HAL open science

Contributions à la quantification et à la propagation des incertitudes en mécanique numérique

Anthony Nouy

▶ To cite this version:

Anthony Nouy. Contributions à la quantification et à la propagation des incertitudes en mécanique numérique. Mécanique [physics.med-ph]. Université de Nantes, 2008. tel-00422364

HAL Id: tel-00422364

https://theses.hal.science/tel-00422364v1

Submitted on 6 Oct 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches

Contributions à la quantification et à la propagation des incertitudes en mécanique numérique.

Anthony NOUY

GeM - UMR CNRS 6183, Université de Nantes, Centrale Nantes

Présenté le 10 décembre 2008
à l'Université de Nantes

JURY

Président et Rapporteur

Yvon MADAY	Université Pierre & Marie Curie, Paris

Rapporteurs

Roger GHANEM	University of Southern California, Los Angeles
Adnan IBRAHIMBEGOVIC	Ecole Normale Supérieure de Cachan, Cachan

Examinateurs

Pierre LADEVEZE	Ecole Normale Supérieure de Cachan, Cachan
Nicolas MOES	Ecole Centrale Nantes, Nantes

Table des matières

Table des matières **3**

Introduction **5**

I Méthodes de calcul stochastique **7**
1 Cadre d'étude 8
2 Méthodes de calcul stochastique 9
3 Représentation fonctionnelle des variables aléatoires 19
4 Méthodes spectrales stochastiques de type Galerkin 24

II Méthode de décomposition spectrale généralisée pour la résolution d'équations stochastiques **33**
1 Problématique et contexte scientifique 35
2 Méthode de décomposition spectrale généralisée (GSD) 36
3 Algorithmes pour la construction de la GSD 40
4 Application à un problème d'élasticité 45
5 Applications à un problème de thermique instationnaire 52
6 Application aux problèmes non-linéaires 58
7 Conclusions et perspectives 60

III Méthodes éléments finis stochastiques pour la prise en compte d'incertitudes géométriques **63**
1 Problématique et contexte scientifique 65
2 Formulation d'un problème défini sur un domaine aléatoire 65
3 Méthodes éléments finis stochastiques : approches classiques 67
4 Reformulation et approximation du problème sur un domaine fictif déterministe 70
5 Représentation de la géométrie à l'aide de fonctions de level-sets 77
6 Résolution numérique de problèmes définis sur des domaines aléatoires 80
7 Problèmes à interfaces matérielles aléatoires 86
8 Conclusions et perspectives 94

IV Quantification des incertitudes **95**
1 Problématique et contexte scientifique 96
2 Modélisation probabiliste 97
3 Représentation fonctionnelle des incertitudes et méthodes d'identification 99
4 Identification de lois multi-modales par développement conditionnel sur la chaos polynomial 105
5 Application à l'identification de formes aléatoires 110
6 Conclusions et perspectives 116

Conclusion **117**

A Représentation et discrétisation des processus ou champs stochastiques **119**
1 Définition et caractérisation des processus stochastiques 119
2 Décomposition de Karhunen-Loève 120
3 Décomposition de Hilbert-Karhunen-Loève 121
4 Décomposition sur le chaos polynômial 122

B Aspects techniques de la méthode GSD **123**
1 Notations préliminaires 123
2 Problèmes linéaires 125
3 Problèmes non-linéaires 127

C Paramétrisation de la variété de Stiefel compacte **129**
1 Le cas général $m \leqslant n$ 129
2 Le cas particulier $m = n$ 130
3 Le cas particulier $m = 1$ 130

Bibliographie **133**

Introduction

La simulation numérique des modèles physiques, favorisée par l'essor de la puissance des calculateurs, prend aujourd'hui une place très importante dans des prises de décision qui peuvent avoir des conséquences majeures en termes économiques ou humains. La prise en compte des incertitudes inhérentes au modèle apparaît incontournable si l'on cherche à obtenir des prédictions numériques "fiables", exploitables dans un processus de conception ou une prise de décision. Deux types d'incertitudes sont généralement distinguées : les incertitudes intrinsèquement aléatoires, liées à la variabilité naturelle des phénomènes physiques considérés, et les incertitudes épistémiques, liées à une méconnaissance des modèles. Ces dernières sont par nature réductibles. Cependant, de part la complexité des phénomènes physiques, le manque d'observations ou encore la nécessité d'obtenir des modèles mathématiques simplifiés, leur prise en compte s'avère également essentielle afin d'augmenter le domaine de prédictibilité du modèle et ainsi de garantir une meilleure fiabilité des prédictions.

L'obtention de prédictions fiables demande tout d'abord une parfaite maîtrise du modèle conceptuel. En amont, ce modèle doit être construit de telle manière à reproduire fidèlement les observations ou plus précisément certaines quantités d'intérêt observées. Les modèles physiques, généralement bien maîtrisés dans le cadre déterministe, doivent alors être complétés par une modélisation pertinente des aléas. La modélisation probabiliste des incertitudes est incontestablement la voie la plus répandue et la plus aboutie d'un point de vue théorique et pratique. Dans de nombreux problèmes physiques, le modèle conceptuel peut alors être traduit par un ensemble d'équations aux dérivées partielles stochastiques (EDPS). En aval, un modèle numérique et des outils de résolution ad-hoc doivent être proposés afin de propager les incertitudes et d'estimer leur impact sur la réponse du modèle conceptuel. De nombreuses méthodes numériques ont été proposées pour la résolution des EDPS. L'application d'une de ces méthodes dépend des quantités d'intérêt à prédire et du degré de précision souhaité. Notamment, si on s'intéresse aux premiers moments statistiques de la réponse, des approches de perturbation ou des méthodes d'intégration directe (Monte-Carlo, quadratures, ...) peuvent être utilisées. Pour l'estimation de probabilité d'événement particulier, des techniques d'intégration directe peuvent encore être utilisées tant que les probabilités à estimer restent grandes. Pour l'estimation de la probabilité d'événement rares, des méthodes dédiées, appelées méthodes fiabilistes, sont plus adaptées. Cette dernière décennie, un intérêt croissant a été porté à des méthodes fournissant une caractérisation complète de la solution sous la forme d'un développement de la réponse sur des bases de fonctions appropriées. Ces méthodes, couramment baptisées "méthodes spectrales stochastiques", ont été initiées par les travaux de Ghanem et Spanos [63]. Issues d'un mariage fructueux de l'analyse fonctionnelle et de la théorie des probabilités, ces méthodes reposent sur des bases mathématiques fortes. Elles conduisent à des solutions d'une grande précision et surtout à une meilleure maîtrise des calculs : construction possible d'estimateurs d'erreur a posteriori, approximation adaptative. Le chapitre I donnera un apercu des méthodes de calcul stochastique classiques. On insistera plus particulièrement sur les méthodes spectrales et les outils de résolution associés, ce qui permettra de poser le cadre des contributions décrites dans les chapitres suivants.

Les méthodes spectrales stochastiques de type Galerkin, de part leur robustesse et leur précision, semblent aujourd'hui constituer une voie prometteuse pour la simulation numérique dans un contexte probabiliste. Plusieurs inconvénients freinent cependant l'utilisation de ces techniques et leur transfert vers des applications de grande taille : le temps de calcul, les capacités de stockage mémoire requises et le caractère "intrusif", nécessitant une bonne connaissance des équations régissant le modèle et l'éla-

boration de solveurs spécifiques à une classe de problèmes donnée. Un premier volet de mes travaux de recherche a consisté à proposer une stratégie alternative pour la résolution des EDPS permettant de lever ces inconvénients. L'approche développée, baptisée méthode de décomposition spectrale généralisée (GSD), consiste à rechercher une décomposition spectrale optimale de la solution sur une base réduite de fonctions, sans connaître la solution *a priori*. Elle peut être vue comme une méthode de réduction de modèle automatique. Cette nouvelle approche, en atteignant des gains significatifs en terme de temps de calcul et de stockage mémoire (facteur 100, 1000...), pourrait à terme permettre une application des approches de Galerkin à des problèmes de très grande taille. En découplant la résolution de problèmes déterministes et stochastiques, elle permet également de retrouver une part de non-intrusivité, autorisant dans certains cas l'utilisation de solveurs déterministes classiques bien maîtrisés. Les développements de cette méthode seront exposés dans le chapitre II.

Un deuxième volet de mes activités, exposé dans le chapitre III, a porté sur le développement d'une méthode de résolution d'EDPS pour le cas où l'aléa porte sur la géométrie. Dans le cadre des approches spectrales de type Galerkin, le traitement d'aléa sur l'opérateur et le second membre est en effet un aspect aujourd'hui bien maîtrisé. Par contre, le traitement de géométrie aléatoire reste un point encore très peu abordé mais qui peut susciter un intérêt majeur dans de nombreuses applications. Mes travaux ont consisté à proposer une extension de la méthode éléments finis étendus (X-FEM) au cadre stochastique. L'avantage principal de cette approche est qu'elle permet de traiter le cas de géométries aléatoires complexes, tout en évitant les problèmes liés au maillage et à la construction d'espaces d'approximation conformes. De plus, elle conduit à une représentation explicite de la solution en fonction des variables de bases caractérisant l'aléa sur la géométrie.

Ces deux premiers volets ne concernent que l'étape de prédiction numérique, ou de propagation des incertitudes. Mes activités de recherche apportent également quelques contributions à l'étape amont de quantification des incertitudes à partir de mesures ou d'observations. Elles s'insèrent dans le cadre de récentes techniques de représentation fonctionnelle des incertitudes. Mes contributions ont notamment porté sur le développement d'algorithmes efficaces pour le calcul de ces représentations. En particulier, ces travaux ont permis la mise au point d'une méthode d'identification de géométrie aléatoire à partir d'images, fournissant une description des aléas géométriques adaptée au calcul par la méthode proposée au chapitre III. Une autre contribution porte sur l'identification de lois multimodales par une technique de représentation fonctionnelle adaptée. Ces différentes contributions feront l'objet du chapitre IV.

Chapitre I

Méthodes de calcul stochastique

Ce chapitre présente un rapide apercu des principales méthodes de calcul dans un cadre probabiliste, en insistant sur les méthodes stochastiques spectrales, cadre de travail de mes activités de recherche.

Sommaire

1 Cadre d'étude **8**
- 1.1 Modélisation probabiliste des incertitudes 8
- 1.2 Cadre mathématique 8
- 1.3 "Discrétisation" des incertitudes 8

2 Méthodes de calcul stochastique **9**
- 2.1 Techniques d'intégration directe 9
- 2.2 Méthodes de perturbation, Décomposition de Neumann 12
- 2.3 Méthodes fiabilistes 14
- 2.4 Représentation fonctionnelle des quantités d'intérêt - Méthodes spectrales stochastiques 15

3 Représentation fonctionnelle des variables aléatoires **19**
- 3.1 Principes généraux 19
- 3.2 Approximation polynômiale 20
- 3.3 Approximations polynômiales par morceaux 23

4 Méthodes spectrales stochastiques de type Galerkin **24**
- 4.1 Equations aux dérivées partielles stochastiques 25
- 4.2 Approximation au niveau déterministe 27
- 4.3 Approximation de Galerkin 28
- 4.4 Techniques de résolution classiques 30

1 Cadre d'étude

De nombreux modèles physiques sont régis par des équations différentielles ou équations aux dérivées partielles. La prédiction de la réponse d'un modèle se ramène alors généralement à la recherche d'une fonction u, appartenant à un certain espace fonctionnel, et vérifiant un ensemble d'équations notées formellement :

$$\mathcal{A}(u) = b$$

où $\mathcal{A}$ est un opérateur différentiel et b un second membre reflétant les termes sources.

1.1 Modélisation probabiliste des incertitudes

Nous adoptons dans ce mémoire une vision probabiliste des incertitudes. La modélisation des incertitudes consiste alors à définir un espace de probabilité ad-hoc $(\Theta, \mathcal{B}, P)$, où Θ désigne l'espace des événements élémentaires, $\mathcal{B}$ une σ-algèbre définie sur Θ et P une mesure de probabilité[1]. L'incertitude (ou aléa) sur le modèle pourra être formalisée comme une dépendance de l'opérateur et du second membre du problème vis-à-vis de l'événement élémentaire $\theta \in \Theta$. La réponse u du modèle aléatoire sera donc une variable aléatoire, à valeur dans un certain espace fonctionnel, devant vérifier presque sûrement un ensemble d'équations notées formellement :

$$\mathcal{A}(u(\theta); \theta) = b(\theta) \tag{I.1}$$

Le choix de l'espace de probabilité de travail est un point crucial dans l'étape de modélisation. La question de l'identification des incertitudes à partir d'expériences sera abordée dans le chapitre IV.

1.2 Cadre mathématique

Le cadre mathématique pour l'étude du problème (I.1) (cadre fonctionnel, existence et unicité de solution) dépend notamment de la nature des incertitudes, qui conditionne le type de représentation de la solution aléatoire (espaces de variables aléatoires ad-hoc) et également les méthodes de résolution à mettre en oeuvre.

Une classe particulière de problèmes, couramment rencontrée dans les applications physiques, concerne le cas où les paramètres aléatoires et la solution du problème possèdent une variance finie [40, 16, 13, 15, 50, 108, 154]. Cette classe de problèmes, considérée dans ce mémoire, intervient lorsque les paramètres aléatoires du modèle sont modélisés par des variables aléatoires ou des processus (ou champs) stochastiques possédant des propriétés de régularité classiques. Ce cadre d'étude conduit à introduire comme espace de travail l'espace $L^2(\Theta, dP)$ des variables aléatoires du second ordre. On trouvera dans [19, 73, 23] un cadre de travail plus général, introduisant des espaces de variables aléatoires généralisées.

Une autre classe de problèmes concerne le cas des équations différentielles stochastiques [85, 127] ou des équations aux dérivées partielles stochastiques [165, 86, 138] forcées par un bruit blanc. Ce type de problèmes, qui ne fait pas l'objet de ce mémoire, concerne néanmoins de nombreuses applications en physique (théorie de la diffusion, ...), traitement du signal (filtrage, ...), contrôle optimal, économie, finance, ...

1.3 "Discrétisation" des incertitudes

La description mathématique des incertitudes demande *a priori* de définir un espace de probabilité de dimension infinie. Cependant, dans de nombreuses applications physiques, les incertitudes peuvent être correctement modélisées par un ensemble fini de variables aléatoires. Cela est le cas lorsque les incertitudes sur le modèle sont modélisées par un nombre fini de variables aléatoires scalaires ou de processus (ou champs) stochastiques, ces derniers étant réduits (ou discrétisés) par des techniques adaptées de décomposition spectrale (voir annexe A). On se ramènera donc en pratique à définir un contenu probabiliste à partir d'un nombre fini de variables aléatoires $\boldsymbol{\xi} : \theta \in \Theta \mapsto \boldsymbol{\xi}(\theta) \in \boldsymbol{\Xi} \subset \mathbb{R}^m$, définissant un nouvel espace de probabilité de dimension finie $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$, où $\boldsymbol{\Xi} = \boldsymbol{\xi}(\Theta)$, où $\mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}$ est

[1] Les notions élémentaires en probabilité [98, 99, 105] ne seront pas rappelées dans ce mémoire.

une σ-algèbre sur $\boldsymbol{\Xi}$ et où $P_{\boldsymbol{\xi}}$ est la mesure de probabilité associée à $\boldsymbol{\xi}$ (mesure image de P par $\boldsymbol{\xi}$). Une variable aléatoire pourra alors être considérée comme une fonction mesurable définie sur $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$. La réponse du modèle u sera donc naturellement cherchée comme une fonction de $\boldsymbol{\xi}$ et devra satisfaire presque sûrement le système d'équations :

$$\mathcal{A}(u(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi}) = b(\boldsymbol{\xi}) \tag{I.2}$$

2 Méthodes de calcul stochastique

De nombreuses méthodes de calcul stochastique ont été proposées pour la résolution du problème stochastique (I.2) ou plus particulièrement pour la recherche d'une description probabiliste d'une quantité d'intérêt $J(u)$. L'application de telle ou telle méthode dépend alors de la qualité souhaitée sur la prédiction et de la nature de l'information probabiliste recherchée : premiers moments de J (espérance $E(J)$, variance, ...), probabilité d'événements particuliers ($P(\{J > 0\})$, ...) ou encore description complète de la loi de probabilité P_J de J.

On donne dans ce paragraphe une vue d'ensemble des méthodes stochastiques classiques, en insistant sur leur cadre d'application, leurs avantages et leurs inconvénients.

2.1 Techniques d'intégration directe

Dans une analyse probabiliste, les quantités d'intérêt à prédire peuvent souvent s'écrire comme l'espérance d'une certaine fonctionnelle de la solution du modèle :

$$E(f(u(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi}))$$

L'évaluation d'une telle quantité demande donc le calcul d'une intégrale par rapport à la mesure de probabilité $P_{\boldsymbol{\xi}}$:

$$E(f) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} f(u(\mathbf{y}); \mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} f(u(\mathbf{y}); \mathbf{y}) p_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

où $p_{\boldsymbol{\xi}}$ désigne la fonction de densité de probabilité de $\boldsymbol{\xi}$. Différentes méthodes d'intégration numériques peuvent être envisagées. En pratique, toutes ces méthodes d'intégration se ramènent à une formule du type

$$E(f) \approx Q_K(f) = \sum_{k=1}^{K} f(u(\mathbf{y}_k); \mathbf{y}_k) \omega_k$$

où les $\omega_k \in \mathbb{R}$ et les $\mathbf{y}_k \in \boldsymbol{\Xi}$ désignent respectivement les poids et points d'intégration. Une telle démarche d'intégration directe demande donc l'évaluation de la réponse du modèle pour K réalisations $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{y}_k$ des variables aléatoires de base. Le calcul de ces réponses $\{u(\mathbf{y}_k)\}_{k=1}^{K}$ nécessitent la résolution de K problèmes déterministes indépendants :

$$\mathcal{A}(u(\mathbf{y}_k); \mathbf{y}_k) = b(\mathbf{y}_k)$$

L'intérêt de ces approches est de pouvoir utiliser des méthodes numériques déterministes bien maîtrisées. De plus, les problèmes étant indépendants, une parallélisation massive des K résolutions est possible. Cependant, pour obtenir une bonne précision de l'estimation $Q_K(f)$, le nombre de points K peut être très grand et dépend des propriétés de la fonction à intégrer.

2.1.1 Monte-carlo

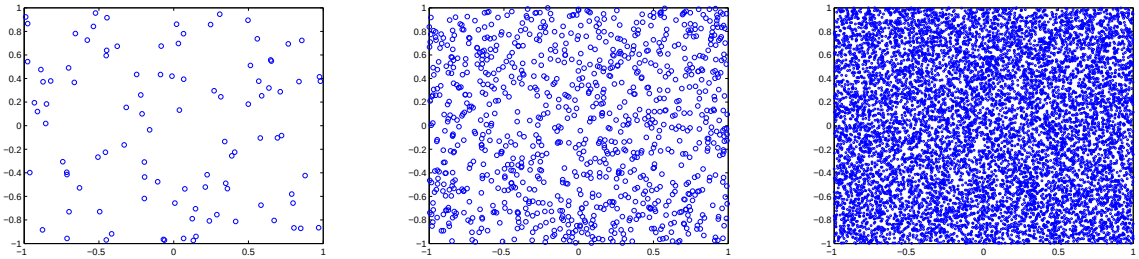
La méthode de Monte-Carlo [28, 146] consiste à choisir pour les points d'intégration K réalisations aléatoires (ou en pratique pseudo-aléatoires) indépendantes des variables $\boldsymbol{\xi}$ (voir exemple figure I.1). Les poids sont choisis égaux à $\omega_k = \frac{1}{K}$.

L'estimation $Q_K(f)$ est alors une variable aléatoire et l'erreur d'intégration tend asymptotiquement vers une variable aléatoire gaussienne[2][3] :

$$E(f) - Q_K(f) \sim K^{-1/2} \sigma_f N(0, 1)$$

[2] Simple application de la loi des grands nombres

[3] $N(0, 1)$ désigne une variable aléatoire gaussienne de moyenne nulle et d'écart-type unitaire



(a) $K = 100$ (b) $K = 1000$ (c) $K = 10000$

FIG. I.1 – Monte-Carlo : points d'intégration sur $\Xi = [0,1]^2$ pour la mesure uniforme

où σ_f est l'écart-type de f. L'estimation étant aléatoire, une prédiction ne pourra être fournie qu'avec un certain niveau de confiance. L'écart-type de l'estimation vaut $K^{-1/2}\sigma_f$. Le taux de convergence en $O(K^{-1/2})$ de cette estimation est indépendant de la dimension stochastique m, ce qui rend l'utilisation de cette approche possible dans le cas d'une très grande dimension stochastique. La convergence s'avère cependant très lente.

De nombreuses améliorations de la méthode de Monte-Carlo ont été proposées. Elles reposent sur une modification des échantillons générés (Antithetic variables, Stratified Sampling, Matching Moment methods, ...) ou une modification de la fonction à intégrer (Importance sampling, Control Variates, ...) afin de réduire sa variance et ainsi d'augmenter la précision.

2.1.2 Quasi Monte-Carlo

Les méthodes Quasi-Monte-Carlo [28, 117] consistent à choisir les points $\{\mathbf{y}_k\}_{k=1}^K$ à partir de séries "à faibles discrépance" et à prendre comme poids $\omega_k = \frac{1}{K}$. On suppose que le domaine d'intégration est $\Xi = [0,1]^m$ et que la mesure $P_{\boldsymbol{\xi}}$ est uniforme. Cela est toujours possible à un changement de variables aléatoires près. D'après le théorème de Koksma-Hlawka [28], on a la propriété

$$|E(f) - Q_K(f)| \leqslant V(f) D_K$$

où $V(f)$ est la variation totale de f et où D_K est la discrépance[4] de la série $\{\mathbf{y}_k\}$. Une série $\{\mathbf{y}_k\}_{k=1}^K$ est dite quasi-aléatoire si $D_K \leqslant c\, log(K)^n K^{-1}$, où c et n sont des constantes dépendant éventuellement de la dimension m. Généralement, $n = m$, ce qui conduit à l'estimation d'erreur classique des méthodes Quasi-Monte-Carlo :

$$|E(f) - Q_K(f)| \sim O(log(K)^m K^{-1})$$

qui donne un meilleur taux de convergence asymptotique que Monte-Carlo. On notera cependant qu'à K fixé, la précision est détériorée en grande dimension m. Quelques séquences quasi-aléatoires sont disponibles [117]. La figure I.2 illustre les points obtenus à partir de la séquence de Sobol. On peut observer une répartition très uniforme de la séquence.

