. As the domain of accuracy around sample locations is increased when interpolating gradient, an optimization process refining iteratively a local Cokriging response surface around interesting locations should be investigated on a high dimensional problem.

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge M. Meaux (Mathieu.Meaux@airbus.com) and M. Montagnac (Marc.Montagnac@cerfacs.fr) for their support and suggestions. We also thank *Airbus France* for providing their shape optimization suite

OPTalia. We used the computer implementation of J. Burkardt (<http://www.scs.fsu.edu/~burkardt/>) for 'a priori' sampling methods and thank him for sharing his source code.

References

- ¹M. Meaux, M. Cormery, and G. Voizard. Viscous aerodynamic shape optimization based on the discrete adjoint state for 3d industrial configurations. European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Jul. 2004.
- ²Jaroslav Sobieszczanski-Sobieski and Raphael T. Haftka. Multidisciplinary aerospace design optimization: Survey of recent developments. In *4th Aerospace Science Meeting & Exhibit*, number AIAA-1996-0711, 1996.
- ³S. Tursi. Transonic wing optimization combining genetic algorithm and neural network. In *21st Applied Aerodynamics Conference*, number AIAA 2003-3787.
- ⁴S. Pierret, H. Kato, R. Coelho, and A. Merchant. Multi-objective and multi-disciplinary shape optimization. In *EUROGEN*, 2005.
- ⁵S. Jeong, M. Murayama, and K. Yamamoto. Efficient optimization design method using kriging model. *Journal of Aircraft*, 42(2):413–419, 2005.
- ⁶Andrew J. Booker, J. E. Dennis, Jr., Paul D. Frank, David B. Serafini, Virginia Torczon, Trosset, and W. Michael. A rigorous framework for optimization of expensive functions by surrogates. Technical Report TR-98-47, Center for Research on Parallel Computation, 1998.
- ⁷Natalia Alexandrov, J. E. Dennis, Jr., Robert Michael Lewis, Torczon, and Virginia. A trust region framework for managing the use of approximation models in optimization. Technical Report TR-97-50, 1997.
- ⁸D. Cox and S. John. Sdo: A statistical method for global optimization. In *Multidisciplinary design optimization (Hampton, VA, 1995)*, pages 315–329. SIAM, Philadelphia, PA, 1997.
- ⁹D. R. Jones, M. Schonlau, and W. J. Welch. Efficient global optimization of expensive black-box functions. *Journal of Global Optimization*, 13:455–492, 1998.
- ¹⁰M. J. Sasena. *Flexibility and Efficiency Enhancements for Constrained Global Design Optimization with Kriging Approximations*. PhD thesis, University of Michigan, 2002.
- ¹¹J.C. Jouhaud, P. Sagaut, and B. Labeyrie. A kriging approach for CFD/Wind tunnel data comparison. *Journal of Fluid Engineering*, 128:847–855, 2006.
- ¹²J.-C. Jouhaud, P. Sagaut, M. Montagnac, and J. Laurenceau. A surrogate model based multi-disciplinary shape optimization method with application to a 2d subsonic airfoil. *Computers and Fluids*, 36(3):520–529, 2007.
- ¹³T. W. Simpson, J. D. Peplinski, P. N. Koch, and J. K. Allen. Metamodels for computer-based engineering design: Survey and recommendations. *Engineering with Computers*, 17:129–150, 2001.
- ¹⁴T. W. Simpson, D. K. Lin, and W. Chen. Sampling strategies for computer experiments: Design and analysis. *Journal of Reliability and Applications*, 2:209–240, 2001.
- ¹⁵W. C. M. van Beers. *Kriging Metamodeling for Simulation*. PhD thesis, Universiteit van Tilburg, 2005.
- ¹⁶A. Jameson. Aerodynamic design via control theory. *Journal of Scientific Computing*, 3(3), 1988.
- ¹⁷J. Peter, Chi-Tuan Pham, and F. Drullion. Contribution to discrete implicit gradient and discrete adjoint method for aerodynamic shape optimisation. ECCOMAS, 2004.
- ¹⁸R. M. Lewis. Using sensitivity information in the construction of kriging models for design optimization. *AIAA Journal*, (AIAA-98-4799):730–737, 1998.