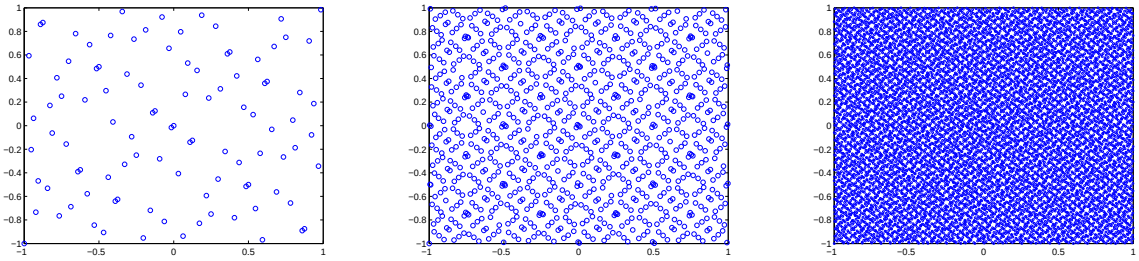
2.1.3 Tensorisation de quadratures classiques

Tensorisation pleine

Les techniques de quadrature classiques (Gauss, Clenshaw-Curtis, ...) peuvent également être utilisées [131]. On suppose ici les variables aléatoires indépendantes, si bien que $\Xi = \times_{i=1}^m \Xi_i$ et $P_{\boldsymbol{\xi}} = \otimes_{i=1}^m P_{\xi_i}$. Supposons que sur chaque dimension stochastique, on dispose d'une quadrature classique, notée $Q^{(i)}$, et définie par

$$Q^{(i)}(f) = \sum_{k=1}^{K_i} f(y_{i,k})\omega_{i,k} \approx \int_{\Xi_i} f(y) p_{\xi_i}(y) dy$$

[4] La discrépance d'une série peut s'interpréter comme l'erreur maximale pour l'approximation du volume d'hyper-rectangles de $[0,1]^m$ à partir des échantillons de cette série [28].



(a) $K = 100$ (b) $K = 1000$ (c) $K = 10000$

FIG. I.2 – Quasi-Monte Carlo : points d'intégration obtenus à partir de la séquence de Sobol sur $\Xi = [0,1]^2$ (mesure uniforme)

Une quadrature en dimension m peut alors être obtenue par tensorisation complète de ces quadratures uni-dimensionnelles :

$$Q_K = Q^{(1)} \otimes \ldots \otimes Q^{(m)}$$

avec

$$Q_K(f) = \sum_{k_1=1}^{K_1} \ldots \sum_{k_m=1}^{K_m} f(y_{1,k_1}, \ldots, y_{m,k_m}) \omega_{1,k_1} \ldots \omega_{m,k_m}$$

Pour des quadratures à $K_i = n$ points sur chaque dimension, on obtient un nombre de points total $K = n^m$ qui croît de manière exponentielle avec la dimension stochastique. L'erreur sur l'intégration vérifie alors, pour une fonction de classe $\mathcal{C}^r$:

$$|E(f) - Q_K(f)| \sim O\left(K^{-(2r-1)/m}\right)$$

On observe donc une nette détérioration de taux de convergence en K lorsque m augmente.

Tensorisation de Smolyak

Afin de diminuer le nombre de points d'intégration en grande dimension m, on peut recourir à une formule de tensorisation de Smolyak [153, 108]. Cela nécessite la définition d'une série de quadratures $\{Q_k^{(i)}\}_{k=1}^l$ suivant chaque dimension, où dans $Q_k^{(i)}$, k désigne le niveau de la quadrature. L'idée est de combiner des quadratures 1D en n'utilisant des quadratures de niveau élevé que suivant certaines dimensions. Une quadrature de niveau l en dimension m s'obtient alors par la formule de tensorisation suivante :

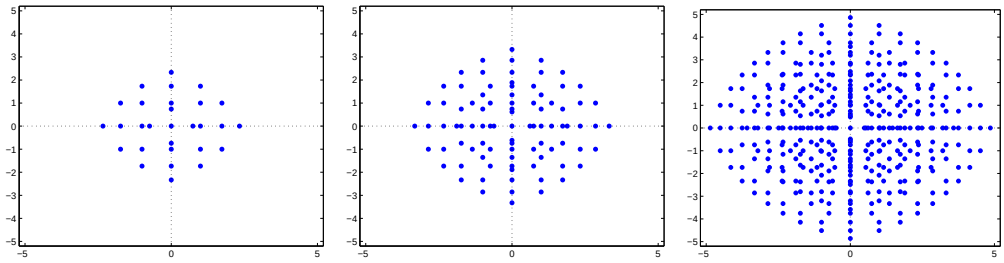
$$Q_K^l = \sum_{\substack{\boldsymbol{k} \in \mathbb{N}^m \\ l \leqslant |\boldsymbol{k}| \leqslant l+m-1}} (-1)^{l+m-1-|\boldsymbol{k}|} \begin{pmatrix} l-1 \\ |\boldsymbol{k}| - l \end{pmatrix} Q_{k_1}^{(1)} \otimes \ldots Q_{k_m}^{(m)}$$

Si les $Q_k^{(i)}$ désignent des quadratures à k points, on obtient un nombre de points d'intégration total $K \sim O(\frac{2^l}{l!} m^l)$ et une erreur qui pour une fonction de classe $\mathcal{C}^r$ se comporte en

$$|E(f) - Q_K^l(f)| \sim O\left(K^{-r} log(K)^{(m-1)(r+1)}\right)$$

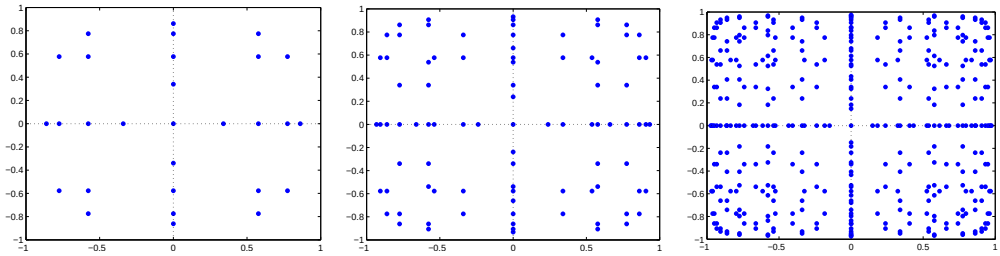
On observe donc un meilleur taux de convergence de cette quadrature. On observe notamment que la dimension stochastique ne détériore la convergence que par l'intermédiaire d'un terme en $log(K)$. Les figures I.3 et I.4 illustrent les points d'intégration obtenus par une formule de Smolyak associée à une quadrature de Gauss-Hermite et Gauss-Legendre. Ces quadratures de Gauss ont la propriété d'intégrer exactement des polynômes multi-dimensionnels de degré total inférieur ou égal à $(2l-1)$ tandis qu'une tensorisation pleine intègre exactement les polynômes multi-dimensionnels de degré marginal inférieur à $(2l-1)$.

Ces formules de tensorisation de Smolyak s'avèrent particulièrement intéressantes lorsque des quadratures imbriquées sont utilisées suivant chaque dimension (points d'intégration d'une quadrature



(a) $l = 4$, $K = 30$ (b) $l = 6$, $K = 91$ (c) $l = 10$, $K = 385$

FIG. I.3 – Tensorisation de Smolyak de quadratures de Gauss-Hermite. Quadrature de niveau l où les $Q_k^{(i)}$ sont des quadratures à k points.



(a) $l = 4$, $K = 30$ (b) $l = 6$, $K = 91$ (c) $l = 10$, $K = 385$

FIG. I.4 – Tensorisation de Smolyak de quadratures de Gauss-Legendre. Quadrature de niveau l où les $Q_k^{(i)}$ sont des quadratures à k points.

$Q_k^{(i)}$ inclus dans ceux de $Q_{k+1}^{(i)}$). Cela conduit à une réduction significative du nombre de points d'intégration. Dans ce cas, les grilles d'intégration obtenues sont appelées "grilles creuses" (*"sparse grids"*). Un autre grand intérêt de ces formules imbriquées est de réduire le coût d'une démarche d'intégration adaptative. En effet, lorsqu'on augmente le niveau de quadrature, les calculs effectuées sur des grilles de niveaux inférieurs peuvent être réutilisés. Plusieurs constructions de quadratures imbriquées sont disponibles : Newton-Cotes, Clenshaw-Curtis, Gauss-Patterson...

2.2 Méthodes de perturbation, Décomposition de Neumann

Lorsqu'on s'intéresse aux premiers moments statistiques de la solution, des approches alternatives à l'intégration directe peuvent être envisagées. Les méthodes de perturbation ou de décomposition de Neumann sont basées sur une représentation en série de la solution du problème (I.2).

2.2.1 Méthode de perturbation

La méthode de perturbation [84] consiste à rechercher un développement de Taylor de la solution autour de la moyenne $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\xi}} = E(\boldsymbol{\xi})$ des variables aléatoires :

$$\begin{aligned} u(\boldsymbol{\xi}) &= u(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\xi}}) + \sum_{i=1}^{m} (\xi_i - \mu_{\xi_i}) \frac{\partial u}{\partial \xi_i}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\xi}}) + \sum_{i,j=1}^{m} \frac{1}{2} (\xi_i - \mu_{\xi_i})(\xi_j - \mu_{\xi_j}) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_i \xi_j}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\xi}}) + \dots \\ &:= u_0 + \sum_{i=1}^{m} (\xi_i - \mu_{\xi_i}) u_{,i} + \sum_{i,j=1}^{m} \frac{1}{2} (\xi_i - \mu_{\xi_i})(\xi_j - \mu_{\xi_j}) u_{,ij} + \dots \end{aligned} \tag{I.3}$$

En opérant un développement similaire pour l'opérateur $\mathcal{A}(\cdot; \boldsymbol{\xi})$ et le second membre $b(\boldsymbol{\xi})$ et en injectant ces développements dans l'équation $\mathcal{A}(u(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi}) = b(\boldsymbol{\xi})$, on obtient que les termes du développement de

u sont solutions de la série de problèmes suivants :

$$\mathcal{A}_0(u_0) = b_0 \tag{I.4}$$
$$\mathcal{A}_0(u_{,i}) = b_{,i} - \mathcal{A}_{,i}(u_0), \quad i = 1...m \tag{I.5}$$
$$\mathcal{A}_0(u_{,ij}) = b_{,ij} - \mathcal{A}_{,i}(u_{,j}) - \mathcal{A}_{,j}(u_{,i}) - \mathcal{A}_{,ij}(u_0), \quad i,j = 1...m \tag{I.6}$$
$$\dots \tag{I.7}$$

Tous ces problèmes sont des problèmes déterministes avec un même opérateur déterministe $\mathcal{A}_0 = \mathcal{A}(\cdot;\boldsymbol{\mu_\xi})$. Le calcul des seconds membres nécessite de connaître les dérivées par rapport aux variables ξ_i de l'opérateur et du second membre. Ces calculs, relativement classiques en analyse de sensibilité, sont prévus dans certains codes de calcul commerciaux. Ils font généralement appel à des formules de dérivation numérique et sont souvent limités aux dérivées premières voire secondes. La méthode de perturbation, bien que permettant *a priori* une représentation complète de la solution, est donc souvent limitée à un faible ordre de décomposition (ordre 2) ce qui restreint son application au cas de faibles coefficients de variation des variables aléatoires d'entrée. Cette méthode est souvent utilisée pour estimer les deux premiers moments de la réponse (espérance, covariance), qui s'expriment simplement en fonction des termes du développement :

$$E(u) = u_0 + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{m} C_{\xi_i\xi_j}\, u_{,ij} + ... \tag{I.8}$$

$$E(u \otimes u) = \sum_{i,j=1}^{m} C_{\xi_i\xi_j}(u_{,i} \otimes u_{,j}) + ... \tag{I.9}$$

où $C_{\xi_i\xi_j}$ désigne la covariance des variables ξ_i et ξ_j.

2.2.2 Décomposition de Neumann

La méthode de décomposition de Neumann [63, 10] consiste à opérer la décomposition suivante

$$\mathcal{A}(\cdot;\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{A}_0 + \widetilde{\mathcal{A}}(\cdot;\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{A}_0(\mathcal{I} + \mathcal{A}_0^{-1}\widetilde{\mathcal{A}}(\cdot;\boldsymbol{\xi}))$$

où $\mathcal{A}_0$ est un opérateur déterministe, $\mathcal{A}_0^{-1}$ son inverse, et où $\mathcal{I}$ désigne l'opérateur identité. L'inverse de l'opérateur aléatoire $\mathcal{A}$, sous certaines réserves [10], peut alors s'écrire sous la forme :

$$\mathcal{A}^{-1}(\cdot;\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=0}^{\infty}(-1)^i(\mathcal{A}_0^{-1}\widetilde{\mathcal{A}}(\cdot;\boldsymbol{\xi}))^i\mathcal{A}_0^{-1} \tag{I.10}$$

si bien que la solution du problème (I.2) pourra s'écrire sous la forme d'une série :

$$u(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=0}^{\infty}(-1)^i u_i(\boldsymbol{\xi}) \tag{I.11}$$

où les termes de la série sont solutions des problèmes suivants :

$$\mathcal{A}_0(u_0(\boldsymbol{\xi})) = b(\boldsymbol{\xi}), \tag{I.12}$$
$$\mathcal{A}_0(u_i(\boldsymbol{\xi})) = \widetilde{\mathcal{A}}(u_{i-1}(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi}), \quad \textit{pour } i \geqslant 1 \tag{I.13}$$

Le calcul des termes de la série nécessite donc la résolution de problèmes déterministes à second membre aléatoire, tous ces problèmes étant associés à un même opérateur déterministe $\mathcal{A}_0$. Ce calcul s'avère cependant très coûteux [10]. Une telle approche sera de préférence utilisée pour une estimation des premiers moments de la solution. Par exemple, cette méthode a été utilisée dans [108] pour obtenir une estimation de l'opérateur de covariance de la solution, dans le but de construire une approximation de la base de décomposition spectrale de la solution.

Remarque I.1 (*Relation avec l'approche de perturbation*)

> *On peut aisément montrer que pour un second membre b déterministe et une dépendance linéaire de $\mathcal{A}(\cdot;\boldsymbol{\xi})$ en les variables ξ_i, la méthode de décomposition de Neumann correspond exactement à une méthode de perturbation.*

2.3 Méthodes fiabilistes

Dans une analyse fiabiliste, l'objectif est de calculer la probabilité $P_{\boldsymbol{\xi}}(D)$ d'un événement D particulier, conduisant à la défaillance d'un système. L'événement peut en général être caractérisé à partir d'une quantité d'intérêt $J(u(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi})$, l'événement "le système est défaillant" correspondant à des réalisations négatives de cette quantité. L'événement $D \subset \boldsymbol{\Xi}$, appelé "domaine de défaillance", est défini par $D = \{\boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\Xi}; J(u(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi}) < 0\}$ (voir figure I.5). La probabilité de cet événement est défini par :

$$P_{\boldsymbol{\xi}}(D) = \int_D dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y})$$

De nombreuses méthodes ont été proposées pour l'estimation de cette probabilité (voir [43, 109, 94] pour une présentation détaillée) et sont déjà implémentées dans des codes industriels. On présente ici quelques méthodes de base.

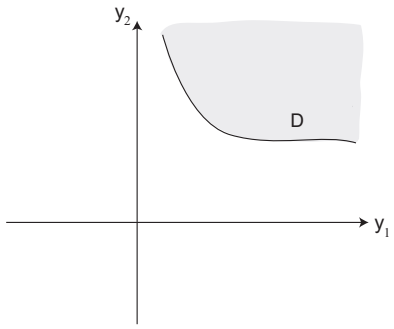


FIG. I.5 – Domaine de défaillance D dans $\boldsymbol{\Xi} \subset \mathbb{R}^2$.

First or Second Order Reliability Method (FORM/SORM)

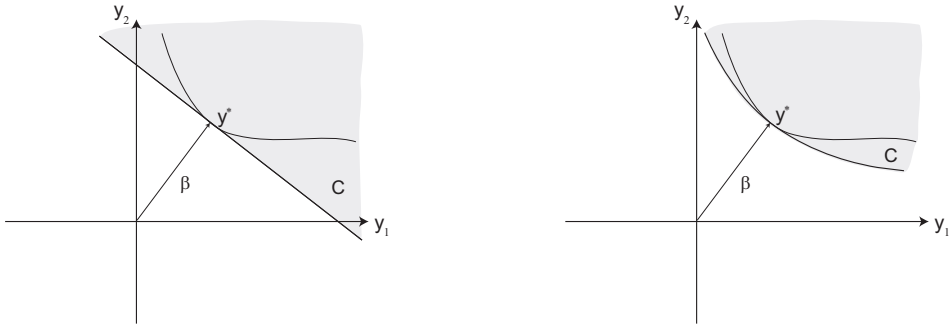
Dans le cas où la probabilité de D est faible ("événement rare"), les méthodes FORM ou SORM consistent à approcher le domaine de défaillance D par un domaine C plus simple, dont la probabilité $P_{\boldsymbol{\xi}}(C)$ peut être déterminée analytiquement (ou du moins simplement). Expliquons brièvement le principe de ces méthodes. On suppose que $\boldsymbol{\xi}$ est un vecteur de variables aléatoires gaussiennes centrées réduites indépendantes (hypothèse toujours possible à un changement de variables aléatoires près). On recherche alors le point défaillant $\mathbf{y}^* \in D \subset \boldsymbol{\Xi} = \mathbb{R}^m$ le plus probable, appelé "point de conception". Etant donné la forme de la distribution de probabilité gaussienne $p_{\boldsymbol{\xi}}$, ce point s'avère être le point du domaine de défaillance le plus proche de l'origine. Il est recherché en résolvant le problème d'optimisation suivant :

$$\mathbf{y}^* = \underset{\mathbf{y}\in D}{argmin}\ \|\mathbf{y}\|^2 = \underset{\substack{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^m \\ J(u(\mathbf{y});\mathbf{y})<0}}{argmin}\ \|\mathbf{y}\|^2 \tag{I.14}$$

Des algorithmes d'optimisation dédiés ont été proposés pour la résolution de ce problème. Pour des formes relativement simples du domaine D, ces algorithmes convergent généralement assez vite. Ils demandent alors l'évaluation de la fonctionnelle $J(u(\mathbf{y});\mathbf{y})$ en relativement peu de points $\mathbf{y}$, associés à des réalisations particulières de $\boldsymbol{\xi}$.

Ayant obtenu ce point de conception, la méthode FORM définit l'hyper-plan passant par le point $\mathbf{y}^*$ et orthogonal au vecteur $\mathbf{y}^*$. Cet hyper-plan définit un demi-espace C approchant le domaine D (voir figure I.6(a)). On montre alors que la probabilité $P_{\boldsymbol{\xi}}(C) = \Phi(-\beta)$, où Φ est la fonction de distribution de probabilité gaussienne standard et où β est l'indice de fiabilité, défini par $\beta = \pm\|\mathbf{y}^*\|$ (distance signée du point de conception à l'origine). Dans la méthode SORM standard, une meilleure estimation est obtenue en construisant un demi-espace C défini à partir de la paraboloïde tangente à D en $\mathbf{y}^*$ (figure I.6(b)). La probabilité peut alors être estimée par une formule approchée $P_{\boldsymbol{\xi}}(C) = \Phi(-\beta)\prod_{i=1}^m(1-\kappa_i\beta)^{-1/2}$, où les κ_i désignent les courbures principales de la paraboloïde.

Les approches FORM ou SORM permettent d'obtenir des coûts de calcul raisonnables (nombre réduit d'appels à des codes déterministes) mais présentent cependant quelques limitations. Notamment,



(a) FORM (b) SORM

FIG. I.6 – Méthodes FORM (a) et SORM (b) : approximation C du domaine de défaillance D et indice de fiabilité β

elles ne permettent pas de quantifier l'erreur sur l'estimation de la probabilité. De plus, elles s'avèrent inadaptées aux cas de domaines de défaillance complexes (problème d'optimisation (I.14) possédant plusieurs minima locaux) et peuvent conduire à une mauvaise estimation de la probabilité.

Monte-Carlo, Importance Sampling

On peut également imaginer l'utilisation d'une méthode d'intégration directe (voir section 2.1) en interprétant le calcul de $P_{\boldsymbol{\xi}}(D)$ comme le calcul d'une espérance :

$$P_{\boldsymbol{\xi}}(D) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} 1_D(\mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}) = E(1_D(\boldsymbol{\xi}))$$

où 1_D est la fonction indicatrice du domaine D. Ces techniques ont l'avantage de fournir une estimation maîtrisée de la probabilité.

L'utilisation d'une approche de Monte-Carlo standard s'avère ici prohibitive. On peut le comprendre intuitivement en observant la figure I.7(a), qui illustre bien que de nombreux tirages de Monte-Carlo seront nécessaires afin d'obtenir assez de tirages dans D. Le coefficient de variation de l'estimation de Monte-Carlo $Q_K(1_D)$ est de l'ordre de $(KP_{\boldsymbol{\xi}}(D))^{-1/2}$ pour de faibles probabilités $P_{\boldsymbol{\xi}}(D)$. Pour obtenir un coefficient de variation souhaité ϵ de l'estimateur, on devra donc choisir un nombre de tirages très grand $K \approx \epsilon^{-2} P_{\boldsymbol{\xi}}(D)^{-1}$.

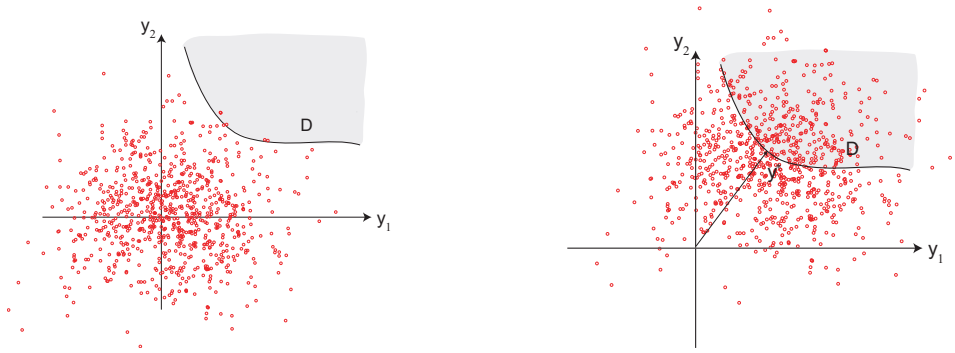
Une amélioration possible consiste à utiliser la méthode d'Importance Sampling. Cette méthode consiste à réécrire l'espérance $E(1_D(\boldsymbol{\xi}))$ sous la forme suivante :

$$E(1_D(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} 1_D(\mathbf{y}) \frac{p_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y})}{p_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y})} p_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = E(1_D(\boldsymbol{\eta}) \frac{p_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\eta})}{p_{\boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{\eta})}) := E(g(\boldsymbol{\eta}))$$

où $p_{\boldsymbol{\eta}}$ est une densité de probabilité bien choisie afin d'obtenir une variance de $g(\boldsymbol{\eta})$ inférieure à celle de $1_D(\boldsymbol{\xi})$. La méthode de Monte-Carlo classique est alors utilisée pour estimer $E(g(\boldsymbol{\eta}))$ à partir de tirages pseudo-aléatoires de la variable $\boldsymbol{\eta}$, de densité de probabilité $p_{\boldsymbol{\eta}}$. Dans le cas d'un problème de fiabilité, une possibilité consiste à déterminer tout d'abord le point de conception $\mathbf{y}^*$ défini par (I.14) et à définir la densité $p_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{y}) = p_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y} - \mathbf{y}^*)$. En d'autres termes, cela s'interprète comme une approche de Monte-Carlo où les tirages sont réalisés autour du point de conception (figure I.7(b)). De nombreuses améliorations de cette technique d'Importance Sampling ont été proposées : Axis-Orthogonal Importance Sampling, Adaptive Importance Sampling, Radial Importance Sampling, ...

2.4 Représentation fonctionnelle des quantités d'intérêt - Méthodes spectrales stochastiques

Les méthodes présentées précédemment sont classiquement utilisées pour l'évaluation de prédictions telles que les moments d'une quantité d'intérêt, ou la probabilité d'événements particuliers. L'application de ces méthodes se trouve limitée par des hypothèses plus ou moins restrictives (importance des variabilités d'entrée, linéarité du problème, ...) mais surtout par le coût de calcul souvent



(a) Monte-Carlo (b) Importance Sampling

FIG. I.7 – Méthodes de simulation : Monte-Carlo standard (a), Important Sampling autour du point de conception $\mathbf{y}^*$

prohibitif engendré par l'évaluation de la réponse du modèle pour des réalisations particulières des variables d'entrée.

Une approche alternative consiste à rechercher une représentation fonctionnelle de la solution u, ou plus spécifiquement d'une quantité d'intérêt $J(u(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi})$, sous la forme d'un développement

$$J(u(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi}) \approx \sum_{\alpha\in\mathcal{J}_P} J_\alpha H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \tag{I.15}$$

où $\{H_\alpha(\boldsymbol{\xi})\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P}$ désigne une certaine base connue de fonctions et où les J_α sont les coefficients à déterminer. Cette approche peut être interprétée comme une méthode de construction d'une surface de réponse du modèle. Connaissant une représentation fonctionnelle (I.15) suffisamment précise, on peut alors opérer un post-traitement rapide de la solution (évaluation de réalisations, gradients, ...) et en déduire par des approches classiques et génériques des informations telles que les moments statistiques, voire une description complète et relativement précise de la loi de probabilité de J.

Depuis les travaux de Ghanem et Spanos [63], un intérêt croissant a été porté à ce type d'approches, couramment baptisées "approches spectrales stochastiques". Ces approches ne diffèrent que par le choix des bases de fonctions et par la définition (et donc le calcul) des coefficients de la décomposition. Ces approches feront l'objet de la suite de ce chapitre. Les choix possibles pour les bases de fonctions seront présentés dans le paragraphe 3. Pour la définition de l'approximation, on distingue deux types d'approches : les approches directes (projection L^2 ou régression) et les approches de type Galerkin au niveau stochastique.

2.4.1 Méthodes de Galerkin au niveau stochastique

Les approches de type Galerkin au niveau stochastique [63, 11, 108] reposent sur les mêmes fondements mathématiques que les approches de type Galerkin au niveau déterministe. Reposant sur des bases mathématiques fortes, elles permettent généralement une bonne maîtrise de l'approximation (estimation d'erreur a priori [40, 50], estimation d'erreur a posteriori et adaptativité [88, 106]) et s'avèrent souvent plus robustes et nettement plus efficaces que les approches directes. Cependant, elles nécessitent souvent une bonne connaissance des équations régissant le modèle physique et l'élaboration de solveurs spécifiques pour une classe de problèmes donnée.

De nombreux travaux récents concernent l'élaboration de solveurs efficaces et de démarches de résolution alternatives (objet du chapitre II). Ils permettent d'obtenir des réductions drastiques des coûts de calcul et font de ces méthodes de Galerkin des outils prédictifs extrêmement performants. Ces méthodes ont été appliquées à des domaines très variés de la physique (mécanique, chimie, électromagnétisme, ...). Leur transfert dans les codes industriels, actuellement en cours pour certains types

d'applications, nécessitera encore de nouvelles avancées méthodologiques pour pouvoir traiter efficacement une large gamme de problèmes d'intérêt.

Le principe de ces méthodes de Galerkin et les techniques de résolution classiques seront détaillés dans le paragraphe 4.

2.4.2 Méthodes directes : projection, régression, interpolation

Les approches de projection L^2, de régression ou d'interpolation utilisent une définition différente des coefficients de la décomposition. Leur calcul ne nécessite alors que la résolution de problèmes déterministes découplés. Elles ne nécessitent donc *a priori* aucun développement logiciel spécifique, dans la mesure où les codes déterministes sont disponibles. Ces approches peuvent être vues comme des alternatives aux méthodes directes de calcul telles que les approches de Monte-Carlo. Tout comme les approches de Monte-Carlo, elles peuvent cependant nécessiter la résolution d'un grand nombre de calculs et ainsi engendrer des coûts de calcul prohibitifs. On explique ici les principes, avantages et inconvénients de ces approches.

Projection L^2

La méthode de projection L^2 [64, 92, 93, 134, 25] consiste à définir l'approximation (I.15) comme la projection de J sur le sous-espace de $L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ engendré par les fonctions $\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P}$, la projection étant définie au sens du produit scalaire naturel de $L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$:

$$< v, w >_{L^2(\Xi,dP_{\boldsymbol{\xi}})} = E(v(\boldsymbol{\xi})w(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\Xi} v(\mathbf{y})w(\mathbf{y})dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y})$$

En notant $\|v\|_{L^2(\Xi,dP_{\boldsymbol{\xi}})} = E(v(\boldsymbol{\xi})^2)^{1/2}$ la norme associée, les coefficients sont définis par

$$\{J_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P} = \underset{\{J_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P}}{argmin} \ \|J - \sum_{\alpha\in\mathcal{J}_P} J_\alpha H_\alpha\|^2_{L^2(\Xi,dP_{\boldsymbol{\xi}})} \tag{I.16}$$

L'utilisation de fonctions de base $\{H_\alpha\}$ orthonormées conduit à la définition suivante des coefficients :

$$J_\alpha =< J, H_\alpha >_{L^2(\Xi,dP_{\boldsymbol{\xi}})} = E(J(u(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi})H_\alpha(\boldsymbol{\xi})) \tag{I.17}$$

Le calcul des coefficients se ramène donc au calcul d'une intégrale sur Ξ muni de la mesure $dP_{\boldsymbol{\xi}}$. On peut alors utiliser une des techniques d'intégration standards introduites dans le paragraphe 2.1, conduisant à l'estimation suivante des coefficients :

$$J_\alpha \approx \sum_{k=1}^{K} \omega_k J(u(\mathbf{y}_k);\mathbf{y}_k)H_\alpha(\mathbf{y}_k)$$

Tout comme les approches d'intégration directe, cette approche nécessite la résolution de K problèmes déterministes pour estimer les quantités $J(u(\mathbf{y}_k);\mathbf{y}_k)$, associées à des réalisations particulières $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{y}_k$. On parle alors de méthode de projection "non-intrusive" dans le sens où cette méthode permet d'utiliser des solveurs classiques pour la résolution des problèmes déterministes.
Cette approche, certes très générique, nécessite un soin particulier dans le choix de la méthode d'intégration. L'utilisation d'une technique d'intégration précise est souvent nécessaire, ce qui peut conduire à la résolution d'un très grand nombre de problèmes déterministes. On peut bien sûr imaginer l'utilisation d'une intégration de Monte-Carlo. Cependant, pour un calcul précis des coefficients, cette intégration peut nécessiter un grand nombre d'évaluations en raison de la grande variance de la fonction $(J(u(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi})H_\alpha(\boldsymbol{\xi}))$. On optera donc généralement pour des techniques de quadrature d'ordre élevé (creuse en grande dimension stochastique [80, 108]) afin de limiter le nombre de points d'intégration. La régularité de la fonction (JH_α) n'étant pas connue *a priori*, il sera souvent nécessaire d'utiliser des méthodes de quadrature adaptative[5]. Le développement de stratégies d'intégration adaptative robustes reste encore un challenge dans le cadre des méthodes directes de projection, de même que la définition d'estimateurs d'erreur rigoureux sur la représentation fonctionnelle obtenue. L'absence d'estimateurs d'erreur rigoureux est d'ailleurs plus généralement une lacune des méthodes de calcul non-intrusives (projection, regression).

[5] On utilisera de préférence des quadratures imbriquées afin de pouvoir ré-exploiter les résolutions déjà effectuées

Régression

Les méthodes de régression [34, 33, 21, 22, 159] reposent sur les mêmes principes que les méthodes de construction de surface de réponse [82]. Elles consistent à définir les coefficients de la décomposition par le problème d'optimisation suivant :

$$\{J_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P} = \underset{\{J_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P}}{argmin} \sum_{k=1}^{K} \omega_k \left(J(u(\mathbf{y}_k);\mathbf{y}_k) - \sum_{\alpha\in\mathcal{J}_P} J_\alpha H_\alpha(\mathbf{y}_k) \right)^2 \tag{I.18}$$

où les ω_k et $\mathbf{y}_k$ sont respectivement les poids et points de la régression. En notant $\mathsf{J} = (\dots J_\alpha \dots) \in \mathbb{R}^P$ l'ensemble des coefficients à déterminer, le problème d'optimisation se ramène à la résolution d'un système linéaire

$$\mathsf{HJ} = \mathsf{Z}, \quad (\mathsf{H})_{\alpha\beta} = \sum_{k=1}^{K} \omega_k H_\alpha(\mathbf{y}_k) H_\beta(\mathbf{y}_k), \quad (\mathsf{Z})_\alpha = \sum_{k=1}^{K} \omega_k H_\alpha(\mathbf{y}_k) J(u(\mathbf{y}_k);\mathbf{y}_k) \tag{I.19}$$

Les méthodes de régression, tout comme l'approche de projection L^2, ne nécessitent donc que la résolution de problèmes déterministes découplés (associés aux différentes réalisations $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{y}_k$) afin de construire le second membre de ce système. Le choix des points et poids de régression est cependant un point délicat, d'autant plus que la régularité de la fonction J n'est pas connue *a priori*. De nombreux choix ont été proposés : tirages de Monte-Carlo ou Quasi-Monte-Carlo pour $\mathbf{y}_k$ et $\omega_k = \frac{1}{K}$, points et poids d'une quadratures de Gauss pour $\mathbf{y}_k$ et ω_k (ou sous-ensemble de ces points), ... On pourra trouver une étude détaillée de ces différents choix (précision de la solution, impact sur le conditionnement du système, ...) dans [21]. Des démarches de construction adaptive des bases fonctionnelles ont été proposées dans ce contexte [24].

Remarque I.2 (*Connexion avec l'approche de projection*)

Il faut noter que la plupart des choix utilisent pour les $\mathbf{y}_k$ et ω_k les points et poids de méthodes d'intégration standards. En introduisant le "produit scalaire numérique"

$$< v, w >_K := \sum_{k=1}^{K} \omega_k v(\mathbf{y}_k) w(\mathbf{y}_k)$$

et la norme associée $\|v\|_K =< v, v >_K^{1/2}$, on peut donc interpréter le problème de régression (I.18) comme la projection de J sur le sous-espace de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ engendré par les fonctions $\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P}$, au sens du produit scalaire numérique $< \cdot, \cdot >_K$. En fait, les composantes $(\mathsf{H})_{\alpha\beta}$ de la matrice sont alors les produits scalaires approchés des fonctions de base : $(\mathsf{H})_{\alpha\beta} =< H_\alpha, H_\beta >_K$. Si la quadrature utilisée intègre exactement ces composantes, on a donc complète équivalence avec l'approche de projection L^2 classique.

Interpolation/Collocation

Les méthodes d'interpolation [14] consistent à choisir pour $\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P}$ une base de fonctions d'interpolation associées à un ensemble de points $\{\mathbf{y}_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_P}$. Le coefficient u_α de la décomposition de u est alors obtenu en résolvant un problème déterministe associé à la réalisation $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{y}_\alpha$. The méthodologie résultante est aussi appelée méthode de "collocation stochastique". Dans le cas d'une grande dimension stochastique, des tensorisations de Smolyak de bases d'interpolation uni-dimensionnelles ont été proposées [48]. La propriété d'interpolation de la base polynômiale multi-dimensionnelle ainsi obtenue est préservée si des grilles d'interpolation imbriquées sont utilisées dans la formule de tensorisation de Smolyak. Notons que lorsqu'on utilise comme base d'interpolation les polynômes de Lagrange associés aux points d'une quadrature de Gauss classique, la decomposition obtenue coincide avec celle obtenue par une méthode de projection L^2 utilisant cette quadrature.

3 Représentation fonctionnelle des variables aléatoires

Pour un problème physique donné, lorsque les incertitudes sont modélisées par un nombre fini de variables aléatoires $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, ..., \xi_m)$, on est amené à travailler dans un espace de probabilité de dimension finie $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$, où $\boldsymbol{\Xi} \subset \mathbb{R}^m$. Une quantité d'intérêt aléatoire sera alors interprétée comme une variable aléatoire définie sur $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$ ou en d'autres termes comme une fonction mesurable définie sur cet espace. Dans de nombreux problèmes physiques, les quantités d'intérêt sont des variables aléatoires du second ordre, ce qui conduit naturellement à introduire l'espace de fonctions de carré intégrable $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$. Cette vision fonctionnelle permet alors de proposer des méthodes de représentation fonctionnelle de quantités d'intérêt en s'inspirant de constructions classiques en analyse fonctionnelle et en théorie de l'approximation. En supposant que $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}_P}$ désigne une base d'approximation de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$, on pourra représenter une quantité d'intérêt $v(\boldsymbol{\xi})$ sous la forme

$$v(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_P} v_\alpha H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \tag{I.20}$$

De nombreux choix ont été proposés pour la construction des bases de fonctions de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$. Les choix classiques s'appuient sur des constructions classiques de bases polynômiales (chaos polynômial [169, 29, 63], chaos polynômial généralisé [171], interpolants de Lagrange [14]) ou polynômiales par morceaux (éléments finis [40, 167], ondelettes [90, 91]). Une vision générique de cette problématique et l'extension des constructions précédentes au cas de mesures de probabilité arbitraires est introduite dans [155]. Le choix d'une représentation particulière dépend des propriétés de régularité des fonctions à représenter. Certains de ces choix (éléments finis, ondelettes) permettent d'envisager des démarches d'approximation adaptative.

3.1 Principes généraux

3.1.1 Espace de Hilbert des fonctions de carré intégrable

L'espace des fonctions de carré intégrable définies sur l'espace de probabilité $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$ est défini par :

$$L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}) = \{v : \boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\Xi} \mapsto v(\boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{R}; E(v^2) := \int_{\boldsymbol{\Xi}} v(\mathbf{y})^2 dP_\xi(\mathbf{y}) < \infty\}$$

Muni du produit scalaire naturel suivant, c'est un espace de Hilbert :

$$< v, w >_{L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})} = E(vw) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} v(\mathbf{y}) w(\mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y})$$

On appelle base hilbertienne $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$ de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ une famille complète de fonctions orthonormées, vérifiant les propriétés suivantes :

$$< H_\alpha, H_\beta >_{L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})} = \delta_{\alpha\beta} \tag{I.21}$$

$$\forall v \in L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}), \quad < H_\alpha, v >= 0 \; \forall \alpha \in \mathcal{I} \Rightarrow v = 0 \tag{I.22}$$

Sur une telle base, toute fonction $v \in L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ admet une décomposition unique

$$v = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} v_\alpha H_\alpha, \tag{I.23}$$

$$v_\alpha =< v, H_\alpha >_{L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})} = E(v(\boldsymbol{\xi}) H_\alpha(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} v(\mathbf{y}) H_\alpha(\mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}) \tag{I.24}$$

3.1.2 Cas de variables aléatoires de base indépendantes : tensorisation de bases

Dans le cas où les variables aléatoires ξ_i sont indépendantes, la construction des bases d'approximation peut se ramener à une construction uni-dimensionnelle. En effet, si on note $(\Xi_i, \mathcal{B}_{\Xi_i}, P_{\xi_i})$ l'espace de probabilité uni-dimensionnel associé à la variable ξ_i (où P_{ξ_i} désigne la mesure de probabilité marginale associée à ξ_i), on a

$$\boldsymbol{\Xi} = \Xi_1 \times ... \times \Xi_m, \quad P_{\boldsymbol{\xi}} = \otimes_{i=1}^m P_{\xi_i}, \quad L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}) = \otimes_{i=1}^m L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i}) \tag{I.25}$$

Des bases de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ peuvent alors s'obtenir par tensorisation de bases des espaces $L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})$. En notant $\{h_n^{(i)}\}_{n\in\mathcal{J}^{(i)}}$ une base de $L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})$, on posera

$$H_\alpha(\mathbf{y}) = h_{\alpha_1}^{(1)}(y_1)\dots h_{\alpha_m}^{(m)}(y_m)$$

avec $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m) \in \mathcal{J} = \mathcal{J}^{(1)} \times \dots \times \mathcal{J}^{(m)}$. Si les bases $\{h_n^{(i)}\}_{n\in\mathcal{J}^{(i)}}$ sont orthonormées pour le produit scalaire naturel de $L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})$, la base $\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}}$ est orthonormée :

$$< H_\alpha, H_\beta >_{L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})} = \prod_{i=1}^m < h_{\alpha_i}^{(i)}, h_{\beta_i}^{(i)} >_{L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})} = \prod_{i=1}^m \delta_{\alpha_i\beta_i} := \delta_{\alpha\beta}$$

3.1.3 Cas de variables aléatoires de base dépendantes

Dans le cas où les variables aléatoires ξ_i sont dépendantes, la construction précédente par tensorisation de bases uni-dimensionnelles n'est plus possible puisque l'espace $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ n'a plus la structure d'un produit tensoriel d'espaces. Dans [155], la construction suivante est proposée. On commence par définir comme précédemment des bases $\{h_n^{(i)}\}_{n\in\mathcal{J}^{(i)}}$ de $L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})$. Une base $\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}}$ de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ peut alors être définie de la manière suivante :

$$H_\alpha(\mathbf{y}) = h_{\alpha_1}^{(1)}(y_1)\dots h_{\alpha_m}^{(m)}(y_m)\sqrt{\frac{p_{\xi_1}(y_1)\dots p_{\xi_m}(y_m)}{p_{\boldsymbol{\xi}}(y_1,\dots,y_m)}}$$

où $p_{\boldsymbol{\xi}}$ est la fonction de densité de probabilité jointe de $\boldsymbol{\xi}$ et où p_{ξ_i} désigne la fonction de densité de probabilité marginale de ξ_i.
Si les bases $\{h_n^{(i)}\}_{n\in\mathcal{J}^{(i)}}$ sont orthonormées, on conserve bien l'orthonormalité de la base $\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}}$. Cependant, si les bases uni-dimensionnelles sont polynômiales, les fonctions $\{H_\alpha\}$ ne seront en général pas polynômiales. On notera que dans le cas de variables indépendantes, la construction proposée coincide avec la construction classique par tensorisation.

3.2 Approximation polynômiale

3.2.1 Espaces de fonctions polynômiales

L'espace des polynômes multi-dimensionnels de degré p définis sur $\boldsymbol{\Xi} \subset \mathbb{R}^m$ est défini par :

$$\mathbb{Q}_p(\boldsymbol{\Xi}) = span\{\prod_{i=1}^m y_i^{\alpha_i}; \|\alpha\|_\infty := \underset{i\in\{1\dots m\}}{max}\ \alpha_i \leqslant p\}, \quad dim(\mathbb{Q}_p(\boldsymbol{\Xi})) = (p+1)^m$$

L'espace des polynômes multi-dimensionnels de degré total au plus p définis sur $\boldsymbol{\Xi} \subset \mathbb{R}^m$ est défini par :

$$\mathbb{P}_p(\boldsymbol{\Xi}) = span\{\prod_{i=1}^m y_i^{\alpha_i}; |\alpha| := \sum_{i=1}^m \alpha_i \leqslant p\}, \quad dim(\mathbb{P}_p(\boldsymbol{\Xi})) = \frac{(m+p)!}{m!p!}$$

Dans le cas $m = 1$, on a $\mathbb{P}_p(\Xi) = \mathbb{Q}_p(\Xi)$. Dans le cas $m > 1$, on a $\mathbb{P}_p(\Xi) \subset \mathbb{Q}_p(\Xi)$

Si $\boldsymbol{\Xi} = \Xi_1 \times \dots \times \Xi_m$, $\mathbb{Q}_p(\boldsymbol{\Xi})$ est une tensorisation "pleine" d'espaces de polynômes uni-dimensionnels de degré p :

$$\mathbb{Q}_p(\boldsymbol{\Xi}) = \mathbb{Q}_p(\Xi_1) \otimes \dots \otimes \mathbb{Q}_p(\Xi_m)$$

L'espace $\mathbb{P}_p(\boldsymbol{\Xi})$ peut être interprété comme une tensorisation partielle (ou creuse) des espaces de polynômes $\mathbb{Q}_p(\Xi_i)$:

$$\mathbb{P}_p(\boldsymbol{\Xi}) = \sum_{\alpha\in\mathbb{N}^m, |\alpha|=p} \mathbb{Q}_{\alpha_1}(\Xi_1) \otimes \dots \otimes \mathbb{Q}_{\alpha_m}(\Xi_m)$$

3.2.2 Chaos polynômial

La représentation sur le chaos polynômial consiste à construire des bases polynômiales orthonormées classiques de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$. Dans le cas où les variables sont indépendantes, les bases sont obtenues par tensorisation de bases polynômiales de $L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})$ (voir section 3.1.2). Le chaos polynômial de degré p en dimension m n'est autre que l'espace $\mathbb{P}_p(\boldsymbol{\Xi})$. On appelle chaos homogène de degré p en dimension m l'espace $\mathbb{H}_p$ défini comme étant le complément orthogonal de $\mathbb{P}_{p-1}(\boldsymbol{\Xi})$ dans $\mathbb{P}_p(\boldsymbol{\Xi})$. L'espace $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ admet alors la décomposition orthogonale suivante :

$$L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}) = \oplus_{p\in\mathbb{N}} \mathbb{H}_p$$

Voyons comment sont construites les bases de fonctions. Sur chaque dimension aléatoire, associée à une variable ξ_i, on introduit une base polynômiale orthonormée $\{h_n^{(i)}\}_{n\in\mathbb{N}}$ de $L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})$, où $h_n^{(i)} \in \mathbb{Q}_n(\Xi_i)$ désigne un polynôme de degré n. Ces polynômes, pour une mesure de probabilité P_{ξ_i} donnée, sont définis de manière unique et vérifient :

$$< h_n^{(i)}, h_l^{(i)} >_{L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})} = \int_{\Xi_i} h_n^{(i)}(y) h_l^{(i)}(y) dP_{\xi_i}(y) = \delta_{nl}$$

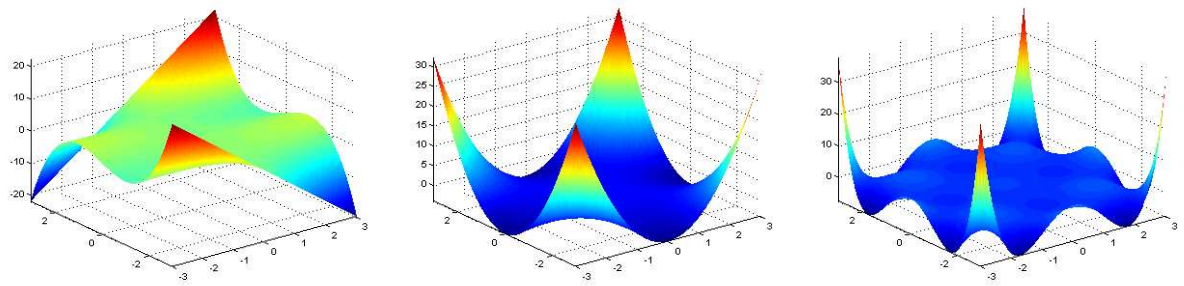
On recense dans le tableau suivant quelques exemples de lois de probabilité classiques et des polynômes orthogonaux associés :

Loi	Ξ	$p_\xi(y)$	Polynômes
Uniforme	$[-1, 1]$	$\frac{1}{2}$	Legendre
Gausienne	$\mathbb{R}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp(-\frac{y^2}{2})$	Hermite
Gamma	$[0, +\infty]$	$\frac{1}{\Gamma(a)} y^a exp(-y)$	Laguerre
Beta	$[-1, 1]$	$\frac{(1+y)^{a-1}(1-y)^{b-1}}{2^{a+b-1}B(a,b)}$	Jacobi

On notera que d'autres polynômes orthogonaux, tels que les polynômes de Chebychev ou de Gegenbauer, sont des cas particuliers des polynômes de Jacobi. Une base orthonormée de $\mathbb{H}_p$ est alors obtenue par tensorisation de polynômes unidimensionnels :

$$\mathbb{H}_p = span\{H_\alpha(\mathbf{y}) = \prod_{i=1}^{m} h_{\alpha_i}^{(i)}(y_i); \alpha \in \mathbb{N}^m, |\alpha| = p\}$$

La figure I.8 illustre trois fonctions de base du chaos polynômial d'Hermite en dimension $m = 2$ (polynômes orthogonaux associés à la mesure $P_{\boldsymbol{\xi}}$ gaussienne standard).