¹⁹W. Liu. *Development of Gradient-Enhanced Kriging Approximations for Multidisciplinary Design Optimization*. PhD thesis, University of Notre Dame, 2003.

²⁰H.-S. Chung and J. J. Alonso. Using gradients to construct cokriging approximation models for high dimensional design optimization problems. In *40th AIAA Aerospace Science Meeting & Exhibit*, number AIAA-2002-0317, 2002.

²¹H.-S. Chung and J. J. Alonso. Design of a low-boom supersonic business jet using cokriging approximation models. In *9th AIAA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization*, number AIAA-2002-5598, 2002.

²²J. Sacks, W. J. Welch, T. J. Mitchell, and H. P. Wynn. Design and analysis of computer experiments. *Statistical Science*, 4(4):409–435, 1989.

²³L. Kocis and W. J. Withen. Computational investigations of low-discrepancy sequences. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 23(2):155–294, 1997.

²⁴J. D. Martin. *A Methodology for Evaluating System-Level Uncertainty in the Conceptual Design of Complex Multidisciplinary Systems*. PhD thesis, Pennsylvania State University, 2005.

²⁵K. V. Mardia and A. J. Watkins. On multimodality of the likelihood in the spatial linear model. *Biometrika*, 2:289–295, 1989.

²⁶G. J. Davis and M. D. Morris. Six factors which affect the condition number of matrices associated with kriging. *Mathematical Geology*, 5:669–683, 1997.

²⁷E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide*, third edition, 1999.

²⁸L. S. Blackford, J. Choi, A. Cleary, E. Dázevedo, J. Demmel, I. Dhillon, J. Dongarra, S. Hammarling, G. Henry, A. Petitet, K. Stanley, D. Walker, and R. C. Whaley. *ScaLAPACK Users' Guide*, 1997.

²⁹D. Destarac. Far-field / near-field drag balance and applications of drag extraction in cfd. In *CFD-Based Aircraft Drag Prediction and Reduction*. von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2003.

³⁰L. Cambier and M. Gazaix. elsA: an efficient object-oriented solution to cfd complexity. In *40th AIAA Aerospace Science Meeting & Exhibit*, number AIAA-2002-0108, 2002.

³¹M. Meckesheimer, R. B. Barton, T. W. Simpson, F. Limayem, and B. Yannou. Metamodeling of combined discrete/continuous responses. *AIAA Journal*, 39(10):1950–1959, 2001.

³²B. Wilson, D. J. Cappelleri, T. W. Simpson, and M. I. Frecker. Efficient pareto frontier exploration using surrogate approximations. In *8th AIAA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization*, number AIAA 2000-4895.

II.3 Compléments

II.3.1 Krigeage et corrélation spatiale

Le Krigeage vient de l'interprétation de la fonction à modéliser en tant que processus stochastique, $Z(x)$ (Equation II.Article.1). Il permet d'évaluer la fonction en un point inconnu en réalisant uniquement des calculs de corrélations entre couples de points (Equations II.Article.4, II.Article.8 et II.Article.9). L'hypothèse fondamentale, provenant des origines géostatistiques du Krigeage, est d'établir que la corrélation entre deux points est directement liée à leur distance par une fonction de corrélation spatiale (Equation II.Article.5). Ainsi, le réglage du Krigeage consiste à déterminer des paramètres de corrélation afin que les fonctions de corrélation représentent les relations les plus vraisemblables entre les échantillons (Equation II.Article.17). Une bonne compréhension du comportement des fonctions de corrélation spatiale est donc essentielle pour bien appréhender le Krigeage.

La fonction de corrélation, $scf_k(x)$, varie entre zéro et un en fonction de la distance, positive ou nulle, entre deux points. Elle est construite telle que deux points infiniment distants ne soient pas corrélés (fonction de corrélation nulle) et deux points identiques (distance nulle) aient une corrélation unitaire.

$$\begin{cases} \forall x \geq 0, scf_k(x) \in [0,1], \\ scf_k(0) = 1, \\ scf_k(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0. \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

C'est au niveau de la fonction de corrélation qu'interviennent les paramètres de corrélations, θ_k (Equations II.Article.6 et II.Article.7), qui permettent de régler le Krigeage en déterminant la vitesse selon laquelle la fonction tend vers zéro (Figures II.1 et II.2). Ces paramètres sont analogues aux hyperparamètres réglant le rayon d'influence des fonctions de base des réseaux de neurones à fonctions radiales de base. Ils établissent la sensibilité du métamodèle à chacune des variables. Nous utiliserons deux types de fonctions décrits ci-dessous :

- fonction de corrélation spatiale de type exponentiel,
- fonction de corrélation spatiale de type spline cubique.

La fonction de corrélation spatiale de type exponentiel (Equation II.Article.6 et Figure II.1) tend vers zéro sans jamais l'atteindre de sorte que tout couple de points du domaine d'étude présente une corrélation non nulle. Cette fonction fait intervenir un deuxième vecteur de paramètres de corrélation, p_k , qui agit sur le lissage de la fonction. La limite inférieure pour la puissance, $p_k = 1$, correspond à une fonction dont la dérivée est discontinue (fonction valeur absolue).

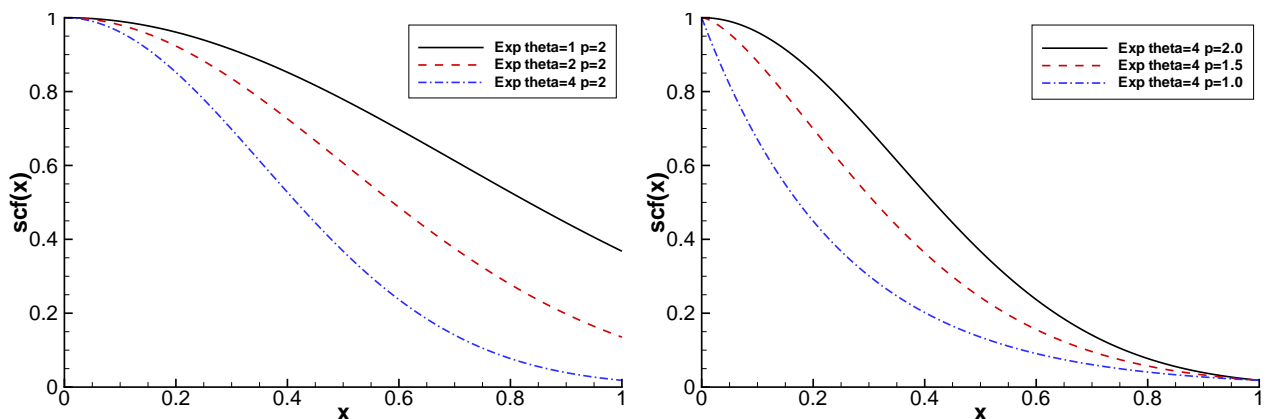


FIG. II.1 – Influence des paramètres de corrélation θ, p de la fonction exponentielle.

La fonction de corrélation spatiale de type spline cubique est définie sur trois intervalles déterminés par θ_k (Equation II.Article.7 et Figure II.2).

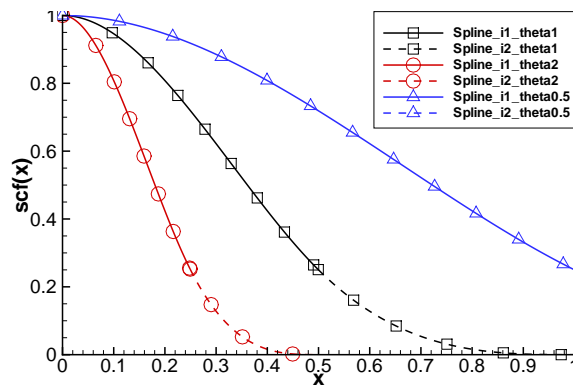


FIG. II.2 – Influence du paramètre de corrélation θ de la fonction spline cubique.

Les paramètres de corrélation spatiale du modèle, θ_k , doivent être réglés à chaque échantillonnage. En effet, lorsque la corrélation entre les échantillons est sous-estimée (surestimation de θ_k), la fonction de déviation locale, $Z(x)$, tend trop vite vers zéro et le Krigeage, $Y(x)$, ressemble alors au modèle de régression plus une série de fonctions de Dirac interpolant chaque échantillon (Equation II.Article.16 et Figure II.3).