(a) $\alpha = (1, 3)$ (b) $\alpha = (2, 2)$ (c) $\alpha = (4, 4)$

FIG. I.8 – Polynômes d'Hermite $H_\alpha(\boldsymbol{\xi})$ en dimension $m = 2$

Remarque I.3

Dans le cas de variables dépendantes, on pourra utiliser cette construction avec la technique présentée dans la section 3.1.3, afin de construire des bases (non polynômiales) de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$.

3.2.3 Interpolants de Lagrange

Une autre approche, utilisée notamment dans [14], consiste à introduire une base de $\mathbb{Q}_p(\boldsymbol{\Xi})$ constituée de polynômes d'interpolation. On suppose ici les variables indépendantes. Sur chaque dimension, on introduit un ensemble de points $\Upsilon_i = \{y_{i,n}\}_{n=0}^p$ de Ξ_i et on définit la base d'interpolation $\{h_n^{(i)}\}_{n=0}^p$ associée :

$$h_n^{(i)} \in \mathbb{Q}_p(\Xi_i), \quad h_n^{(i)}(y_{i,l}) = \delta_{nl}$$

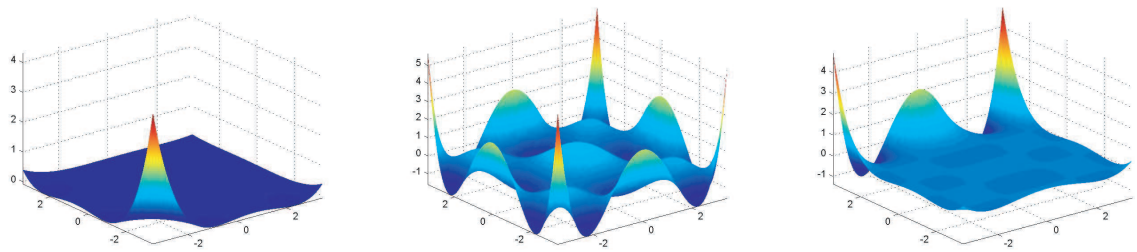
Les points d'interpolation sont alors classiquement choisis comme les racines du polynôme orthogonal classique de degré $(p+1)$. Ces points sont donc les $(p+1)$ points de Gauss associés à la mesure dP_{ξ_i}. Ce choix permet notamment d'obtenir la propriété d'orthogonalité de la base :

$$< h_n^{(i)}, h_l^{(i)} >_{L^2(\Xi_i, dP_{\xi_i})} = E(h_n^{(i)}(\xi_i) h_l^{(i)}(\xi_i)) = \int_{\Xi_i} h_n^{(i)}(y) h_l^{(i)}(y) dP_{\xi_i}(y) = \delta_{nl}\omega_n$$

où les $\{\omega_k\}_{k=0}^p$ désignent les poids de la quadrature de Gauss. En effet, on a

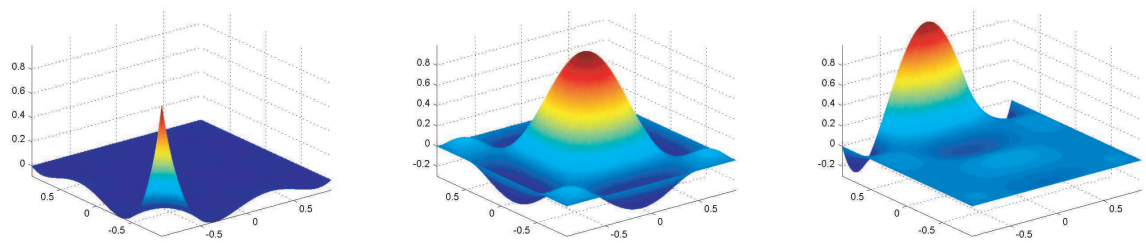
$$\int_{\Xi_i} h_n^{(i)}(y) h_l^{(i)}(y) dP_{\xi_i}(y) = \sum_{k=0}^p \omega_k h_n^{(i)}(y_{i,k}) h_l^{(i)}(y_{i,k}) = \sum_{k=0}^p \omega_k \delta_{nk}\delta_{lk} = \omega_n \delta_{nl} \tag{I.26}$$

Les bases de $\mathbb{Q}_p(\boldsymbol{\Xi})$ sont ensuite obtenues par tensorisation pleine des bases d'interpolation des $\mathbb{Q}_p(\Xi_i)$. Elles forment donc des bases d'interpolation sur une grille de points obtenue par tensorisation des grilles de points Υ_i. Les figures I.9 et I.10 illustrent les bases d'interpolation obtenues respectivement dans le cas de mesures gaussiennes et uniformes en dimension 2.



(a) $\alpha = (1,1)$ (b) $\alpha = (3,3)$ (c) $\alpha = (3,5)$

FIG. I.9 – Polynômes d'interpolation $H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{Q}_4(\boldsymbol{\Xi})$ sur $\boldsymbol{\Xi} = \mathbb{R}^2$: grille d'interpolation constituée des 5×5 points d'intégration de Gauss-Hermite



(a) $\alpha = (1,1)$ (b) $\alpha = (3,3)$ (c) $\alpha = (3,5)$

FIG. I.10 – Polynômes d'interpolation $H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{Q}_4(\boldsymbol{\Xi})$ sur $\Xi = [-1,1]^2$: grille d'interpolation constituée des 5×5 points d'intégration de Gauss-Legendre

Remarque I.4

Etant donné que la quadrature de Gauss à $(p+1)$ points intègre exactement les polynômes de

degré $(2p+1)$*, on a également la propriété d'orthogonalité suivante :*

$$E(\xi_i h_n^{(i)}(\xi_i) h_l^{(i)}(\xi_i)) = \sum_{k=0}^{p} \omega_k y_{i,k} \delta_{nk} \delta_{lk} = \omega_n y_{i,n} \delta_{nl} \tag{I.27}$$

Cette propriété peut être avantageusement utilisée dans le cadre des méthodes spectrales de type Galerkin. Pour certains types de problèmes linéaires, on montre que le calcul de la décomposition sur la base d'interpolation se ramène à une méthode de collocation stochastique, nécessitant la résolution de problèmes déterministes découplés (voir remarque I.12 de la section 4.3).

3.3 Approximations polynômiales par morceaux

Les approches introduites dans [40, 167, 90, 91] consistent à choisir une base d'approximation polynômiale par morceaux, définies sur une partition de Ξ. Ce type de représentation permet de décrire des fonctions peu régulières et permet éventuellement de construire des bases d'approximation de manière adaptative [168, 106] (par raffinement de la partition ou augmentation du degré d'approximation).

On se place ici dans le cas d'un domaine Ξ borné dans $\mathbb{R}^m$. Il est toujours possible, à un changement de variables aléatoires près, de se ramener à ce cas. On définit alors une partition sans recouvrement $\{\Xi^k\}_{k=1}^K$ de Ξ, *i.e.* telle que[6] :

$$\cup_{k=1}^K \Xi^k = \Xi, \quad \Xi^k \cap \Xi^{k'} = \emptyset \; si \; k \neq k'$$

L'espace d'approximation $\mathcal{S}_P \subset L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ est défini comme l'espace des fonctions dont la restriction à Ξ^k est polynômiale de degré p_k :

$$\mathcal{S}_P = \{v : \Xi \to \mathbb{R}; v_{|\Xi^k} \in \mathbb{P}_{p_k}(\Xi^k)\} \quad \text{ou} \quad \mathcal{S}_P = \{v : \Xi \to \mathbb{R}; v_{|\Xi^k} \in \mathbb{Q}_{p_k}(\Xi^k)\}$$

La dimension de cet espace d'approximation est $P = \sum_{k=1}^K P_k$, avec $P_k = dim(\mathbb{P}_{p_k})$ ou $dim(\mathbb{Q}_{p_k})$. Voyons à présent comment construire une base orthogonale (voire orthonormée) de $\mathcal{S}_P$.

3.3.1 Base éléments finis classique

Une première manière de procéder consiste à écrire $\mathcal{S}_P$ comme la somme orthogonale d'espaces $\mathcal{S}_{P_k}^k$, où $\mathcal{S}_{P_k}^k$ est un espace de fonctions polynômiales à support Ξ^k :

$$\mathcal{S}_P = \oplus_{k=1}^K \mathcal{S}_{P_k}^k, \quad \mathcal{S}_{P_k}^k = \{v \in \mathcal{S}_P; support(v) = \Xi^k\} \tag{I.28}$$

Pour construire une base orthonormée de $\mathcal{S}_P$, il suffit donc de construire une base orthonormée de chaque espace $\mathcal{S}_{P_k}^k$. Notons $\{H_\alpha^k\}_{\alpha \in \mathcal{I}_{P_k}}$ une telle base. La propriété d'orthonormalité s'écrit :

$$< H_\alpha^k, H_\beta^k >= \int_{\Xi^k} H_\alpha^k(\mathbf{y}) H_\beta^k(\mathbf{y}) dP_\xi(\mathbf{y}) = \delta_{\alpha\beta}$$

Une base orthogonale de $\mathcal{S}_{P_k}^k \subset L^2(\Xi^k, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ peut alors être construite de manière classique. Dans le cas de variables aléatoires indépendantes, un élément de la partition Ξ^k sera classiquement défini comme un hyper-rectangle $\Xi^k = \Xi_1^k \times \ldots \times \Xi_m^k$. On obtiendra alors une base polynômiale orthonormée de $\mathcal{S}_{P_k}^k$ par tensorisation creuse ou pleine de bases orthonormées de $\mathbb{Q}_{p_k}(\Xi_i^k)$. Cependant, dans le cas général, la restriction à Ξ^k de la mesure $dP_{\boldsymbol{\xi}}$ ne sera pas une mesure de probabilité classique, si bien qu'il n'existera pas de bases classiques de polynômes orthogonaux associés. Bien qu'il soit toujours possible de construire ces bases numériquement, il sera préférable en pratique de se ramener au cas $\Xi = [0,1]^m$ avec une mesure $P_{\boldsymbol{\xi}}$ uniforme. En effet, dans ce cas, la restriction de la mesure à Ξ^k est toujours une mesure uniforme et les H_α^k seront simplement construits par tensorisation des polynômes orthogonaux de Legendre.

[6] En termes probabilistes, $\Xi^k \cap \Xi^{k'} = \emptyset$ équivaut à des événements Ξ^k et $\Xi^{k'}$ incompatibles

Construction des partitions

Une manière simple de construire une partition consiste à tensoriser des partitions 1D. En notant $\{\Xi_i^k\}_{k=1}^{K_i}$ les partitions des Ξ_i, on obtient une partition régulière $\{\mathbf{\Xi}^k\}_{k=1}^{K}$ de $\mathbf{\Xi}$, avec $\mathbf{\Xi}^k = \Xi_1^{k_1} \times \ldots \times \Xi_m^{k_m}$. Cependant, le nombre d'éléments $K = \prod_{i=1}^m K_i$ croît rapidement avec la dimension stochastique, ce qui peut conduire à la définition d'espaces d'approximation $\mathcal{S}_P$ de très grande dimension P (pour $p_k = p$, $P = K \times dim(\mathbb{Q}_p)$ ou $P = K \times dim(\mathbb{P}_p)$). Dans une démarche d'approximation adaptative, cette vision par tensorisation de partitions 1D ne permet pas d'opérer des raffinements locaux et conduit à une rapide augmentation du nombre d'éléments K.
Une alternative consiste à utiliser des algorithmes de type octree pour construire une partition pertinente de $\mathbf{\Xi}$. Cette approche nécessite clairement un critère d'estimation de l'erreur d'approximation et prend son sens dans une démarche d'approximation adaptative. L'utilisation de partitions octree anisotropes peut permettre de réduire considérablement le nombre d'éléments à utiliser en grande dimension stochastique.

3.3.2 Base de multi-ondelettes

Une autre manière de construire une base orthonormée de $\mathcal{S}_P$, proposée dans [90, 91], consiste à utiliser une représentation en multi-ondelettes. Cette construction s'applique au cas où $\mathbf{\Xi} = [0,1]^m$ et où la mesure $P_{\boldsymbol{\xi}}$ est uniforme. La partition utilisée est une partition binaire de $[0,1]^m$. Expliquons brièvement le principe de cette construction dans le cas uni-dimensionnel $\mathbf{\Xi} = [0,1]$, l'obtention de bases de $L^2([0,1]^m)$ s'obtenant par simple tensorisation des bases uni-dimensionnelles. On note V_p^k l'espace des fonctions polynômiales de degré p par morceaux défini sur une partition binaire de $[0,1]$ en 2^k intervalles :

$$V_p^k = \left\{ v : [0,1] \to \mathbb{R}; v_{|[2^{-k}l, 2^{-k}(l+1)]} \in \mathbb{Q}_p([2^{-k}l, 2^{-k}(l+1)]), \forall l \in \{0, \ldots, 2^k - 1\} \right\}$$

On note W_p^k l'orthogonal de V_p^k dans V_p^{k+1} :

$$V_p^{k+1} = V_p^k \oplus W_p^k$$

On a alors la décomposition suivante : $L^2([0,1]) = V_p^0 \oplus_{k \geqslant 0} W_p^k$. L'espace W_p^k est appelé espace des multi-ondelettes de niveau k. Cette vision en multi-ondelettes permet de construire une représentation multi-échelle des fonctions de $L^2([0,1])$, les espaces W_p^k étant associés à une représentation de détails de plus en plus locaux quand le niveau de résolution k augmente.
Pour introduire une base orthonormée associée à cette décomposition, on commence par définir une base orthonormée $\{\phi_n\}_{n=0}^p$ de V_p^0 (constituée des polynômes de Legendre) et une base orthonormée $\{\psi_n\}_{n=0}^p$ de W_p^0. Une base orthonormée de W_p^k est alors constituée des multi-ondelettes $\psi_{n,l}^k$ définies par :

$$\psi_{n,l}^k(y) = 2^{k/2}\psi_n(2^k y - l), \quad l = 0 \ldots 2^k - 1, \; n = 0 \ldots p$$

4 Méthodes spectrales stochastiques de type Galerkin

Les méthodes spectrales stochastiques de type Galerkin, brièvement discutées dans le paragraphe 2.4.1, fournissent une démarche générale pour la prédiction de la réponse d'une grande classe de modèles régis par des équations aux dérivées partielles stochastiques (EDPS). Ces approches suivent le même principe que les approches de Galerkin au niveau déterministe. Elle définissent une approximation de la solution, représentée sur une certaine base d'approximation (voir paragraphe 3), en s'appuyant sur une formulation faible du problème stochastique (I.2). Après un bref rappel de quelques éléments d'analyse des EDPS, on expose les principes de base de ces approches et les techniques de résolution associées.

4.1 Equations aux dérivées partielles stochastiques

4.1.1 Formulation forte du problème

Les équations aux dérivées partielles stochastiques peuvent généralement se ramener à la recherche d'une variable aléatoire u, définie sur un espace de probabilité $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$, et vérifiant presque sûrement un ensemble d'équations, notées formellement :

$$\mathcal{A}(u(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi}) = b(\boldsymbol{\xi}) \tag{I.29}$$

où $\mathcal{A}$ est un opérateur différentiel, éventuellement non-linéaire, et où b désigne les termes sources de l'équation.

4.1.2 Formulation faible au niveau déterministe

L'analyse mathématique du problème (I.29) et le développement de méthodes d'approximation déterministes (éléments finis, méthodes spectrales, ...) passent généralement par une formulation faible au niveau déterministe du problème (I.29) : trouver une variable aléatoire u à valeurs dans un espace fonctionnel $\mathcal{V}$ vérifiant presque sûrement :

$$a(u(\boldsymbol{\xi}), v; \boldsymbol{\xi}) = b(v; \boldsymbol{\xi}) \quad \forall v \in \mathcal{V} \tag{I.30}$$

où $a(\cdot, \cdot; \boldsymbol{\xi})$ est une forme bilinéaire, voire semilinéaire, sur $\mathcal{V} \times \mathcal{V}$ et où $b(\cdot; \boldsymbol{\xi})$ est une forme linéaire sur $\mathcal{V}$. La solution aléatoire $u(\boldsymbol{\xi})$ du problème (I.30) est une solution forte au niveau stochastique. Une analyse mathématique classique [26, 135] (étude des propriétés de a et b) permet alors de juger de l'existence et de l'unicité d'une telle solution.

4.1.3 Formulation faible au niveau stochastique

Pour de nombreux modèles, la solution est une variable aléatoire du second ordre. On recherche alors classiquement une solution du problème (I.30) dans l'espace $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}; \mathcal{V})$ des variables aléatoires du second ordre à valeurs dans l'espace fonctionnel $\mathcal{V}$:

$$L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}; \mathcal{V}) = \{v : \boldsymbol{\Xi} \to \mathcal{V}; E(\|v\|_{\mathcal{V}}^2) < \infty\}$$

On supposera dans ce chapitre que $\mathcal{V}$ est indépendant de l'événement élémentaire[7]. On peut alors assimiler l'espace fonctionnel à un produit tensoriel d'espaces :

$$L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}; \mathcal{V}) \simeq \mathcal{V} \otimes L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}) := \mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$$

La formulation faible du problème (I.30) s'écrit : trouver $u \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$ tel que

$$A(u, v) = B(v) \quad \forall v \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{S} \tag{I.31}$$

avec

$$A(u, v) := E(a(u(\boldsymbol{\xi}), v(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} a(u(\mathbf{y}), v(\mathbf{y}); \mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}), \tag{I.32}$$

$$B(v) := E(b(v(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} b(v(\mathbf{y}); \mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}) \tag{I.33}$$

L'étude de l'existence et de l'unicité de solution au problème (I.31) fait encore appel à une analyse mathématique des propriétés des formes A et B [23, 11, 50, 108, 154].

[7] Cette hypothèse n'est pas vérifiée pour une formulation classique d'EDPs définies sur des domaines aléatoires (voir chapitre III)

4.1.4 Exemple modèle : équation de diffusion stationnaire

Afin d'illustrer les questions évoquées précédemment, on considère un problème classique de diffusion stationnaire admettant une formulation variationnelle (I.30) avec $\mathcal{V} = H_0^1(\Omega)$ et

$$a(u, v; \boldsymbol{\xi}) = \int_\Omega \kappa(x, \boldsymbol{\xi}) \nabla u(x, \boldsymbol{\xi}) \cdot \nabla v(x, \boldsymbol{\xi})\, dx \tag{I.34}$$

$$b(v; \boldsymbol{\xi}) = \int_\Omega v(x, \boldsymbol{\xi}) b(x, \boldsymbol{\xi})\, dx \tag{I.35}$$

où $\kappa(\cdot, \boldsymbol{\xi})$ est un champ stochastique discrétisé (voir annexe A). La condition suivante fournit une condition nécessaire pour que le problème soit bien posé au sens de Hadamard (existence, unicité et dépendance continue aux données) : s'il existe des constantes κ_0 et κ_1 telles que l'on ait presque sûrement (et presque partout sur Ω)

$$0 < \kappa_0 < \kappa(x, \theta) < \kappa_1 < \infty, \tag{I.36}$$

on montre classiquement que a est presque sûrement continue et coercive, *i.e.* il existe des constantes c_a et α_a strictement positives telles que $\forall u, v \in \mathcal{V}$,

$$|a(u, v; \boldsymbol{\xi})| \leqslant c_a \|u\|_{\mathcal{V}} \|v\|_{\mathcal{V}}, \tag{I.37}$$

$$a(v, v; \boldsymbol{\xi}) \geqslant \alpha_a \|v\|_{\mathcal{V}}^2. \tag{I.38}$$

En supposant que le second membre de (I.29) vérifie des propriétés de régularité classiques assurant presque sûrement la continuité de la forme linéaire $b(\cdot; \boldsymbol{\xi})$, on assure ainsi l'existence et l'unicité d'une solution forte au niveau stochastique [15].

L'existence et l'unicité de solution faible au problème (I.31) est assurée si les propriétés suivantes de coercivité et de continuité sont satisfaites : $\forall u, v \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$,

$$|A(u, v)| \leqslant c_A \|u\|_{\mathcal{V}\otimes\mathcal{S}} \|v\|_{\mathcal{V}\otimes\mathcal{S}}, \tag{I.39}$$

$$A(v, v) \geqslant \alpha_A \|v\|_{\mathcal{V}\otimes\mathcal{S}}^2, \tag{I.40}$$

$$|B(v)| \leqslant c_B \|v\|_{\mathcal{V}\otimes\mathcal{S}}. \tag{I.41}$$

Notamment, si le champ stochastique κ satisfait la propriété (I.36), et s'il existe des constantes κ_0 et κ_1 indépendantes de l'événement élémentaire $\boldsymbol{\xi}$, on montre que les propriétés de coercivité et de continuité de A sont assurées avec les mêmes constantes que pour a : $c_A = c_a$ et $\alpha_A = \alpha_a$. La condition (I.36), avec κ_0 et κ_1 indépendantes de l'événement, s'avère nécessaire et suffisante pour obtenir un problème bien posé au sens de Hadamard.