Le coût de calcul d'une évaluation de cette fonction correspond au coût de calcul du déterminant de la matrice de corrélation, R (cf. II.Article.II.E).

Tel que suggéré par Mardia et Marshall [79], ce problème d'optimisation est traité par un algorithme local de type quasi-Newton. Toutefois, il est établi [80, 118] que la fonction de vraisemblance peut être multi-modale et admettre des zones plateau (où le gradient est quasi nul) proches de son optimum. Ainsi, comme le suggère Gano *et al.* [38], un algorithme global comme le recuit simulé est théoriquement préférable même s'il implique un plus grand nombre d'évaluations de la fonction objectif (d'autant plus que le nombre de paramètres est important).

L'approche mise en place dans cette thèse pour faire face à ce problème est d'utiliser une méthode empirique de détermination des paramètres de corrélation (cf. II.Article.II.C.2) afin d'initialiser l'algorithme local par un jeu de paramètres proche de l'optimum recherché. Cette valeur initiale correspond à la courbe $\theta=10$ de la figure II.3.

II.3.2 L'échantillonnage

II.3.2.1 Taille de l'échantillonnage

Pour le Krigeage, un point de construction est une déviation par rapport au modèle de régression (terme constant $Z(x)$). Un point de construction peut donc s'interpréter comme un degré de liberté laissé au Krigeage. L'augmentation du nombre d'échantillons permet de modéliser des fonctions de plus en plus complexes. Le nombre d'échantillons nécessaires pour correctement modéliser une fonction est donc déterminé par sa complexité. Cependant, comme la fonction à modéliser est inconnue, sa complexité l'est aussi. Il est donc impossible de déterminer *a priori* la taille d'échantillonnage nécessaire pour avoir une surface de réponse précise. Il existe tout de même quelques règles.

En général, les fonctions que l'on cherche à modéliser sont complexes, elles ne dépendent pas linéairement de leurs variables. On peut donc supposer que pour les modéliser, il faudra au moins autant d'échantillons que pour construire un modèle quadratique, c'est-à-dire $n_s \geq \frac{(n_{dv}+1)(n_{dv}+2)}{2}$ échantillons. En pratique, cela correspond à la limite inférieure de la taille d'échantillonnage. Théoriquement, le Krigeage peut être construit avec moins d'échantillons, mais il risque alors d'être imprécis. En dessous de cette taille, il conviendra donc de considérer le Krigeage comme une surface de réponse locale fiable seulement en ses points de construction.

Pour des fonctions de complexité inconnue, la taille d'échantillonnage recommandée est d'au moins dix points par direction, soit $n_s \geq 10^{n_{dv}}$. Cela n'est pas une taille maximale, mais une taille standard permettant d'au