Remarque I.5 (*Violation typique des conditions d'existence de solution*)

Lorsque les paramètres des EDPS sont des champs stochastiques, on est classiquement amené à les discrétiser (voir annexe A) afin de se ramener à un espace de probabilité de travail de dimension finie. Un soin particulier doit être apporté à cette étape de discrétisation afin de préserver le caractère bien posé du problème (I.30). Reprenons l'exemple du problème de diffusion stationnaire et notons $\kappa_{ex}(x, \theta)$ le champ stochastique initial, défini sur l'espace de probabilité $(\Theta, \mathcal{B}, P)$. Une bonne étape de modélisation probabiliste consiste à choisir un champ κ_{ex} vérifiant les conditions (I.36), garantissant ainsi l'existence presque sûre d'une solution aléatoire définie sur $(\Theta, \mathcal{B}, P)$. L'étape de discrétisation consiste à approcher $\kappa_{ex}(x, \theta)$ par un champ $\kappa(x, \boldsymbol{\xi}(\theta))$, en utilisant des techniques classiques de décomposition spectrale (e.g. Karhunen-Loève) ou de décomposition sur le chaos polynômial. Cependant, pour des champs stochastiques couramment utilisés, ces décompositions convergent dans $L^2(\Omega \times \Theta)$ et généralement pas uniformément. Après troncature, le champ $\kappa(x, \boldsymbol{\xi}(\theta))$ peut donc ne plus vérifier les conditions (I.36) [10].
Une manière de pallier ce problème consiste à utiliser, si possible, un champ stochastique $\kappa_{ex}(x, \theta) = f(\gamma_{ex}(x, \theta); x)$ s'exprimant comme une fonction non-linéaire f d'un champ gaussien γ_{ex} [70, 57,

132, 79, 78, 108], avec f permettant d'assurer la propriété (I.36). Après discrétisation et renormalisation du champ gaussien, $\gamma_{ex}(x,\theta) \approx \gamma(x,\boldsymbol{\xi}(\theta))$, on aboutit à un champ approché $\kappa = f(\gamma)$ satisfaisant les conditions (I.36).

Remarque I.6 (*Autres résultats d'existence*)

Dans [154], on peut trouver une construction de champs stochastiques (dans le cadre de l'élasticité linéaire) vérifiant une condition d'ellipticité plus faible que "$\kappa(x,\theta) > \kappa_0$ presque sûrement" et assurant toujours l'ellipticité de A. Cependant, cette condition n'est pas suffisante pour obtenir un problème bien posé au sens de Hadamard (nécessitant que $\|\kappa^{-1}\|_{L^\infty(\Omega\times\Xi)} < \infty$ pour garantir la dépendance continue aux données).
On pourra consulter [23] pour des résultats plus généraux d'existence, nécessitant l'introduction de nouveaux espaces de variables aléatoires afin de prendre en compte une plus large classe de champs stochastiques.

4.2 Approximation au niveau déterministe

4.2.1 Formulation forte du problème semi-discrétisé

Les techniques d'approximation classiques au niveau déterministe (différences finies, volumes finis, éléments finis ...) aboutissent classiquement à la résolution du problème semi-discrétisé suivant : trouver une variable aléatoire $\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi})$ à valeurs dans $\mathbb{R}^n$ (ou vecteur aléatoire) vérifiant presque sûrement :

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{b}(\boldsymbol{\xi}) \tag{I.42}$$

où $\mathbf{A}(\cdot;\boldsymbol{\xi})$ est un opérateur aléatoire de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^n$ et où $\mathbf{b}(\boldsymbol{\xi})$ est un vecteur aléatoire à valeurs dans $\mathbb{R}^n$.

Exemple I.7 (Approches de Galerkin au niveau déterministe)

Les méthodes de Galerkin classiques (éléments finis [157, 36], méthodes spectrales [30], ...) s'appuient sur une formulation faible au niveau déterministe (équation (I.30)) et introduisent un espace d'approximation $\mathcal{V}_n \subset \mathcal{V}$ de dimension n. L'approximation de Galerkin du problème (I.30), variable aléatoire $u_n(\boldsymbol{\xi})$ à valeurs dans $\mathcal{V}_n$, doit satisfaire presque sûrement

$$a(u_n(\boldsymbol{\xi}), v_n;\boldsymbol{\xi}) = b(v_n;\boldsymbol{\xi}) \quad \forall v_n \in \mathcal{V}_n \tag{I.43}$$

En notant $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ une base de fonctions de $\mathcal{V}_n$ et en notant $\mathbf{u} = (u_i)_{i=1}^n$ le vecteur des composantes de u_n sur cette base, on définit naturellement l'opérateur et le second membre discrétisé de (I.42) par :

$$(\mathbf{A}(\mathbf{u};\boldsymbol{\xi}))_i = a(u_n,\varphi_i;\boldsymbol{\xi}), \quad (\mathbf{b}(\boldsymbol{\xi}))_i = b(\varphi_i;\boldsymbol{\xi})$$

Dans le cas d'un problème linéaire, $\mathbf{A}$ est une matrice aléatoire dont les composantes s'expriment :

$$(\mathbf{A}(\boldsymbol{\xi}))_{ij} = a(\varphi_j,\varphi_i;\boldsymbol{\xi})$$

4.2.2 Formulation faible du problème semi-discrétisé

Une formulation faible au niveau stochastique s'écrit de la manière suivante : trouver $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}$ tel que

$$A(\mathbf{u},\mathbf{v}) = B(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S} \tag{I.44}$$

avec

$$A(\mathbf{u},\mathbf{v}) := E(\mathbf{v}(\boldsymbol{\xi})^T\mathbf{A}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi});\boldsymbol{\xi})), \quad B(\mathbf{v}) = E(\mathbf{v}(\boldsymbol{\xi})^T\mathbf{b}(\boldsymbol{\xi})) \tag{I.45}$$

4.3 Approximation de Galerkin

4.3.1 Définition de l'approximation

Les méthodes spectrales stochastiques de type Galerkin partent de la formulation faible (I.44) du problème. Elles introduisent un espace d'approximation $\mathcal{S}_P \subset \mathcal{S}$ (voir section 3) et définissent une approximation $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ de la manière suivante :

$$A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = B(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{I.46}$$

ou encore, en revenant aux définitions (I.45) de A et B :

$$E\left(\mathbf{v}^T \mathbf{R}(\mathbf{u})\right) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{I.47}$$
$$\text{avec } \mathbf{R}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi}) = \mathbf{b}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{A}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi})$$

L'équation (I.47) assure donc l'annulation de la projection orthogonale du résidu $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ sur $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$. C'est bien une vérification faible et approchée de l'équation (I.42). Des analyses mathématiques classiques permettent de préciser le sens et les propriétés de l'approximation de Galerkin, solution du problème (I.46) [19, 40, 11, 50] : convergence, stabilité, erreur *a priori*. Notamment, l'approximation de Galerkin s'avère très stable vis-à-vis des perturbations et erreurs d'intégration, propriété très intéressante d'un point de vue numérique.

Propriété I.8 ***(Problème linéaire symétrique elliptique coercif)***

Dans le cas d'un problème linéaire symétrique elliptique coercif, la forme bilinéaire A définit un produit scalaire $< \cdot, \cdot >_A$ sur $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}$. L'approximation de Galerkin est alors la projection dans $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ de la solution de (I.44) au sens du produit scalaire $< \cdot, \cdot >_A$. L'approximation minimise donc la distance à la solution de (I.44) au sens de la norme induite par A.

4.3.2 Système d'équations à résoudre

En notant $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}_P}$ une base de $\mathcal{S}_P$, la solution $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ sera donc recherchée sous la forme d'une décomposition :

$$\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_P} \mathbf{u}_\alpha H_\alpha(\boldsymbol{\xi}), \quad \mathbf{u}_\alpha \in \mathbb{R}^n$$

Le problème (I.46) se ramène alors au système d'équations suivant :

$$E\left(H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{A}\Big(\sum_{\beta \in \mathcal{I}_P} \mathbf{u}_\beta H_\beta(\boldsymbol{\xi}); \boldsymbol{\xi}\Big)\right) = E\left(\mathbf{b}(\boldsymbol{\xi}) H_\alpha(\boldsymbol{\xi})\right), \quad \forall \alpha \in \mathcal{I}_P \tag{I.48}$$

C'est un système de $n \times P$ équations, éventuellement non-linéaires. En notant $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{nP}$ le vecteur par bloc réunissant les composantes $\mathbf{u}_\alpha := (\mathbf{u})_\alpha$, on peut remettre le système (I.48) sous la forme d'un système d'équations par bloc :

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \mathbf{b}, \tag{I.49}$$

avec

$$(\mathbf{A}(\mathbf{u}))_\alpha = E\left(H_\alpha \mathbf{A}\Big(\sum_{\beta \in \mathcal{I}_P} \mathbf{u}_\beta H_\beta\Big)\right), \quad (\mathbf{b})_\alpha = E\left(\mathbf{b} H_\alpha\right) \tag{I.50}$$

Remarque I.9 (***Utilisation d'approximations polynômiales par morceaux***)

Si on utilise une approximation polynômiale par morceaux de type éléments finis (voir section 3.3), l'espace $\mathcal{S}_P$ peut s'écrire $\mathcal{S}_P = \oplus_{k=1}^K \mathcal{S}_{P_k}^k$, où $\mathcal{S}_{P_k}^k$ désigne un sous-espace de fonctions polynômiales ayant pour support un élément Ξ^k de la partition de Ξ. La solution $\mathbf{u}$ peut alors s'écrire $\mathbf{u} =$

$\sum_{k=1}^{K} \mathbf{u}^k$, *où les* $\mathbf{u}^k \in \mathcal{S}_{P_k}^k$ *sont définis par* K *problèmes découplés :*

$$A(\mathbf{u}^k, \mathbf{v}^k) = B(\mathbf{v}^k) \quad \forall \mathbf{v}^k \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_{P_k}^k, \quad \forall k \in \{1, ..., K\} \tag{I.51}$$

On se ramène donc à K *systèmes d'équations découplés du type* (I.48)*, chaque système faisant intervenir les fonctions de base* $\{H_\alpha^k\}_{\alpha \in \mathcal{I}_{P_k}}$ *de* $\mathcal{S}_{P_k}^k$.

4.3.3 Le cas de problèmes linéaires

Dans le cas de problèmes linéaires, le système (I.48) s'écrit :

$$\sum_{\beta \in \mathcal{I}_P} E(\mathbf{A} H_\alpha H_\beta) \mathbf{u}_\beta = E(\mathbf{b} H_\alpha) \quad \forall \alpha \in \mathcal{I}_P \tag{I.52}$$

Le système (I.49) devient alors un système de $n \times P$ équations linéaires

$$\mathbf{Au} = \mathbf{b}, \tag{I.53}$$

où $\mathbf{A}$ est une matrice dont les composantes par bloc s'expriment

$$(\mathbf{A})_{\alpha\beta} = E(\mathbf{A} H_\alpha H_\beta)$$

En pratique, la matrice aléatoire $\mathbf{A}$ sera décomposée sur la base de fonctions $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$:

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_{P_A}} \mathbf{A}_\alpha H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \tag{I.54}$$

où $\mathcal{I}_{P_A} \subset \mathcal{I}$ désigne un ensemble fini d'indices. Les blocs de la matrice $\mathbf{A}$ peuvent donc s'écrire

$$(\mathbf{A})_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma \in \mathcal{I}_{P_A}} \mathbf{A}_\gamma E(H_\gamma H_\alpha H_\beta) \tag{I.55}$$

Les bases de fonctions stochastiques étant classiques, les termes $E(H_\gamma H_\alpha H_\beta)$ sont souvent connus analytiquement. Ils peuvent aussi être pré-calculés numériquement.

Remarque I.10 (*Choix de la troncature pour la décomposition de l'opérateur*)

A priori, la matrice aléatoire exacte $\mathbf{A}$ *admet une décomposition sur la base complète* $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$ *de* $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$*. En tronquant cette décomposition au sous-ensemble* $\mathcal{I}_{P_A}$*, on effectue donc a priori une approximation de l'opérateur (crime variationnel), ce qui pourrait conduire à des solutions différentes de celle du problème initial* (I.46)*. En fait, on montre aisément que si on utilise pour* $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$ *une base de polynômes (éventuellement par morceaux) orthogonaux et si* $\mathcal{S}_P$ *correspond aux polynômes de degré* p*, alors il suffit d'effectuer une décomposition polynômiale de* $\mathbf{A}$ *jusqu'au degré* $2p$ *pour une prise en compte exacte de l'opérateur. En effet, par orthogonalité des fonctions de base, on a alors*

$$E(\mathbf{A} H_\alpha H_\beta) = \sum_{\gamma \in \mathcal{I}} \mathbf{A}_\gamma E(H_\gamma H_\alpha H_\beta) = \sum_{\gamma \in \mathcal{I}_{P_A}} \mathbf{A}_\gamma E(H_\gamma H_\alpha H_\beta)$$

Propriété I.11 ***(Prise en compte exacte de champs stochastiques)***

Lorsque le modèle probabiliste de départ fait intervenir un champ stochastique dans l'opérateur du problème, on est classiquement amené à opérer une discrétisation du processus afin de travailler dans un espace de probabilité de dimension finie. En réalité, on montre que l'approche de Galerkin peut permettre une prise en compte exacte du champ stochastique. Illustrons cette propriété dans le cas de l'exemple de la section 4.1.4. Considérons tout d'abord le problème avec le champ stochastique initial $\kappa_{ex}(x, \theta)$ (éventuellement discrétisé en espace) défini sur l'espace de probabilité

$(\Theta, \mathcal{B}, P)$. La solution $\mathbf{u}_{ex} \in \mathbb{R}^n \otimes L^2(\Theta, dP)$ du problème semi-discrétisé est alors définie par

$$A_{ex}(\mathbf{u}_{ex}, \mathbf{v}) = E(\mathbf{v}^T \mathbf{b}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes L^2(\Theta, dP) \tag{I.56}$$

$$\text{avec} \quad A_{ex}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = E(\mathbf{v}^T \mathbf{A}_{ex} \mathbf{u}) \tag{I.57}$$

Considérons à présent une représentation de κ_{ex} sous la forme d'une décomposition sur le chaos polynômial (voir annexe A) et considérons que le processus discrétisé κ est obtenu par troncature de cette représentation à un chaos de degré $2p$ en dimension m :

$$\kappa_{ex}(x, \theta) = \sum_{\alpha \in \mathcal{J}_{ex}} \kappa_\alpha(x) H_\alpha(\{\xi_i\}_{i \in \mathbb{N}}) \approx \sum_{\alpha \in \mathcal{J}_{P_A}} \kappa_\alpha(x) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}(\theta)) := \kappa(x, \theta)$$

où $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{J}_{ex}}$ désigne la base de $L^2(\Theta, dP)$ constituée des polynômes d'Hermite multi-dimensionnels en des variables gaussiennes indépendantes $\{\xi_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ [169, 29] ($\mathcal{J}_{ex}$ est l'ensemble des multi-indices de $\mathbb{N}^{\mathbb{N}}$ de longueur finie). On considère alors pour $\mathcal{S}_P$ un chaos polynômial de degré p en dimension m. Par orthogonalité des polynômes d'Hermite, on montre que la restriction de la forme bilinéaire $A_{ex}(\cdot, \cdot)$ à $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ est égale à la forme bilinéaire $A(\cdot, \cdot)$, construite à partir de κ. En d'autres termes, la solution de Galerkin $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, définie par (I.46) est la projection de $\mathbf{u}_{ex}$ sur $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ au sens du produit scalaire induit par la forme bilinéaire A_{ex}. En procédant ainsi, l'approche de Galerkin permet en fait de tenir compte implicitement du champ stochastique non discrétisé. La méthode de Galerkin évite donc le problème de violation classique des conditions d'existence de solution par discrétisation des champs stochastiques (voir remarque I.5). On notera que cette "bonne" propriété reste vraie pour certains types de problèmes non-linéaires.

Remarque I.12 (*Cas particulier des bases d'interpolation - collocation stochastique*)

Dans le cas particulier d'un problème linéaire avec dépendance linéaire de $\mathbf{A}$ *en* $\boldsymbol{\xi}$, *i.e.*

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\substack{\gamma \in \mathbb{N}^m \\ |\gamma| \leqslant 1}} \boldsymbol{\xi}^\gamma \mathbf{A}_\gamma, \quad \boldsymbol{\xi}^\gamma := \prod_{i=1}^m \xi_i^{\gamma_i}, \quad \mathbf{A}_\gamma \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

l'utilisation de l'approximation par interpolants de Lagrange présentée dans le paragraphe 3.2.3 permet d'obtenir la solution $\mathbf{u}$ *par une simple approche de "collocation stochastique", équivalente à la résolution de* P *problèmes déterministes découplés. Cela est dû aux deux relations d'orthogonalité (I.26) et (I.27) vérifiées par les fonctions de bases. En notant* $\{\mathbf{y}_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{J}_P}$ *les points d'interpolation associés à une quadrature de Gauss (obtenus par tensorisation de grilles d'interpolation 1D), et* $\{\omega_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{J}_P}$ *les poids de Gauss, on a*

$$E(\boldsymbol{\xi}^\gamma H_\alpha H_\beta) = \mathbf{y}_\alpha^\gamma \omega_\alpha \delta_{\alpha\beta}, \forall \gamma \in \mathbb{N}^m \text{ tel que } |\gamma| \leqslant 1$$

Dans ce cas, le système (I.48) se ramène aux P *systèmes découplés :*

$$\Big(\sum_{\substack{\gamma \in \mathbb{N}^m \\ |\gamma| \leqslant 1}} \mathbf{y}_\alpha^\gamma \mathbf{A}_\gamma \Big) \mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha = E(\mathbf{b} H_\alpha), \quad \alpha \in \mathcal{J}_P$$

Dans l'exemple 4.1.4, ce cas (très) particulier intervient notamment si le champ stochastique s'écrit $\kappa(x, \theta) = \kappa_0(x) + \sum_{i=1}^m \xi_i(\theta) \kappa_i(x)$.

4.4 Techniques de résolution classiques

4.4.1 Problèmes linéaires

Dans le cadre linéaire, la résolution du système (I.53) fait généralement appel à des solveurs itératifs de type Krylov (Gradient Conjugué Préconditionné, Conjugate Gradient Square, ...) qui ne demandent jamais l'assemblage de la matrice $\mathbf{A}$. Un préconditionnement du système est nécessaire. Les algorithmes

de Krylov sont donc appliqués au système préconditionné

$$\mathbf{PAu} = \mathbf{Pb}$$

Dans le cas où une base orthonormée $\{H_\alpha\}$ est utilisée, un choix classique de préconditionneur [56, 81] consiste à prendre $\mathbf{P}$ bloc-diagonal tel que :

$$(\mathbf{P})_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} E(\mathbf{A})^{-1}$$

Ce préconditionneur s'avère relativement efficace dans le cas où la variance de $\mathbf{A}$ est faible. En effet, si on décompose la matrice $\mathbf{A}$ en partie moyenne $E(\mathbf{A})$ et partie centrée, la matrice $\mathbf{A}$ du système s'écrit :

$$(\mathbf{A})_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha_\beta} E(\mathbf{A}) + E(H_\alpha H_\beta(\mathbf{A} - E(\mathbf{A})))$$

et tend bien vers $\mathbf{P}^{-1}$ lorsque la variance de $\mathbf{A}$ tend vers zéro. Pour de grandes variances, la convergence des algorithmes de Krylov est nettement détériorée. On pourra trouver dans [130] une construction similaire de préconditonneur dans le cadre de formulations mixtes.

4.4.2 Problèmes non-linéaires

Dans le cadre non-linéaire, des solveurs non-linéaires classiques sont utilisés pour résoudre le système (I.48). Evoquons ici le principe des solveurs de Newton ou Quasi-Newton [41]. Connaissant un itéré $\mathbf{u}^{(k)} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, un incrément $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ sera recherché en résolvant le problème linéaire :

$$A^{(k)}(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = B(\mathbf{v}) - A(\mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{I.58}$$

où $A^{(k)}(\cdot, \cdot)$ est une approximation de la forme bilinéaire tangente de A en $\mathbf{u}^k$ (dérivée de Gâteaux), pouvant s'écrire sous forme discrète

$$A^{(k)}(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = E(\mathbf{v}^T \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{u})$$

avec $\mathbf{A}^k$ une matrice (éventuellement aléatoire) approchant la matrice tangente de $\mathbf{A}$ en $\mathbf{u}^{(k)}$. D'un point de vue algébrique, cela revient à résoudre le système (I.49) de manière itérative en résolvant à chaque itération un système linéaire de taille $n \times P$ de la forme

$$\mathbf{A}^{(k)} \mathbf{w} = \mathbf{r}^{(k)} \tag{I.59}$$

où $\mathbf{r}^{(k)} := \mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{u}^{(k)})$ est le résidu à l'itéré k. Les systèmes (I.59) peuvent alors être résolus par les algorithmes itératifs de type Krylov mentionnés précédemment.

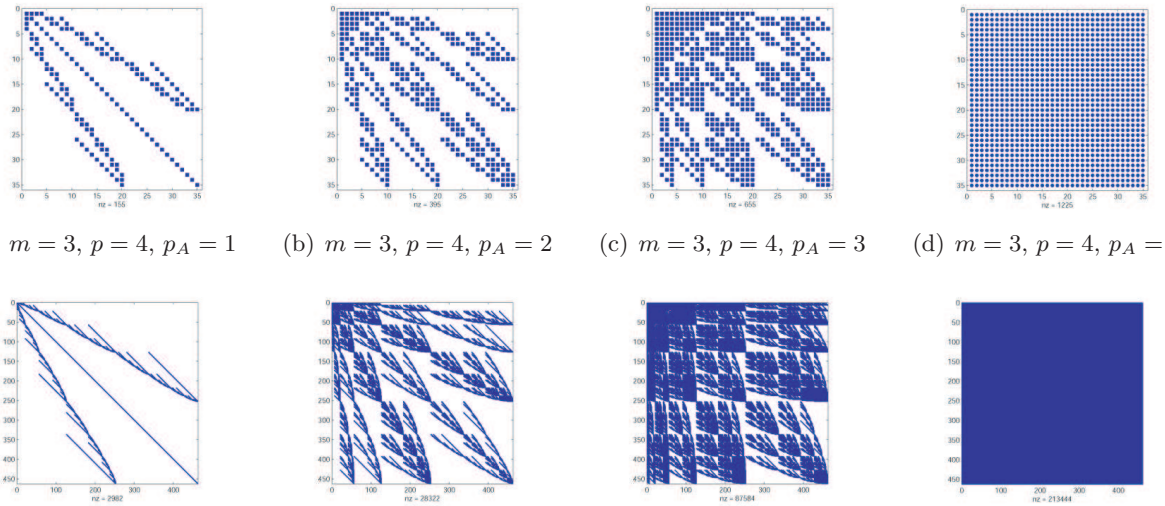
Exemple I.13

Dans [108], on trouvera l'application d'un solveur de type BFGS au cas d'un problème elliptique avec non-linéarité cubique. L'intérêt est de construire $\mathbf{A}^{(k)}$ par de simples modifications de faible rang d'une matrice initiale $\mathbf{A}^{(0)}$ (par exemple basée sur la partie linéaire de l'opérateur $\mathbf{A}$). Des solveurs itératifs de type Krylov préconditionnés sont alors utilisés pour résoudre les systèmes (I.59). Dans [120], un solveur de type Newton classique est utilisé pour ce même problème. Toujours pour ce même problème, il est proposé dans [125] d'utiliser pour $\mathbf{A}^{(k)}$ une approximation de la dérivée de Gâteaux de $\mathbf{A}$ en $\mathbf{u}^{(k)}$ consistant à remplacer les paramètres aléatoires de l'opérateur $\mathbf{A}$ par leur espérance et à remplacer $\mathbf{u}^{(k)}$ par son espérance. Cette démarche, efficace pour des variabilités modérées, a l'avantage de conduire à une matrice $\mathbf{A}^{(k)}$ déterministe et donc à un système (I.59) diagonal par bloc (résolution de problèmes déterministes découplés).

D'une manière générale, l'utilisation d'un solveur non-linéaire pour un type d'application donné s'inspire généralement des solveurs utilisés dans le cadre déterministe. On notera qu'un coût de calcul non négligeable provient de l'évaluation des résidus et donc du second membre des systèmes (I.59). Cette évaluation peut être aisée pour certains types de non-linéarités (forme simple de l'opérateur non-linéaire) [92, 93]. Dans un cadre plus général, on pourra faire appel à des techniques de projection utilisant des quadratures stochastiques adaptées [80, 108].

4.4.3 Structure creuse (ou non creuse) des systèmes linéaires

Les solveurs itératifs de type Krylov pour la résolution du système (I.53) (ou (I.59)) ne demandent que d'effectuer des produits matrices-vecteurs de type **Au**, qui tirent avantageusement partie de la structure possiblement creuse du système. Le système possède souvent une structure creuse à 2 niveaux, provenant du caractère éventuellement creux de la matrice aléatoire **A** (classique en éléments finis, différences finis, ...) mais également des propriétés de la base de fonctions $\{H_\alpha\}$. En effet, le terme $E(H_\gamma H_\alpha H_\beta)$ possède généralement une structure creuse pour des bases d'approximation classiques. Sur la figure I.11, on observe la structure matricielle du terme $\sum_{\gamma \in \mathcal{I}_{P_A}} E(H_\gamma H_\alpha H_\beta)$, reflétant le caractère creux par bloc du système (I.53), avec l'utilisation d'une base de chaos polynômial d'Hermite. On remarque que le caractère creux dépend fortement de la dépendance de la matrice **A** vis-à-vis de $\boldsymbol{\xi}$. Si un haut degré d'approximation est nécessaire dans le développement de **A** sur la base $\{H_\alpha\}$, on perd clairement le caractère creux par bloc.



(a) $m = 3$, $p = 4$, $p_A = 1$ (b) $m = 3$, $p = 4$, $p_A = 2$ (c) $m = 3$, $p = 4$, $p_A = 3$ (d) $m = 3$, $p = 4$, $p_A = 8$

(e) $m = 5$, $p = 6$, $p_A = 1$ (f) $m = 5$, $p = 6$, $p_A = 3$ (g) $m = 5$, $p = 6$, $p_A = 5$ (h) $m = 5$, $p = 6$, $p_A = 12$

FIG. I.11 – Structure creuse de la matrice $\sum_{\gamma \in \mathcal{I}_{P_A}} E(H_\gamma H_\alpha H_\beta)$, $\alpha, \beta \in \mathcal{I}_P$: utilisation d'un chaos polynômial d'Hermite en dimension m, avec un degré p pour $\mathcal{I}_P$ et p_A pour $\mathcal{I}_{P_A}$

Chapitre II

Méthode de décomposition spectrale généralisée pour la résolution d'équations stochastiques

Ce chapitre présente une méthode alternative pour la résolution d'équations stochastiques qui tente de pallier les inconvénients des méthodes stochastiques de type Galerkin : temps de calcul, ressources mémoires requises et caractère intrusif (partiellement). Après un bref rappel du contexte scientifique, le principe de la méthode et les algorithmes associés sont détaillés dans un cadre relativement général. Une série d'applications tentera d'illustrer ses performances et de détailler des points techniques de mise en oeuvre.

Sommaire

1 Problématique et contexte scientifique . . . 35

2 Méthode de décomposition spectrale généralisée (GSD) . . . 36

2.1 Notations préliminaires . . . 37

2.2 Décomposition minimale . . . 37

2.3 Définition de la décomposition . . . 38

2.4 Interprétation comme un problème aux valeurs propres . . . 38

2.5 Cas particuliers . . . 39

3 Algorithmes pour la construction de la GSD . . . 40

3.1 Subspace Iteration algorithm (SI-GSD) . . . 40

3.2 Arnoldi type algorithm (A-GSD) . . . 41

3.3 Restart des algorithmes par déflation de l'opérateur . . . 43

3.4 Capacité à capturer une solution avec une "faible dimensionalité" . . . 45

4 Application à un problème d'élasticité . . . 45

4.1 Formulation du problème et approximation . . . 45

4.2 Solution de référence et mesures d'erreurs . . . 47

4.3 Comparaison entre décompositions spectrales classiques et généralisée . . . 47

4.4 Convergence de l'algorithme Subspace Iteration . . . 48

4.5 Etude de l'algorithme d'Arnoldi (A-GSD) . . . 49

4.6 Comparaisons entre les algorithmes GSD et l'algorithme de référence PCG . . . 51

5 Applications à un problème de thermique instationnaire . . . 52

5.1 Formulation du problème et approximation . . . 52

5.2 Modélisation probabiliste et approximation . . . 53

5.3 Solution de référence et indicateur d'erreur . . . 53

5.4 Aspects calcul pour la construction de la GSD . . . 54

5.5 Comparaison entre décomposition spectrale généralisée (GSD) et classique (SD) . . . 55

5.6 Qualité de la décomposition spectrale généralisée 56
5.7 Coûts de calcul 56
6 Application aux problèmes non-linéaires 58
6.1 Application directe de la méthode 58
6.2 Variante 58
7 Conclusions et perspectives 60

1 Problématique et contexte scientifique

Les méthodes stochastiques de type Galerkin permettent d'obtenir des prédictions numériques d'une grande précision. Comme nous l'avons vu dans le chapitre I (section 4), elles demandent la résolution d'un problème pouvant s'écrire formellement : trouver une solution approchée u vérifiant

$$u \in \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P, \quad A(u,v) = B(v) \quad \forall v \in \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P \tag{II.1}$$

où $\mathcal{V}_n$ (resp. $\mathcal{S}_P$) est un espace d'approximation déterministe (resp. stochastique) de dimension n (resp. P). Pour des applications complexes, si on cherche des prédictions précises, ces approches peuvent nécessiter une discrétisation fine au niveau déterministe (n grand) ou stochastique (P grand). Cela conduit alors à la résolution de problèmes de très grande taille $n \times P$ qui nécessitent des temps de calcul et des capacités de stockage mémoire hors de portée des moyens de calcul actuels. De plus, elles nécessitent une bonne maîtrise de la structure mathématique du problème afin d'étendre les solveurs déterministes usuels au cadre stochastique (algorithmes non-linéaires, construction de préconditionneurs dédiés, ...). Elles nécessitent donc souvent des développements logiciels spécifiques pour une classe particulière de problèmes.

Afin de limiter les coûts de calcul, une première approche consiste à opérer un choix judicieux de l'espace d'approximation stochastique $\mathcal{S}_P$, conduisant à un développement précis de la solution tout en minimisant le nombre de termes P dans le développement. Notamment, un choix judicieux des variables aléatoires définissant l'espace probabilisé de base peut permettre de construire des familles de polynômes orthogonaux conduisant à de bonnes propriétés de convergence [171]. Les propriétés de convergence de ces approches sont néanmoins détériorées lorsque la solution est peu régulière. Une possibilité consiste alors à utiliser des bases de représentation adaptées telles que les éléments finis, multi-éléments ou multi-ondelettes [40, 167, 90, 91, 15]. Un bon espace d'approximation ne peut généralement pas être choisi sans des critères d'estimation d'erreur. Ce type d'approche ne peut donc être viable que dans un cadre d'approximation adaptative [167, 91, 168, 106].

Une autre approche consiste à conserver une formulation du problème sur un espace d'approximation très riche, non nécessairement adapté à la solution recherchée, et à opérer une réduction de ce modèle en construisant des bases réduites de manière intelligente. Cela consiste à rechercher un ensemble de M fonctions déterministes $U_i \in \mathcal{V}_n$ (ou stochastiques $\lambda_i \in \mathcal{S}_P$), avec $M \ll n$ (ou $M \ll P$) et de calculer ensuite les fonctions stochastiques λ_i (ou déterministes U_i) associées en résolvant un problème de taille réduite $M \times P$ (ou $n \times M$). Une approximation $u^{(M)}$ du problème (II.1) est alors recherchée sous la forme d'une décomposition

$$u^{(M)} = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i U_i, \quad U_i \in \mathcal{V}_n, \quad \lambda_i \in \mathcal{S}_P. \tag{II.2}$$

La question est la suivante : comment définir des bases réduites conduisant à une décomposition optimale de la solution pour un ordre de décomposition M donné ? Une réponse possible, exploitée dans différents travaux [108, 62, 46], est basée sur la propriété suivante : "la décomposition optimale de type (II.2) au sens de la norme de $L^2(\Theta, dP; \mathcal{V}_n)$ est la décomposition spectrale classique (ou décomposition de Karhunen-Loève) de la solution". Dans le cas où la norme sur $\mathcal{V}_n$ est une norme autre que la norme L^2, on parlera de décomposition de Hilbert Karhunen-Loève [95, 46]. Donc, si seulement on pouvait calculer la décomposition spectrale de la solution, on pourrait considérer les fonctions stochastiques (resp. les fonctions déterministes) comme de bonnes candidates pour la construction de bases réduites stochastiques (resp. déterministes). Le problème est que la solution et a fortiori sa structure de corrélation, n'est pas connue a priori. Plusieurs techniques ont donc été proposées afin d'obtenir une approximation de cette décomposition spectrale. Dans [108], les auteurs proposent de calculer une approximation de la matrice de corrélation de la solution, en utilisant une expansion de Neumann de l'inverse de l'opérateur du problème, et de calculer ses M vecteurs propres dominants U_i. Ces vecteurs sont des approximations des vecteurs apparaissant dans la décomposition spectrale idéale. Ils sont alors utilisés pour résoudre le problème initial dans l'espace d'approximation réduit

$span\{U_i\}_{i=1}^M \otimes \mathcal{S}_P \subset \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$. Dans sa forme actuelle, cette démarche est limitée au cadre linéaire. Dans [62, 46], les auteurs proposent de résoudre tout d'abord le problème sur un espace d'approximation déterministe grossier $\mathcal{V}_{n'}$, avec $n' \ll n$ (par exemple en utilisant une approximation éléments finis sur un maillage grossier). Une décomposition spectrale de la solution grossière dans $\mathcal{V}_{n'} \otimes \mathcal{S}_P$ peut alors être opérée. Après troncature à l'ordre M, les variables aléatoires $\lambda_i \in \mathcal{S}_P$ obtenues peuvent être considérées comme une approximation des variables aléatoires de la décomposition spectrale de la solution dans $\mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$. Elles sont alors utilisées comme nouvelles fonctions de base stochastiques pour la résolution du problème initial dans l'espace d'approximation réduit $\mathcal{V}_n \otimes span\{\lambda_i\}_{i=1}^M \subset \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$.

Une autre possibilité, développée dans mes travaux de recherche, consiste à définir un autre critère d'optimalité de la décomposition et à développer des algorithmes capables de construire cette décomposition sans connaître la solution ni une approximation de celle-ci. Cette méthode, applicable à une large classe de problèmes, notamment non-linéaires, est détaillée dans la suite de chapitre.

Avant de poursuivre, on peut mentionner une technique alternative de réduction de modèle, baptisée Stochastic Reduced Basis Method [116, 141]. L'idée de cette méthode consiste à calculer une base de fonctions U_i de l'espace de Krylov de dimension M, obtenue par applications successives de l'opérateur au second membre du problème. La philosophie de cette approche est différente de celles mentionnées plus haut puisque les fonctions U_i ne sont pas déterministes mais appartiennent à $\mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$. Cela ne résout donc pas le problème des besoins mémoires. De plus, la construction et la résolution du problème définissant les fonctions λ_i sont relativement difficiles et coûteuses, ce qui conduit à restreindre le nombre de fonctions U_i calculées. Cette méthode est pour l'instant limitée à une certaine classe de problèmes linéaires.[1]

Remarque II.1 (***Approches stochastiques non-intrusives et réduction de modèle***)

> *Les travaux présentés dans ce chapitre concernent le développement d'une méthode de réduction de modèle dans le cadre des approches stochastiques spectrales de type Galerkin. On notera que dans le cadre d'approches stochastiques non-intrusives (Monte-Carlo, approches spectrales par projection L^2, ...), nécessitant la résolution d'un grand nombre de calculs déterministes, des techniques de réduction de modèle utilisées en analyse paramétrique ou analyse multi-résolution pourraient également s'appliquer efficacement : méthodes basées sur la Proper Orthogonal Decomposition [170], ré-utilisation des espaces de Krylov dans le cadre de solveurs itératifs [69], méthode "Reduced Basis" [100, 101, 17]... Cette dernière méthode a d'ailleurs récemment été appliquée à la résolution de problèmes stochastiques par la méthode de Monte-Carlo [139].*

2 Méthode de décomposition spectrale généralisée (GSD)

L'idée de la méthode de décomposition spectrale généralisée (GSD) est de construire une décomposition optimale de la solution du problème (II.1) sous la forme (II.2) sans fixer *a priori* les fonctions stochastiques λ_i ni les fonctions déterministes U_i. La notion d'optimalité est bien sûr liée à la manière d'évaluer la précision de cette décomposition. Une décomposition peut être considérée comme optimale si l'ordre de la décomposition est minimum pour une certaine mesure de la précision. Dans sa forme actuelle, le principe de la méthode GSD est de définir les bases de fonctions en se basant sur un double critère d'orthogonalité de Galerkin. On montre alors que le problème de la recherche des bases de fonctions se ramène à la recherche d'un sous-espace invariant d'un certain opérateur. Ce problème peut être assimilé à un problème aux valeurs propres dont l'espace propre dominant conduit aux fonctions optimales recherchées. La méthode GSD peut être vue comme une généralisation des méthodes classiques de décomposition spectrale (Karhunen-Loève).

La méthode a initialement été introduite pour la résolution d'une classe d'équations aux dérivées partielles stochastiques elliptiques [119]. Dans [120], la méthode a été appliquée à la résolution d'un

[1] Si on utilise une représentation fonctionnelle classique (projection de l'espace de Krylov sur $\mathcal{S}_P$), la méthode Stochastic Reduced Basis [116], dans sa version initiale, correspond exactement à un algorithme de Krylov classique (type Arnoldi) pour la résolution du système d'équations de Galerkin (II.1). Elle ne peut donc pas être véritablement assimilée à une méthode de réduction de modèle.

problème non-linéaire pour lequel l'utilisation d'un solveur non-linéaire global conduisait à la résolution de problèmes linéaires successifs. Chaque problème stochastique linéaire était alors résolu en suivant les principes de la méthode GSD linéaire. Plus tard, la méthode a été étendue à une plus large classe de problèmes linéaires et de nouveaux algorithmes de construction de la décomposition ont été proposés [121]. Plus récemment, une véritable extension de la méthode au cadre non-linéaire a été proposée [125].

Ici, nous donnons une synthèse de ces différents développements dans un cadre relativement général et en omettant des détails mathématiques et techniques qui pourront être trouvés dans les articles mentionnés plus haut.

2.1 Notations préliminaires

Pour simplifier la présentation, nous travaillerons par la suite en notations matricielles en assimilant un élément $u \in \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$ à un vecteur aléatoire $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$. On notera cependant que la stratégie et les résultats obtenus peuvent être aisément transposés au cadre initial ("continu"). Le problème (II.1) sera donc réécrit sous la forme équivalente suivante :

$$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P, \quad A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = B(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{II.3}$$

où B est une forme linéaire sur $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ et où A est une forme bilinéaire sur $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ (voire semi-linéaire dans le cas de problèmes non-linéaires). Nous introduisons également $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ et un opérateur $\mathbf{A}$ (éventuellement non-linéaire) de $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ dans $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, définis par

$$A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := E(\mathbf{v}^T \mathbf{A}(\mathbf{u})), \quad B(\mathbf{v}) := E(\mathbf{v}^T \mathbf{b}). \tag{II.4}$$

La décomposition spectrale recherchée est alors notée

$$\mathbf{u}^{(M)} = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i \mathbf{U}_i, \quad \mathbf{U}_i \in \mathbb{R}^n, \quad \lambda_i \in \mathcal{S}_P, \tag{II.5}$$

ou encore

$$\mathbf{u}^{(M)} = \mathbf{W}\mathbf{\Lambda} \tag{II.6}$$

avec $\mathbf{W} = (\mathbf{U}_1 \dots \mathbf{U}_M) \in \mathbb{R}^{n \times M}$ la matrice dont les colonnes sont les vecteurs déterministes et $\mathbf{\Lambda} = (\lambda_1 \dots \lambda_M)^T \in \mathbb{R}^M \otimes \mathcal{S}_P$ le vecteur aléatoire dont les composantes sont les variables aléatoires.

2.2 Décomposition minimale

Il apparaît naturel d'imposer aux M vecteurs $\mathbf{U}_i$ d'être linéairement indépendants. Dans le cas contraire, on pourrait en effet trouver une décomposition équivalente avec un ordre inférieur à M. On impose donc à $\mathbf{W}$ d'appartenir à la variété de Stiefel non-compacte (voir par exemple [47]) :

$$\mathbb{S}(n, M) = \{\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times M}; rank(\mathbf{W}) = M\} \tag{II.7}$$

Pour la même raison, on impose aux λ_i d'être linéairement indépendants, c'est-à-dire d'engendrer un sous-espace de $\mathcal{S}_P$ de dimension M. On impose donc à $\mathbf{\Lambda}$ d'appartenir à

$$\mathbb{S}^*(P, M) = \{\mathbf{\Lambda} = (\lambda_1 \dots \lambda_M)^T \in \mathbb{R}^M \otimes \mathcal{S}_P; dim(span(\{\lambda_i\}_{i=1}^M)) = M\}. \tag{II.8}$$

$\mathbb{R}^M \otimes \mathcal{S}_P$ étant isomorphe à $\mathbb{R}^{P \times M}$, $\mathbb{S}^*(P, M)$ est isomorphe à la variété de Stiefel non-compacte $\mathbb{S}(P, M)$. Finalement, on recherchera une décomposition dite "minimale" sous la forme

$$\mathbf{u}^{(M)} = \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}, \quad (\mathbf{W}, \mathbf{\Lambda}) \in \mathbb{S}(n, M) \times \mathbb{S}^*(P, M) \tag{II.9}$$

2.3 Définition de la décomposition

Si $\mathbf{W}$ était fixé, il serait naturel de définir $\mathbf{\Lambda}$ par le critère d'orthogonalité de Galerkin suivant :

$$A(\mathbf{W}\mathbf{\Lambda}, \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}^*) = B(\mathbf{W}\mathbf{\Lambda}^*) \quad \forall \mathbf{\Lambda}^* \in \mathbb{R}^M \otimes \mathcal{S}_P. \tag{II.10}$$

Notons $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W})$ la solution de ce problème, avec $\mathbf{f}$ le mapping défini sur $\mathbb{S}(n, M)$ et à valeurs dans $\mathbb{R}^M \otimes \mathcal{S}_P$. De la même manière, si $\mathbf{\Lambda}$ était fixé, il serait naturel de définir $\mathbf{W}$ par le critère d'orthogonalité de Galerkin suivant :

$$A(\mathbf{W}\mathbf{\Lambda}, \mathbf{W}^*\mathbf{\Lambda}) = B(\mathbf{W}^*\mathbf{\Lambda}) \quad \forall \mathbf{W}^* \in \mathbb{R}^{n\times M}. \tag{II.11}$$

Notons $\mathbf{W} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda})$ la solution de ce problème, avec $\mathbf{F}$ le mapping défini sur $\mathbb{S}^*(P, M)$ et à valeurs dans $\mathbb{R}^{n\times M}$. Lorsque ni $\mathbf{W}$ ni $\mathbf{\Lambda}$ ne sont fixés *a priori*, il paraît alors naturel de définir le couple $(\mathbf{W}, \mathbf{\Lambda}) \in \mathbb{S}(n, M) \times \mathbb{S}^*(P, M)$ de telle manière à vérifier simultanément

$$\mathbf{W} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda}) \quad \text{et} \quad \mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W}). \tag{II.12}$$

2.4 Interprétation comme un problème aux valeurs propres

Le problème (II.12) peut être formulé comme un problème en $\mathbf{W}$: trouver $\mathbf{W} \in \mathbb{S}(n, M)$ tel que

$$\mathbf{W} = \mathbf{F} \circ \mathbf{f}(\mathbf{W}) := \mathbf{T}(\mathbf{W}), \tag{II.13}$$

qui apparaît comme un problème de point fixe de l'opérateur $\mathbf{T} : \mathbb{S}(n, M) \to \mathbb{R}^{n\times M}$. Par la suite, on notera $\mathbb{GL}(M)$ l'ensemble des matrices inversibles de $\mathbb{R}^{M\times M}$.