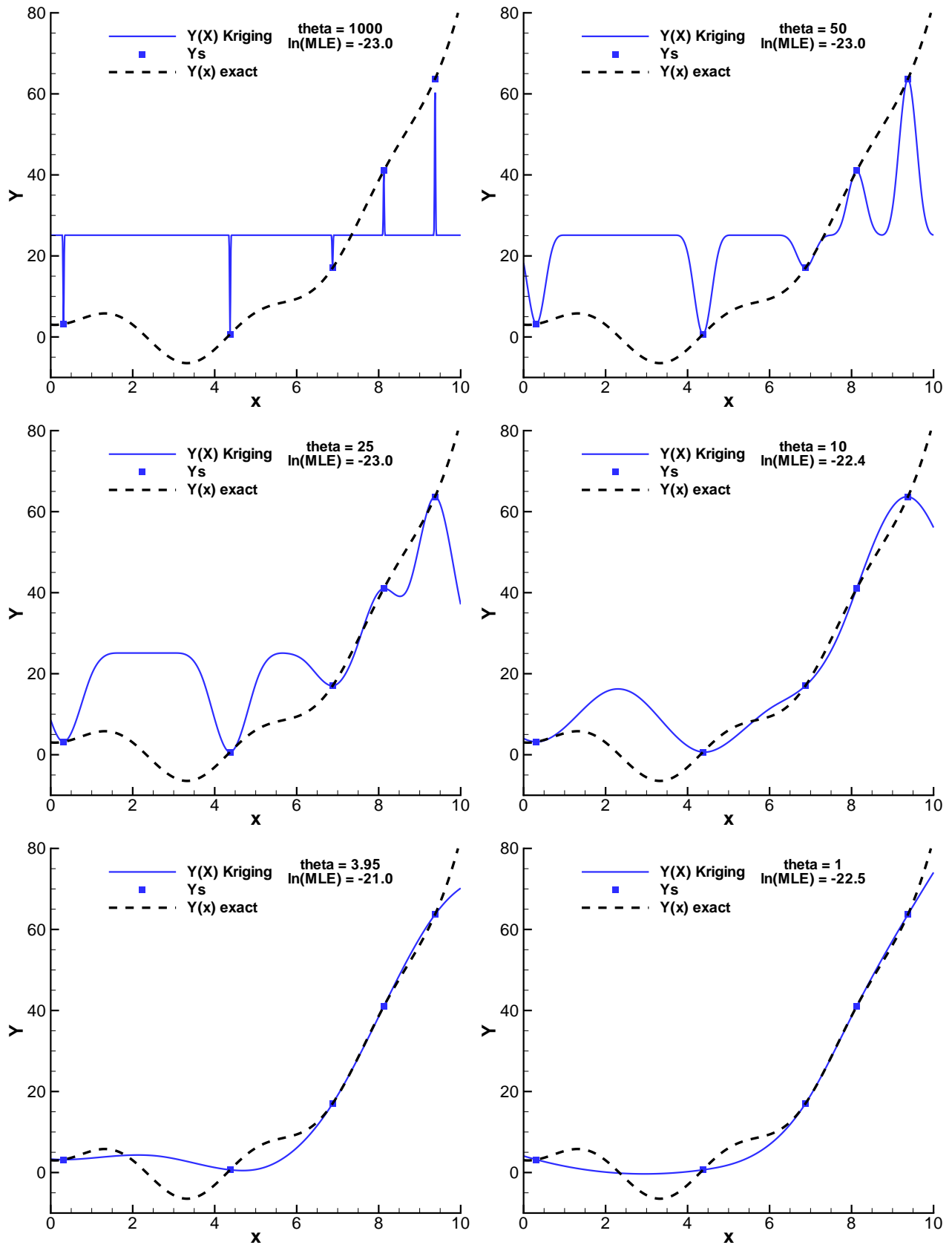


FIG. II.3 – Optimisation des paramètres de corrélation θ du Krigeage.

moins détecter les tendances et non linéarités principales. A partir de cette taille d'échantillonnage, on pourra envisager de remplacer complètement la fonction par sa surface de réponse. Il devient possible de considérer le Krigage comme une surface de réponse globale. Cette dépendance exponentielle entre la dimension et la taille de l'échantillonnage correspond à la malédiction dimensionnelle de Bellman [10]. Mis à part en dimension deux (10^2 calculs) ou trois (10^3 calculs), une telle densité d'échantillons est en générale impossible à atteindre.

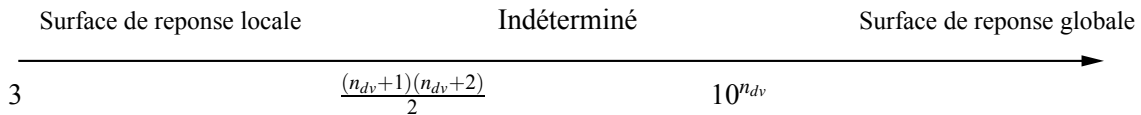


FIG. II.4 – Recommandations sur la taille de l'échantillonnage.

II.3.2.2 Echantillonnage global

L'utilisation de méthodes d'échantillonnage séquentielles *a posteriori* (cf. II.Article.II.A) peut potentiellement apporter un gain de précision globale significatif par rapport aux méthodes *a priori* pour la construction de surfaces de réponse. Cela est vérifié par le critère de raffinement d'échantillonnage au maximum d'erreur exacte (cf. II.Article.IV). Un tel gain pourrait permettre d'utiliser moins d'échantillons, donc potentiellement moins de simulations numériques, pour atteindre un niveau de précision donné. Toutefois, il s'avère que dans notre cas, le gain apporté par les critères de raffinement d'échantillonnage au maximum d'erreur prédite est négligeable. Or, ces méthodes séquentielles *a posteriori* nécessitent la construction de chaque surface de réponse intermédiaire et sont donc contraignantes d'un point de vue pratique. En conséquence, les méthodes d'échantillonnage *a priori* (hypercube latin LHS, Sobol) ont finalement été choisies pour la construction de surfaces de réponse globales.

Afin d'éviter la dégénérescence des performances des méthodes de Sobol ou Halton en dimension élevée [68], la méthode LHS est utilisée lorsque la dimension du domaine d'étude dépasse 20. Cette dégénérescence est illustrée par l'exemple de la figure II.5. Elle représente 100 échantillons distribués selon trois méthodes différentes (Halton, Sobol, LHS) dans un espace de dimension 40. En projetant ces 100 échantillons sur un plan de coupe, il apparaît clairement que les méthodes Halton et Sobol ne parviennent pas à distribuer uniformément les échantillons contrairement à la méthode LHS.

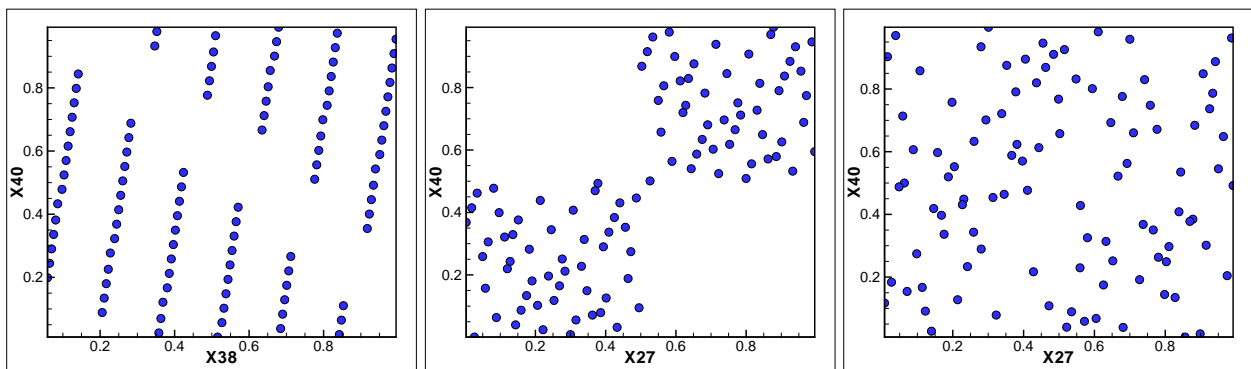


FIG. II.5 – Projection bidimensionnelle de 100 points des distributions Halton, Sobol et LHS dans un domaine de dimension 40.

II.3.2.3 Critères d'échantillonnage pour la recherche de minimum

Lorsque la surface de réponse est utilisée au sein d'un processus d'échantillonnage séquentiel, dans le but de trouver le minimum de la fonction, il n'est pas nécessaire de rechercher une bonne précision globale. En effet, le minimum prédit s'impose alors comme critère de raffinement logique. Pour ne pas négliger les zones où la fonction prédite présentent une grande incertitude, il est possible d'utiliser des critères plus évolués. En établissant un équilibre entre exploration (grâce à la valeur de l'incertitude) et exploitation (grâce à la valeur de la fonction) ces critères permettent d'éviter une convergence prématurée. En se conformant à la nomenclature décrite en II.2, $Y(x)$ est la fonction prédite et $S(x)$ est l'erreur prédite.

II.3.2.3.1 Critère LCB La manière la plus évidente pour effectuer ce compromis est d'effectuer une combinaison linéaire entre fonction approchée et incertitude. Ainsi, Cox [25] a introduit le critère *LCB*, « Lower Confidence Bounding »,

$$LCB_b(x) = Y(x) - b \cdot S(x); b \in \mathcal{R}^*. \quad (\text{II.2})$$

Son minimum indique la position à échantillonner. Comme l'erreur prédite par le Krigeage, $S(x)$, est positive ou nulle, le coefficient de pondération d'erreur b peut être choisi positif ou négatif.