Propriété II.2 ***(Propriété d'homogénéité)***

Les mappings $\mathbf{f}$ et $\mathbf{F}$ possèdent les propriétés d'homogénéité suivantes : $\forall \mathbf{P} \in \mathbb{GL}(M)$,

$$\mathbf{f}(\mathbf{W}\mathbf{P}) = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{W}),$$
$$\mathbf{F}(\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}) = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{P}^{-1}.$$

Il en découle la propriété d'homogénéité suivante pour le mapping $\mathbf{T}$:

$$\mathbf{T}(\mathbf{W}\mathbf{P}) = \mathbf{T}(\mathbf{W})\mathbf{P}, \quad \forall \mathbf{P} \in \mathbb{GL}(M).$$

D'après la propriété II.2, si $\mathbf{W} \in \mathbb{S}(n, M)$ vérifie l'équation (II.13), alors, $\forall \mathbf{P} \in \mathbb{GL}(M)$, $\mathbf{W}\mathbf{P} \in \mathbb{S}(n, M)$ vérifie également cette équation, les deux solutions conduisant à la même décomposition

$$\mathbf{u}^{(M)} = \mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W}) = \mathbf{W}\mathbf{P}\mathbf{f}(\mathbf{W}\mathbf{P}). \tag{II.14}$$

Cela signifie que les matrices $\mathbf{W}$ sont reliées par la relation d'équivalence suivante

$$\mathbf{W}_1 \sim \mathbf{W}_2 \Leftrightarrow \exists \mathbf{P} \in \mathbb{GL}(M) \text{ tel que } \mathbf{W}_1 = \mathbf{W}_2\mathbf{P}.$$

L'espace quotient $(\mathbb{S}(n, M)/\sim)$ est la variété de Grassmann des sous-espaces linéaires de $\mathbb{R}^n$ de dimension M [47, 1], notée $Gr(n, M)$. Des matrices $\mathbf{W} \in \mathbb{S}(n, M)$ sont donc équivalentes si leurs colonnes engendrent le même sous-espace linéaire de $\mathbb{R}^n$ de dimension M. Le problème II.2 se ramène donc à la recherche d'un sous-espace de $\mathbb{R}^n$ "stable par l'opérateur $\mathbf{T}$". Ce problème peut en fait être interprété comme un problème aux valeurs propres. Un espace invariant sera appelé espace propre généralisé de $\mathbf{T}$. Cette interprétation est cruciale puisqu'elle permet de caractériser le meilleur espace propre vis-à-vis de la décomposition (II.14), qui s'avère être l'espace propre dominant de $\mathbf{T}$. Dans des cas particuliers, le problème (II.13) coincide exactement avec un problème aux valeurs propres classique, associé avec une décomposition spectrale classique de la solution. Dans le cas général, cette interprétation est motivée par l'observation des propriétés de ce problème. Cela conduit alors naturellement à l'introduction d'algorithmes dédiés, inspirés des algorithmes de résolution de problèmes aux valeurs propres classiques. Ces algorithmes seront introduits dans la section 3.

Remarque II.3 (***Formulation d'un problème équivalent en $\mathbf{\Lambda}$***)

Le problème (II.12) peut également être formulé comme un problème en $\mathbf{\Lambda}$: trouver $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{S}^*(P, M)$ tel que

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f} \circ \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda}) := \mathbf{T}^*(\mathbf{\Lambda}), \tag{II.15}$$

où le mapping $\mathbf{T}^* : \mathbb{S}^*(P, M) \to \mathbb{R}^M \otimes \mathcal{S}_P$ possède la propriété d'homogénéité suivante :

$$\mathbf{T}^*(\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}) = \mathbf{P}\mathbf{T}^*(\mathbf{\Lambda}), \quad \forall \mathbf{P} \in \mathbb{GL}(M).$$

Le problème (II.15) peut encore être interprété comme un problème aux valeurs propres, conduisant à une décomposition $\mathbf{u}^{(M)} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{\Lambda}$. Les problèmes (II.13) et (II.15) s'avèrent en fait équivalents. En effet, si $\mathbf{W}$ est solution de (II.13), alors $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W})$ est solution de (II.15) et la décomposition spectrale généralisée associée peut s'écrire $\mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W}) = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{\Lambda}$. Réciproquement, si $\mathbf{\Lambda}$ est solution de (II.15), alors $\mathbf{W} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda})$ est solution de (II.13) et la décomposition spectrale généralisée associée peut s'écrire $\mathbf{F}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{\Lambda} = \mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W})$.

2.5 Cas particuliers

Quelques cas particuliers sont détaillés afin de mieux saisir l'interprétation du problème (II.13) comme un problème aux valeurs propres et l'interprétation de la décomposition obtenue comme une décomposition spectrale généralisée.

2.5.1 Cas où A est bilinéaire symétrique continue coercive

Dans le cas où A est une forme bilinéaire symétrique continue coercive sur $\mathbb{R}^n \otimes L^2(\Theta, dP)$, elle définit un produit scalaire

$$< \mathbf{u}, \mathbf{v} >_A = A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \equiv E(\mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{u})$$

On note $\|\mathbf{v}\|_A = \sqrt{A(\mathbf{v}, \mathbf{v})}$ la norme associée, équivalente au produit scalaire naturel sur $\mathbb{R}^n \otimes L^2(\Theta, dP)$. On montre alors les résultats suivants (voir [119, 121]).

Propriété II.4

Dans le cas où A est une forme bilinéaire symétrique continue coercive sur $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, la décomposition optimale $\mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W})$ vis-à-vis de la norme induite par A est telle que $\mathbf{W}$ est solution du problème d'optimisation suivant :

$$\mathbf{W} = \underset{\mathbf{W} \in \mathbb{S}(n,M)}{argmax} \; R(\mathbf{W}) \tag{II.16}$$

où $R(\mathbf{W})$ est la fonctionnelle définie par

$$R(\mathbf{W}) = Trace(\mathbf{R}(\mathbf{W})) \tag{II.17}$$

$$avec \quad \mathbf{R}(\mathbf{W}) = E(\mathbf{f}(\mathbf{W})\mathbf{b}^T\mathbf{W}) \tag{II.18}$$

La distance en norme A par rapport à la solution exacte $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ vérifie :

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W})\|_A^2 = \|\mathbf{u}\|_A^2 - R(\mathbf{W}) \tag{II.19}$$

Propriété II.5

Les fonctionnelles $\mathbf{R}(\mathbf{W})$ et $R(\mathbf{W})$, définies par les équations (II.18) et (II.17), vérifient les propriétés suivantes :

(i) *Homogénéité* : $\forall \mathbf{P} \in \mathbb{GL}(M)$,

$$\mathbf{R}(\mathbf{W}\mathbf{P}) = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{R}(\mathbf{W})\mathbf{P} \quad et \quad R(\mathbf{W}\mathbf{P}) = R(\mathbf{W}).$$

(ii) *Stationarité* : $\mathbf{W}$ vérifie le problème aux valeurs propres (II.13) si et seulement si il rend stationnaire $R(\mathbf{W})$.

Les propriétés précédentes permettent d'interpréter le problème (II.13) comme un problème aux valeurs propres. La fonctionnelle $R(\mathbf{W})$ (resp. $\mathbf{R}(\mathbf{W})$) apparaît comme une généralisation d'un quotient de Rayleigh scalaire (resp. matriciel) associé au problème aux valeurs propres (II.13). L'élément $\mathbf{W}$ maximisant ce quotient de Rayleigh est associé à l'espace propre dominant de $\mathbf{T}$ et conduit à la meilleure décomposition spectrale au sens de l'opérateur A.

Remarque II.6

On notera que la propriété de continuité est triviale dans le cas de la dimension finie. Cependant, les propriétés énoncées peuvent être généralisées au cadre de la dimension infinie pour lequel cette condition est nécessaire.

2.5.2 Cas d'un opérateur linéaire déterministe

Dans le cas d'un problème à opérateur linéaire déterministe et à second membre aléatoire, la forme bilinéaire A satisfait : pour $\mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^n$,

$$A(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{V}$$

où $\mathbf{A}$ est une matrice déterministe. Dans ce cas particulier, la fonctionnelle $\mathbf{R}(\mathbf{W})$ s'écrit

$$\mathbf{R}(\mathbf{W}) = (\mathbf{W}^T \mathbf{A} \mathbf{W})^{-1} \mathbf{W}^T E(\mathbf{b}\mathbf{b}^T) \mathbf{W}, \tag{II.20}$$

et le mapping $\mathbf{T}$ s'écrit

$$\mathbf{T}(\mathbf{W}) = \mathbf{A}^{-1} E(\mathbf{b}\mathbf{b}^T) \mathbf{W} \mathbf{R}(\mathbf{W})^{-1}. \tag{II.21}$$

Le problème (II.13) correspond donc au problème aux valeurs propres généralisé suivant :

$$\mathbf{A}\mathbf{W}\mathbf{R}(\mathbf{W}) = E(\mathbf{b}\mathbf{b}^T)\mathbf{W} \tag{II.22}$$

De plus, si $\mathbf{A}$ est symétrique définie positive, $\mathbf{R}$ apparaît comme le quotient de Rayleigh matriciel classique associé au problème aux valeurs propres (II.22) [143]. La décomposition optimale $\mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W})$ obtenue est alors la décomposition spectrale classique de la solution $\mathbf{u} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ dans la métrique induite par $\mathbf{A}$.

3 Algorithmes pour la construction de la GSD

Nous avons vu dans la section précédente que la construction de la décomposition spectrale généralisée (GSD) demande la résolution d'un problème

$$\mathbf{T}(\mathbf{W}) = \mathbf{W}, \tag{II.23}$$

interprété comme un problème aux valeurs propres. La GSD optimale d'ordre M est associée au sous-espace propre dominant de dimension M de $\mathbf{T}$. Cette interprétation conduit naturellement à s'inspirer d'algorithmes classiques permettant la capture des espaces propres dominants d'opérateurs linéaires.

3.1 Subspace Iteration algorithm (SI-GSD)

Pour les problèmes aux valeurs propres classiques, un algorithme standard pour la recherche d'un espace propre dominant est l'algorithme des sous-espaces itérés (Subspace Iteration). Il consiste à construire la série $\mathbf{W}^{(k+1)} = \mathbf{T}(\mathbf{W}^{(k)})$, qui converge vers une matrice dont les colonnes engendrent l'espace propre dominant de $\mathbf{T}$. L'extension à la résolution du problème (II.23) est immédiate et conduit à l'algorithme 1.

Algorithm 1 SUBSPACE ITERATION (SI-GSD)

1: *Initialize* $\mathbf{W}^{(0)} \in \mathbb{S}(n, M)$
2: ***for*** $k = 1$ *to* k_{max} ***do***
3: *Compute* $\mathbf{W}^{(k)} = \mathbf{T}(\mathbf{W}^{(k-1)})$
4: *Orthonormalize* $\mathbf{W}^{(k)}$ *(e.g. by QR factorization)*
5: ***end for***
6: *Set* $\mathbf{W} = \mathbf{W}^{(k)}$ *and compute* $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W})$

A chaque itération k, le calcul de $\mathbf{T}(\mathbf{W}^{(k-1)})$ (étape 3) peut être décomposé en 2 étapes :

$$\mathbf{\Lambda}^{(k-1)} = \mathbf{f}(\mathbf{W}^{(k-1)}) \quad \text{et} \quad \mathbf{W}^{(k)} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda}^{(k-1)}) \tag{II.24}$$

La première étape consiste à résoudre un problème stochastique sur une base réduite déterministe donnée, ce qui correspond à un problème de taille $M \times P$. La seconde étape consiste à résoudre un problème déterministe sur une base stochastique réduite donnée, ce qui correspond à un problème de taille $M \times n$. Les itérations de (SI-GSD) demandent donc au plus la résolution de k_{max} problèmes de taille $M \times P$ et k_{max} problèmes de taille $M \times n$.

On observe en pratique que l'étape 1 d'initialisation a peu d'influence sur la convergence de l'algorithme. Un choix simple et efficace consiste à choisir un vecteur aléatoire $\mathbf{\Lambda}^{(0)}(\theta) = \sum_\alpha \mathbf{\Lambda}_\alpha^{(0)} H_\alpha(\theta) \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, avec des coefficients $\mathbf{\Lambda}_\alpha^{(0)}$ tirés aléatoirement, et à calculer $\mathbf{W}^{(0)} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda}^{(0)})$.

Remarque II.7

L'algorithme 1 avec $M = 1$ correspond à une méthode des puissances (power algorithm) qui converge (en général) vers le vecteur propre dominant de $\mathbf{T}$. L'orthogonalisation à chaque itération (étape 4) s'avère nécessaire d'un point de vue numérique. Elle évite la dégénérescence de $\mathbf{W}$ vers une matrice de rang 1 dont les colonnes tendent ce vecteur propre dominant.

Remarque II.8

L'algorithme 1 peut être également interprété comme un algorithme pour trouver le $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W})$ associé à l'espace propre dominant du problème aux valeurs propres $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{T}^*(\mathbf{\Lambda})$, équivalent au problème $\mathbf{W} = \mathbf{T}(\mathbf{W})$ (voir remarque II.3).

3.2 Arnoldi type algorithm (A-GSD)

L'algorithme 1 (Subspace Iteration) peut être considéré comme un algorithme de référence conduisant à la décomposition spectrale généralisée idéale, associée au sous-espace propre dominant de $\mathbf{T}$. Ici, nous introduisons un algorithme qui donne une approximation de cette décomposition idéale et qui conduit à des gains significatifs en temps de calcul. Cet algorithme est inspiré de la technique d'Arnoldi pour la résolution des problèmes aux valeurs propres classiques [140, 68]. L'idée est de trouver une matrice $\mathbf{W}$ dont les colonnes engendrent un "sous-espace de Krylov généralisé" de l'opérateur $\mathbf{T}$ et de construire ensuite le vecteur aléatoire associé $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W})$. Le sous-espace obtenu peut être interprété comme une approximation de Ritz de l'espace propre dominant de $\mathbf{T}$. Le sous-espace de Krylov $\mathcal{K}_M(\mathbf{T}, \mathbf{U}_1)$, de dimension M, asscocié à l'opérateur $\mathbf{T}$ et à un vecteur initial $\mathbf{U}_1 \in \mathbb{R}^n$ peut être défini comme suit :

$$\mathcal{K}_M(\mathbf{T}, \mathbf{U}_1) = span(\{\mathbf{U}_i\}_{i=1}^M\}, \quad \text{avec } \mathbf{U}_i = \Pi_{\mathcal{K}_{i-1}}^{\perp}(\mathbf{T}(\mathbf{U}_{i-1})),\ i = 2 \dots M \tag{II.25}$$

où $\Pi_{\mathcal{K}_i^\perp}$ désigne le projecteur sur le complément orthogonal de $\mathcal{K}_{i-1}(\mathbf{T}, \mathbf{U}_1)$. Cette stratégie conduit à l'algorithme suivant.

Algorithm 2 Arnoldi type algorithm (A-GSD)

1: *Initialize* $\mathbf{U}_1 \in \mathbb{R}^n$ *and set* $\mathbf{U}_1 = \frac{\mathbf{U}_1}{\|\mathbf{U}_1\|}$
2: ***for*** $i = 1$ *to* M ***do***
3: *Compute* $\mathbf{U} = \mathbf{T}(\mathbf{U}_i)$
4: *Compute* $\mathbf{U}_{i+1} = \mathbf{U} - \sum_{j=1}^{i}(\mathbf{U}_j^T\mathbf{U})\mathbf{U}_j$ *(Orthogonalization step)*
5: ***if*** $\|\mathbf{U}_{i+1}\| < \epsilon\|\mathbf{U}\|$ ***then***
6: *break*
7: ***end if***
8: $\mathbf{U}_{i+1} = \frac{\mathbf{U}_{i+1}}{\|\mathbf{U}_{i+1}\|}$
9: ***end for***
10: *Set* $\mathbf{W} = (\mathbf{U}_1 \dots \mathbf{U}_i)$ *and compute* $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W})$

La construction du sous-espace de Krylov de dimension M (étapes 2 à 9) nécessite d'appliquer $(M-1)$ fois le mapping $\mathbf{T}$ à un vecteur. Cela nécessite donc la résolution de $(M-1)$ problèmes de taille P et de $(M-1)$ problèmes déterministes de taille n. Le calcul de $\mathbf{\Lambda}$ (étape 10) nécessite de résoudre un problème de taille $M \times P$. Cet algorithme conduit à des gains significatifs comparé à l'algorithme 1 (Subspace Iteration). En pratique, pour l'initialisation, on introduit une fonction $\lambda_0(\theta) = \sum_\alpha \lambda_{0,\alpha} H_\alpha(\theta) \in \mathcal{S}_P$ avec des coefficients $\lambda_{0,\alpha}$ tirés aléatoirement, puis on calcule le vecteur initial $\mathbf{U}_1 = \mathbf{F}(\lambda_0)$ en résolvant un premier problème déterministe.

En pratique, on observe les mêmes propriétés que pour les problèmes aux valeurs propres classiques. Notamment, quand M augmente, l'angle entre $\mathcal{K}_M$ et le sous espace propre dominant de $\mathbf{T}$ de dimension donnée $M' < M$ tend vers zéro (à condition que $\mathcal{K}_M$ ne stagne pas sur un sous-espace de dimension inférieure à n). En d'autres termes, les premiers modes de la décomposition optimale tendent à être contenus dans l'espace $\mathcal{K}_M$ lorsque M augmente. Dans le cadre des problèmes aux VP classiques, cette propriété est associée à la convergence des vecteurs de Ritz dominant vers les vecteurs propres dominants de l'opérateur.

Remarque II.9

Un algorithme d'Arnoldi peut également être écrit pour la résolution du problème aux valeurs propres $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{T}^*(\mathbf{\Lambda})$. *Il consiste à générer une base orthogonale du sous-espace de Krylov de l'opérateur* $\mathbf{T}^*$, *défini par*

$$\mathcal{K}_M(\mathbf{T}^*, \lambda_1) = span(\{\lambda_i\}_{i=1}^M\}) \subset \mathcal{S}_P, \quad \text{avec } \lambda_i = \Pi^\perp_{\mathcal{K}_{i-1}}(\mathbf{T}^*(\lambda_{i-1})),\ i = 2 \dots M, \tag{II.26}$$

et à actualiser les vecteurs déterministes en résolvant $\mathbf{W} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda})$. $\Pi_{\mathcal{K}^\perp_{i-1}}$ *désigne le projecteur sur le complément orthogonal de* $\mathcal{K}_{i-1}(\mathbf{T}^*, \lambda_1)$. *Le choix d'un point de vue (résolution du problème aux VP sur* $\mathbf{T}$ *ou sur* $\mathbf{T}^*$*) dépend donc uniquement du problème d'actualisation. En pratique, on se posera donc la question de savoir si le problème d'actualisation de* $\mathbf{W}$ *(résolution d'un problème stochastique sur base déterministe réduite) est moins coûteux que le problème d'actualisation de* $\mathbf{\Lambda}$ *(résolution d'un problème déterministe sur base stochastique réduite). Le choix peut également être dicté par la disponibilité des solveurs associés à ces problèmes.*

Remarque II.10

Pour un problème aux valeurs propres classiques (cas particulier d'un problème stochastique à opérateur déterministe), l'espace $\mathcal{K}_M(\mathbf{T}, \mathbf{U}_1)$ *défini par (II.25) coincide avec la définition suivante (classique) du sous-espace de Krylov, ne faisant pas intervenir le projecteur orthogonal :*

$$\mathcal{K}_M(\mathbf{T}, \mathbf{U}_1) = span(\{\mathbf{U}_i\}_{i=1}^M\}, \quad \text{avec } \mathbf{U}_i = \mathbf{T}(\mathbf{U}_{i-1}),\ i = 2 \dots M. \tag{II.27}$$

Dans le cas général de notre pseudo-problème aux valeurs propres, les espaces définis par (II.25) et (II.27) ne coincident pas nécessairement. Cela est dû aux propriétés de non-linéarité de l'opérateur $\mathbf{T}$. *En particulier, l'espace engendré par l'algorithme d'Arnoldi peut dépendre de la métrique utilisée pour l'orthogonalisation. Bien que les premières expériences numériques semblent montrer que les espaces engendrés diffèrent très peu (angle faible entre les deux espaces), cette question*

mérite d'être approfondie. Notamment, il serait intéressant d'étudier plus présicément l'impact de la métrique d'orthogonalisation sur la qualité du sous-espace de Krylov généralisé engendré. Bien sûr, dans le cas de problèmes aux valeurs propres classiques, cette question ne se pose pas.

3.3 Restart des algorithmes par déflation de l'opérateur

Bien sûr, quand on utilise les algorithmes 1 ou 2 pour obtenir une approximation du problème stochastique initial II.1, on ne connaît pas *a priori* l'ordre M de décomposition requis pour une précision donnée. En supposant qu'une première decomposition d'un certain ordre M ait été construite, on peut bien sûr estimer l'erreur associée, en calculant par exemple la norme du résidu. Si la décomposition n'atteint pas la précision souhaitée, on peut alors réutiliser les algorithmes 1 ou 2 avec un ordre M plus élevé.

Une autre possibilité consiste à construire les termes suivants de la décomposition en utilisant une "déflation" de l'opérateur $\mathbf{T}$. Supposons qu'une première décomposition d'ordre r, notée $\mathbf{u}_r = \mathbf{W}_r\mathbf{\Lambda}_r$, ait été constuite par un des algorithmes précédents. On peut alors définir un couple complémentaire $(\mathbf{W}, \mathbf{\Lambda}) \in \mathbb{S}(n,s) \times \mathbb{S}^*(P,s)$ devant vérifier :

$$A(\mathbf{u}_r + \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}, \mathbf{W}^*\mathbf{\Lambda}) = B(\mathbf{W}^*\mathbf{\Lambda}) \quad \forall \mathbf{W} \in \mathbb{S}(n,s) \tag{II.28}$$

$$A(\mathbf{u}_r + \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}, \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}^*) = B(\mathbf{W}\mathbf{\Lambda}^*) \quad \forall \mathbf{\Lambda}^* \in \mathbb{S}^*(P,s) \tag{II.29}$$

On introduit le mapping $\mathbf{f}(\cdot;\mathbf{u}_r)$ qui à $\mathbf{W} \in \mathbb{S}(n,s)$ associe $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W};\mathbf{u}_r) \in \mathbb{R}^s \otimes \mathcal{S}_P$ solution de l'équation (II.28). On introduit également le mapping $\mathbf{F}(\cdot;\mathbf{u}_r)$ qui à $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{S}(P,s)$ associe $\mathbf{W} = \mathbf{F}(\mathbf{\Lambda};\mathbf{u}_r) \in \mathbb{R}^{n\times s}$ solution de l'équation (II.29). La recherche du nouveau couple peut alors se ramener à un problème en $\mathbf{W}$: trouver $\mathbf{W} \in \mathbb{S}(n,s)$ tel que

$$\mathbf{W} = \mathbf{F}(\mathbf{f}(\mathbf{W};\mathbf{u}_r);\mathbf{u}_r) := \mathbf{T}(\mathbf{W};\mathbf{u}_r) \tag{II.30}$$

Les mappings $\mathbf{F}(\cdot;\mathbf{u}_r)$, $\mathbf{f}(\cdot;\mathbf{u}_r)$ et $\mathbf{T}(\cdot;\mathbf{u}_r)$ vérifiant toujours les propriétés d'homogénéité II.2, le problème peut encore être interprété comme la recherche d'un espace propre dominant de l'opérateur "déflaté" $\mathbf{T}(\cdot;\mathbf{u}_r)$. Ce problème peut donc être résolu par un des algorithmes précédents. Cette stratégie conduit à l'algorithme global 3.