II.3.2.3.2 Critère EI Le critère *EI* (« Expected Improvement »), utilisé notamment par l'algorithme d'optimisation *EGO* de Jones [59], est répandu en optimisation aérodynamique de formes [54, 61, 83]. Ce critère calcule l'espérance d'amélioration du Krigeage par rapport au meilleur des échantillons, $\max(Y_s^{\min} - Y(x); 0)$. Pour ce faire, il suffit de traiter le Krigeage comme une variable aléatoire suivant une loi normale de moyenne $Y(x)$ et d'écart type $S(x)$. Les fonctions *cdf* et *pdf* désignant la fonction de répartition et la densité de la loi normale, le critère *EI* vaut,

$$EI(x) = (Y_s^{\min} - Y(x)) \cdot cdf\left[\frac{Y_s^{\min} - Y(x)}{S(x)}\right] + S(x) \cdot pdf\left[\frac{Y_s^{\min} - Y(x)}{S(x)}\right]. \quad (\text{II.3})$$

Son maximum indique la position à échantillonner. Cette espérance d'amélioration présente souvent des zones de type plateau (gradient nul) et un comportement de type fonction Dirac. Son maximum est donc parfois difficile à trouver.

II.3.2.3.3 Critère LCI La fonction de confiance d'amélioration, *LCI* (« Lower Confidence Improvement »), a été développée dans le même esprit que l'espérance d'amélioration, mais en utilisant le formalisme de l'optimisation plutôt que le formalisme statistique. Il a été développé pendant la thèse, mais son application n'est pas décrite dans ce document. L'idée est d'introduire une contrainte telle que l'amélioration prédite soit supérieure à l'erreur prédite. Cette contrainte est directement introduite dans le critère par un terme de pénalisation de type puissance.

$$LCI_b(x) = -Y(x) + \max(Y(x) - Y_s^{\min} - b \cdot S(x), 0)^{1.2}; b \in \mathcal{R}^*. \quad (\text{II.4})$$

Son maximum indique la position à échantillonner. Cette fonction d'amélioration est beaucoup plus régulière que l'espérance d'amélioration.

II.3.3 Cokrigeage et interpolation du gradient

Dans OPTaliA, la méthode adjointe (cf. I.3.5.2) permet de calculer le gradient des fonctions aérodynamiques par rapport aux variables de forme à un coût de calcul comparable à une simulation directe. L'inclusion de cette information vectorielle dans la base d'échantillons (II.Article.II.D) permet d'améliorer significativement la précision globale des surfaces de réponse (II.Article.V), notamment lorsque la dimension du domaine d'étude est grande. Cependant, alors que le coût de calcul du Krigeage ne dépend que du nombre d'échantillons, n_s , le Cokrigeage direct comme le Cokrigeage indirect ont un coût croissant avec le nombre de variables (Equation II.Article.II.E.2). De ce fait, le coût de construction du Cokrigeage limite l'étendue des problèmes pouvant être abordés (dimension inférieure à 10). Pour contourner cette limitation, plusieurs solutions sont possibles.

II.3.3.1 Parallélisation du Cokrigeage

Une parallélisation de l'inversion de la matrice de corrélation permettrait de garder un temps de calcul constant en augmentant le nombre de processeurs lorsque la dimension du problème croît. Cette voie n'a pas pu être explorée dans le cadre de cette thèse.

II.3.3.2 Cokrigeage indirect tronqué en direction

Dans sa thèse, Liu [76] recommande d'utiliser un Cokrigeage indirect tronqué en direction. Au lieu de rajouter en chaque échantillon un point par direction comme pour le Cokrigeage indirect, cette formulation ne prend pas en compte toutes les directions du vecteur gradient mais seulement une seule direction par échantillon, quelque soit la dimension du vecteur gradient. Le coût de calcul reste donc maîtrisé, mais une grande partie de l'information disponible est inutilisée. Son argument principal vient du fait que l'agglomération de points lors de l'augmentation de la base d'échantillons du Cokrigeage indirect induit un mauvais conditionnement de la matrice de corrélation (Equation II.Article.II.E.1). A en juger par les trois cas tests analytiques en dimension 1 à 15 effectués, ce mauvais conditionnement rend le Cokrigeage indirect tronqué en direction plus précis que le Cokrigeage indirect complet.

II.3.3.3 Cokrigeage indirect tronqué en échantillon

La formulation de Cokrigeage indirect tronqué en échantillon a été établie dans le cadre de cette thèse à travers les travaux présentés au chapitre IV. Cela consiste à inclure l'information complète du gradient, mais seulement en un nombre fixé, n_{aug} , d'échantillons appelés échantillons augmentés. Cette formulation a deux avantages :

- le coût de calcul du Cokrigeage reste maîtrisé en agissant sur le nombre d'échantillons augmentés,
- le coût de calcul de l'évaluateur est diminué, car le calcul du gradient n'est pas nécessaire en tous les échantillons.

A partir de la règle recommandant une taille d'échantillonnage d'environ 10 points par direction (cf. II.3.2.1), il semble qu'une bonne valeur par défaut est de choisir le nombre d'échantillons augmentés égale à 10 ($n_{aug} = 10$). Par commodité, les échantillons qui sont augmentés sont les n_{aug} premiers de la base de données. Toutefois, il est possible de déterminer des schémas d'augmentation pour choisir avec précaution les échantillons qui seront augmentés. Par exemple, en II.Article.II.B.2 deux critères d'erreur non nuls aux points de construction ont été décrit. Il est donc possible d'augmenter les échantillons pour lesquels l'erreur semble maximale. Aussi, lors d'un processus de recherche de minimum, il est possible de choisir les échantillons à augmenter en prenant ceux pour lesquelles la fonction est minimale.

II.4 Bilan

Cette étude a tout d'abord permis d'implémenter une méthode d'interpolation de fonctions par Krigeage robuste. D'autre part, différents moyens d'accroître la précision globale (erreur moyenne sur le domaine) d'une surface de réponse ont été comparés.

Il semble que l'utilisation de méthodes d'échantillonnage itératives n'apportent pas de gain significatif par rapport aux méthodes classiques de remplissage d'espace. De plus, aucune méthode ne permet d'obtenir une erreur moyenne inférieure à un pourcent, même en considérant une densité de huit points de construction par direction (64 échantillons en dimension deux).

L'interpolation de vecteurs gradients par une méthode de Cokrigeage améliore nettement la précision. Toutefois, cette amélioration s'observe principalement pour les échantillonnages très peu denses, lorsque l'erreur globale est élevée. Comme le coût de calcul du Cokrigeage augmente avec la quantité d'information contenue dans la base de données d'échantillons, il devient impossible de le calculer lorsque la dimension est grande.

Pour pallier ce coût, il faut limiter la quantité d'information interpolée, soit en utilisant seulement certains coefficients du vecteur gradient (Cokrigeage indirect tronqué en direction), soit en utilisant le vecteur gradient en un nombre très restreint d'échantillons (Cokrigeage indirect tronqué en échantillon).

Finalement, la seule solution pour obtenir une surface de réponse globale (fiable sur tout le domaine) semble donc d'utiliser un nombre considérable d'échantillons. Il n'est pas possible d'établir une relation générale indiquant un nombre minimal d'échantillons en fonction de la dimension du problème. Des recommandations ont toutefois été décrites, telle que la règle empirique recommandant une taille minimale de 10 points par direction.

Lorsque cette règle n'est pas respectée, il faudra alors prendre soin de valider les résultats obtenus à partir de la surface de réponse. Pour cela, la prédiction d'erreur pourra être utilisée (cf. III). Aussi, lorsqu'il est possible d'identifier *a priori* certaines zones privilégiées, une distribution non uniforme pourra permettre de concentrer l'information là où elle est nécessaire [60]. Enfin, la mise en place d'un processus d'échantillonnage itératif *a posteriori* dans le but de trouver précisément le minimum de la fonction sera considéré au chapitre IV.

Lire
la seconde partie
de la thèse

Chapitre III - Optimisation fluide
structure biniveau par surfaces
de réponse globales