Algorithm 3 RESTARTED ALGORITHM BY OPERATOR DEFLATION

1: *Set* $\mathbf{u}_0 = 0$, $\mathbf{W}_0 = \emptyset$, $\mathbf{\Lambda}_0 = \emptyset$
2: ***for*** $r = 1$ *to* r_{max} ***do***
3: *Compute the* M_r*-dimensional dominant eigenspace* $\widehat{\mathbf{W}}_r$ *of the deflated operator* $\mathbf{T}(\cdot;\mathbf{u}_{r-1})$
4: *Set* $\mathbf{W}_r = (\mathbf{W}_{r-1}\ \widehat{\mathbf{W}}_r)$
5: *(complete update) Compute* $\mathbf{\Lambda}_r = \mathbf{f}(\mathbf{W}_r;0)$
(partial update) Compute $\widehat{\mathbf{\Lambda}}_r = \mathbf{f}(\widehat{\mathbf{W}}_r;\mathbf{u}_{r-1})$ *and set* $\mathbf{\Lambda}_r = (\mathbf{\Lambda}_{r-1}^T\ \widehat{\mathbf{\Lambda}}_r^T)^T$
6: *Set* $\mathbf{u}_r = \mathbf{W}_r\mathbf{\Lambda}_r$
7: *Check convergence*
8: ***end for***

L'algorithme 3 introduit deux variantes qui diffèrent à l'étape 5. Dans le cas de l'actualisation complète, les variables aléatoires de la décomposition sont actualisées par rapport à l'ensemble de la base réduite déterministe calculée. Les variables aléatoires calculées au cours des déflations précédentes sont donc remplacées par ces nouvelles variables. Dans le cas de l'actualisation partielle, on opère uniquement un calcul des variables aléatoires complémentaires, en conservant les variables précédemment calculées. En pratique, l'actualisation complète conduit à une meilleure précision de la décomposition pour un ordre donné.

Remarque II.11

Dans le cas d'un opérateur linéaire déterministe (symétrique ou non), on peut prouver (voir [121]) que ces deux variantes sont équivalentes et qu'elles correspondent exactement à une procédure

de déflation classique pour résoudre le problème aux valeurs propres (II.22). La preuve de cette propriété consiste à montrer que la somme des sous-espaces propres dominants de dimension M_r des opérateurs déflatés $\mathbf{T}(\cdot;\mathbf{u}_{r-1})$ successifs est le sous-espace propre dominant de dimension $(\sum_r M_r)$ de l'opérateur initial $\mathbf{T}(\cdot;0)$. Dans le cas général, cette propriété des problèmes aux valeurs propres classiques n'est plus vérifiée (observé numériquement).

Remarque II.12

En fait, l'actualisation complète peut être interprétée comme une itération de sous-espace sur le problème aux valeurs propres initial. Bien sûr, la précision de la GSD pourrait être améliorée en opérant des itérations de sous-espace supplémentaires. Cependant, en pratique, on observe que ces itérations supplémentaires n'améliorent pas significativement la qualité de la décomposition. Comme ces itérations sont relativement coûteuses, mieux vaut les éviter en pratique.

Question ouverte II.13

Une question importante concerne l'étude de la relation entre les espaces propres généralisés des opérateurs déflatés $\mathbf{T}(\cdot;\mathbf{u}_r)$ et les espaces propres de l'opérateur initial $\mathbf{T}(\cdot;0)$. Notamment, on peut se poser la question suivante : existe-t-il dans certains cas une quelconque relation d'orthogonalité entre ces sous-espaces ? La réponse est bien sûr connue dans le cas des problèmes aux valeurs propres classiques. Dans le cas général, la réponse à cette question pourrait permettre de modifier les algorithmes et peut-être d'obtenir directement la GSD optimale, sans effectuer une actualisation complète des variables aléatoires. Cette question est liée à la remarque II.10.

Remarque II.14

La procédure de déflation proposée peut également être intéressante dans le cas de la résolution de problèmes de grande taille, demandant de travailler avec de grandes dimensions des espaces d'approximation (grand n ou grand P), ou dans le cas où une décomposition d'ordre M élevée est nécessaire pour atteindre une bonne précision. Dans ces cas, les algorithmes 1 et 2 nécessitent en effet la résolution de problèmes de taille $M \times P$ ou $M \times n$, qui peut quand même s'avérer coûteuse. L'algorithme 3 avec actualisation partielle ne nécessite que la résolution de problèmes de taille $M_r \times n$ ou $M_r \times P$, où un ordre M_r maximum peut être fixé en fonction des capacités de calcul disponibles.

Si on utilise $M_r = 1$ dans l'algorithme 3, l'utilisation d'une méthode des puissances permet la construction du vecteur propre dominant de l'opérateur déflaté. Cela conduit à une méthode des puissances avec déflation, initialement introduite dans [119]. Cela conduit à l'algorithme 4 pour construire une décomposition d'ordre M, comprenant deux variantes (avec ou sans update complet des variables aléatoires).

Algorithm 4 Power-type algorithm (P-GSD)

Set $\mathbf{u}_0 = 0$, $\mathbf{W}_0 = \emptyset$, $\mathbf{\Lambda}_0 = \emptyset$
for $r = 1$ *to* M ***do***
  Initialize $\lambda_r \in \mathcal{S}_P$
  for $k = 1 \ldots k_{max}$ ***do***
    Compute $\mathbf{U}_r = \mathbf{F}(\lambda_r;\mathbf{u}_{r-1})$
    Normalize $\mathbf{U}_r$
    Compute $\lambda_r = \mathbf{f}(\mathbf{U}_r;\mathbf{u}_{r-1})$
    Check convergence
  end for
  Set $\mathbf{W}_r = (\mathbf{W}_{r-1}\ \mathbf{U}_r)$
  (complete update) Compute $\mathbf{\Lambda}_r = \mathbf{f}(\mathbf{W}_r;0)$
  (no update) Set $\mathbf{\Lambda}_r = (\mathbf{\Lambda}_{r-1}^T\ \lambda_r)^T$
  Set $\mathbf{u}_r = \mathbf{W}_r\mathbf{\Lambda}_r$
end for

3.4 Capacité à capturer une solution avec une "faible dimensionalité"

Définition II.15

On peut définir la "dimensionalité" $M_{\mathbf{u}}$ d'un vecteur aléatoire $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ comme l'ordre M minimum qui conduit à une décomposition exacte de $\mathbf{u}$ sous la forme (II.5), i.e.

$$M_{\mathbf{u}} = min\{M \in \mathbb{N}; \mathbf{u} = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i \mathbf{U}_i,\ \lambda_i \in \mathcal{S}_P,\ \mathbf{U}_i \in \mathbb{R}^n\}$$

Un algorithme GSD "idéal" devrait être capable de capturer la solution exacte en construisant de manière automatique une base réduite optimale de dimension $M_{\mathbf{u}}$. La dimensionalité correspond en fait au nombre de termes dans la décomposition spectrale classique d'un vecteur aléatoire. Dans le cas discret, $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ étant isomorphe à $\mathbb{R}^n \otimes \mathbb{R}^P$, la dimensionalité vérifie clairement $M_{\mathbf{u}} \leqslant min(n, P)$. Bien sûr, en général, la dimensionalité de la solution vérifiera $M_{\mathbf{u}} = min(n, P)$. Cependant, pour certains problèmes, la solution peut avoir une faible dimensionalité. Par exemple, pour le cas d'un opérateur déterministe linéaire, la dimensionalité de la solution est exactement égale à la dimensionalité du second membre $\mathbf{b}$. Dans ce cas, on peut prouver que tous les algorithmes proposés (P-GSD, PU-GSD, A-GSD, SI-GSD) permettent de capturer la solution exacte avec un nombre de modes $M = M_{\mathbf{b}}$. Cette propriété est encore vraie pour certains cas particuliers (par exemple dans le cas où l'opérateur est le produit d'une variable aléatoire et d'un opérateur déterministe [119]). Dans le cas général, l'algorithme SI-GSD semble conserver cette propriété, à condition bien sûr de connaître la dimensionalité *a priori*. Par contre, les autres algorithmes (P-GSD, PU-GSD, A-GSD) ne vérifient pas cette propriété dans le cas général. Cependant, on observe en pratique qu'ils conduisent à une très bonne estimation de la solution avec $M_{\mathbf{u}}$ modes.

Remarque II.16

En réalité, l'opérateur $\mathbf{T} = \mathbf{F} \circ \mathbf{f}$ n'est défini que sur un sous-ensemble $\overline{\mathbb{S}}(n, M) \subset \mathbb{S}(n, M)$ correspondant aux matrices $\mathbf{W}$ telles que $\mathbf{f}(\mathbf{W}) \in \mathbb{S}^*(P, M)$, domaine de définition du mapping $\mathbf{F}$. En particulier, si $M > M_{\mathbf{u}}$, $\overline{\mathbb{S}}(n, M) = \emptyset$, c'est-à-dire qu'il n'existe pas de matrices $\mathbf{W}$ telle que les variables aléatoires associées soient linéairement indépendantes. Cette propriété, démontrée pour le cas d'opérateurs déterministes et vérifiée en pratique pour le cas général, peut s'interpréter par le fait qu'une partie du sous-espace $Im(\mathbf{W})$ de $\mathbb{R}^n$ est associé à des valeurs propres nulles et n'a donc aucune contribution dans la décomposition spectrale de la solution. En pratique, si les algorithmes comprennent des étapes d'orthogonalisation des variables aléatoires et des vecteurs déterministes, les dépendances linéaires peuvent être détectées et l'ordre M réduit en conséquence. Le fait que SI-GSD conduise à la décomposition exacte en $M_{\mathbf{u}}$ modes peut être expliqué par le fait que tous les points fixes $\mathbf{W}$ de $\mathbf{T}$ sur $\overline{\mathbb{S}}(n, M_{\mathbf{u}})$ sont associés au même sous-espace de $\mathbb{R}^n$ de dimension $M_{\mathbf{u}}$ et conduisent à la même décomposition exacte de la solution. L'algorithme converge alors nécessairement vers ce sous-espace. De plus, $\overline{\mathbb{S}}(n, M_{\mathbf{u}})$ semble être dense dans $\mathbb{S}(n, M_{\mathbf{u}})$ (démontrable dans des cas particuliers). Cela a pour conséquence qu'une initialisation aléatoire de $\mathbf{W}$ sera presque sûrement dans le domaine de définition de $\mathbf{T}$ et que l'algorithme SI-GSD convergera presque sûrement vers la décomposition exacte avec cette initialisation.

4 Application à un problème d'élasticité

On considère ici un exemple d'élasticité linéaire afin d'illustrer les propriétés de la méthode pour le cas d'une équation aux dérivées partielles stochastique symétrique linéaire elliptique coercive. D'un point de vue discret, cela correspond au cas particulier évoqué dans le paragraphe 2.5.1.

4.1 Formulation du problème et approximation

On reprend ici l'exemple du problème d'élasticité introduit dans [121]. Les détails concernant la mise en donnée du problème pourront être trouvés dans cet article.

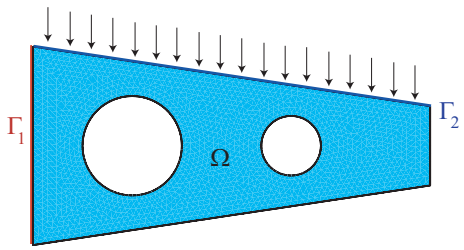


FIG. II.1 – Problème d'élasticité

On considère le problème d'élasticité linéaire en petites perturbations défini sur un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ (Figure II.1). On travaille dans l'hypothèse des déformations planes. On note $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \theta)$ le champ de déplacement, $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, \theta)$ l'effort surfacique aléatoire appliqué à une partie Γ_2 de la frontière. Des conditions de Dirichlet homogènes sont appliquées sur une autre partie Γ_1 de la frontière. On impose des efforts nuls sur la partie de la frontière complémentaire de $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$. On note $\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}, \theta)$ le tenseur d'élasticité de Hooke aléatoire. La formulation variationnelle de ce problème stochastique peut s'écrire : trouver $\boldsymbol{u} \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$ tel que

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = B(\boldsymbol{v}) \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{S}, \tag{II.31}$$

où

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = E\left(\int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})\, dx\right),$$
$$B(\boldsymbol{v}) = E\left(\int_{\Gamma_2} \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{v}\, ds\right).$$

$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})$ est la partie symétrique du gradient de $\boldsymbol{u}$ (tenseur des déformations) et $\boldsymbol{C}$ est le tenseur de Hooke. Sous des hypothèses de régularité classiques des données (voir [15, 154]), propriétés matériau et efforts appliqués, un choix classique des espaces fonctionnels est le suivant : $\mathcal{V} = \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) \in (H^1(\Omega))^2; \boldsymbol{v}_{|\Gamma_1} = 0\}$ et $\mathcal{S} = L^2(\Theta, dP)$. On introduit au niveau spatial un espace d'approximation éléments finis $\mathcal{V}_n = \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^n v_i \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x}),\ \boldsymbol{\varphi}_i \in \mathcal{V}\} \subset \mathcal{V}$. Une fonction $\boldsymbol{v} \in \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}$ sera alors associée à un vecteur aléatoire $\mathbf{v}(\theta) = (v_1(\theta), \ldots, v_n(\theta))^T \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}$. On utilise pour le calcul de référence le maillage représenté sur la figure II.2. La dimension de $\mathcal{V}_n$ est $n = 1624$.

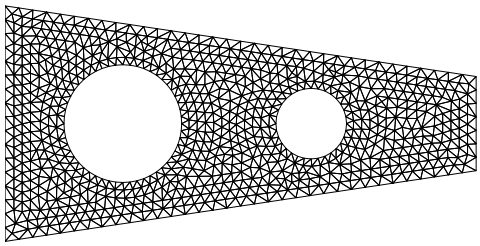


FIG. II.2 – Maillage éléments finis : triangles à 3 noeuds

Le matériau est considéré élastique isotrope avec un coefficient de Poisson déterministe. Pour le module d'Young κ, on opère une discrétisation d'un champ aléatoire lognormal (voir [121]) pour aboutir à une représentation du tenseur d'élasticité $\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}, \theta)$ sous la forme :

$$\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}, \theta) = \sum_{k=1}^{m_C} \boldsymbol{C}_k(\boldsymbol{x}) A_k(\theta)$$

où $m_C = 9$ et où les variables aléatoires $A_k(\theta)$ dépendent de 9 variables aléatoires gaussiennes standards indépendantes $\{\xi_i(\theta)\}_{i=1}^9$ et sont exprimées sur un chaos polynomial gaussien de degré 3 en dimension

9. L'effort appliqué $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x},\theta) = B_1(\theta)\boldsymbol{g}_1$, où $\boldsymbol{g}_1$ est un effort déterministe uniformément réparti et où $B_1(\theta)$ est une variable aléatoire gaussienne, exprimée en fonction d'une variable aléatoire gaussienne standard $\xi_{10}(\theta)$, indépendante des $\{\xi_i(\theta)\}_{i=1}^{9}$. On introduit alors comme espace d'approximation $\mathcal{S}_P$ un chaos polynomial gaussien de degré $p = 3$ en ces $m = 10$ variables aléatoires. La dimension de $\mathcal{S}_P$ est $P = 286$.

La recherche de l'approximation de Galerkin du problème (II.31) se ramène alors à la résolution du problème suivant : trouver $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ tel que

$$E(\mathbf{v}^T\mathbf{A}\mathbf{u}) = E(\mathbf{v}^T\mathbf{b}),$$

où la matrice $\mathbf{A}$ peut s'écrire

$$\mathbf{A}(\theta) = \sum_{k=1}^{m_C} A_k(\theta)\mathbf{A}_k, \qquad \text{avec } (\mathbf{A}_k)_{ij} = \int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_j(\boldsymbol{x})) : \boldsymbol{C}_k(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x}))\, dx$$

et le second membre $\mathbf{b}$ peut s'écrire

$$\mathbf{b}(\theta) = B_1(\theta)\mathbf{b}_1, \qquad \text{avec } (\mathbf{b}_1)_i = \int_{\Gamma_2} \boldsymbol{g}_1 \cdot \boldsymbol{\varphi}_i\, ds$$

4.2 Solution de référence et mesures d'erreurs

La solution de référence, notée $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ est calculée par un algorithme de gradient conjugué préconditionné (PCG) [61, 81] (voir section 4 du chapitre I). On note (GSD) la décomposition spectrale généralisée et (SD) la décomposition spectrale classique de la solution $\mathbf{u}$. On note $\mathbf{u}^{(M)}$ une décomposition spectrale d'ordre M. Afin d'évaluer la qualité d'une approximation, on utilise les deux mesures d'erreur suivantes :

$$\varepsilon_{L^2}^{(M)} = \frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^{(M)}\|_{L^2}}{\|\mathbf{u}\|_{L^2}}, \quad \varepsilon_{\mathbf{A}}^{(M)} = \frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^{(M)}\|_{\mathbf{A}}}{\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{A}}}$$

La première mesure est basée sur la norme naturelle sur $\mathbb{R}^n \otimes L^2(\Theta, dP)$ tandis que la seconde mesure est basée sur la norme induite par l'opérateur $\mathbf{A}$. On notera que dans cet exemple, la norme $\|\cdot\|_{\mathbf{A}}$ est équivalente à la norme en énergie :

$$\|\mathbf{v}\|_{\mathbf{A}}^2 = E(\mathbf{v}^T\mathbf{A}\mathbf{v}) = \int_\Theta \int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})\, dx\, dP(\theta)$$

Les aspects techniques de la résolution par les algorithmes GSD sont détaillés dans l'annexe B.

4.3 Comparaison entre décompositions spectrales classiques et généralisée

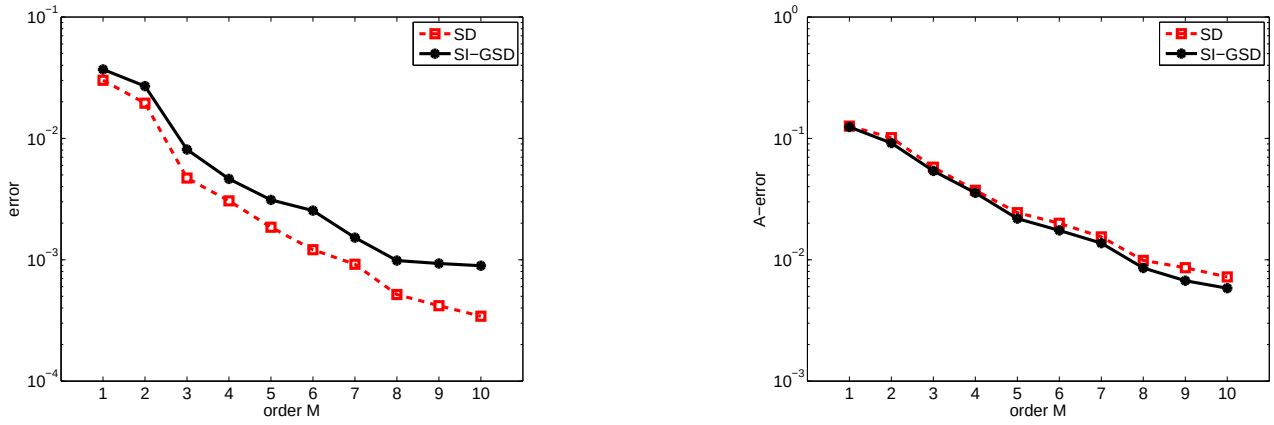
On compare ici la décomposition (GSD), obtenue par l'algorithme 1 (SI-GSD), et la décomposition (SD) de la solution de référence. La figure II.3 montre la convergence des décompositions spectrales par rapport à l'ordre de décomposition. On observe clairement que la (SD) conduit à une meilleure décomposition au sens de L^2 tandis que la (GSD) conduit à une meilleure décomposition au sens de l'opérateur. Ceci était prévisible étant donnée la définition de ces deux décompositions :

$$(\text{SD}) - L^2 : \quad (\boldsymbol{\Lambda}, \mathbf{W}) = \underset{\boldsymbol{\Lambda},\mathbf{W}}{argmin} \|\mathbf{u} - \boldsymbol{\Lambda}\mathbf{W}\|_{L^2}^2 \tag{II.32}$$

$$(\text{GSD}) : \quad (\boldsymbol{\Lambda}, \mathbf{W}) = \underset{\boldsymbol{\Lambda},\mathbf{W}}{argmin} \|\mathbf{u} - \boldsymbol{\Lambda}\mathbf{W}\|_{\mathbf{A}}^2 \tag{II.33}$$

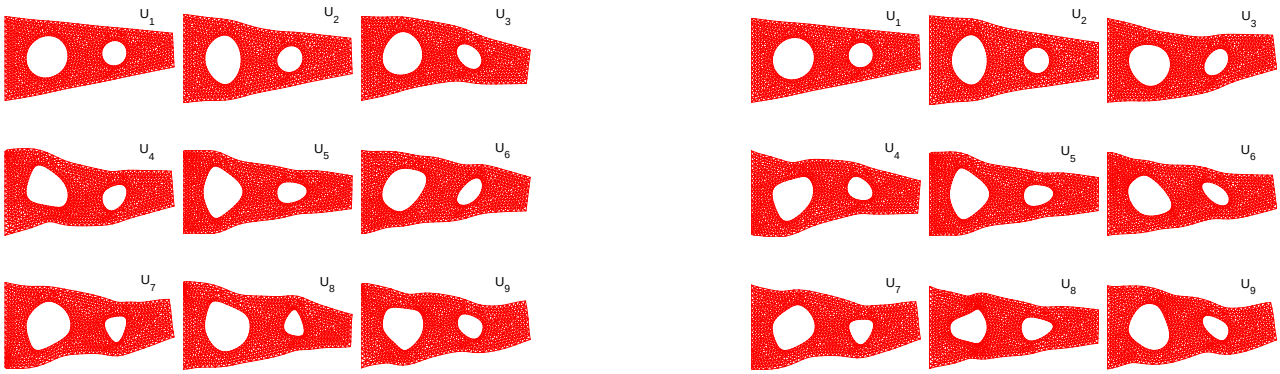
On remarque cependant que les deux décompositions conduisent à des précisions relativement semblables pour un ordre M de décomposition.

La figure II.4 montre les 9 premiers modes déterministes de la GSD et de la (SD)-L^2. On remarque que les modes obtenus sont très semblables. Les vecteurs affichés pour (SD)-L^2 sont les M vecteurs propres dominants de la matrice de corrélation $E(\mathbf{u}\mathbf{u}^T)$, triés par ordre décroissant des valeurs propres associées. Ceci correspond à un tri des vecteurs par rapport à leur contribution en norme L^2 dans la



(a) L^2-norm (b) $\mathbf{A}$-norm

FIG. II.3 – Comparaison GSD et SD classique dans la métrique naturelle de $L^2(\Theta, dP; \mathbb{R}^n)$: convergence en norme L^2 (a) et en norme $\mathbf{A}$ (b)



(a) (b)

FIG. II.4 – Premiers modes $\{\mathbf{U}_i\}_{i=1}^9$ de la GSD (a) et de la (SD)-L^2 (b)

décomposition spectrale. Pour GSD, une explication est nécessaire pour comprendre comment ont été obtenus les vecteurs affichés. En réalité, la décomposition obtenue $\mathbf{u}^{(M)} = \mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W})$ n'est pas unique. Ce qui compte est l'espace engendré par les vecteurs déterministes (colonnes de $\mathbf{W}$). L'algorithme SI-GSD converge toujours vers le même sous-espace de dimension M, conduisant à une même décomposition $\mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W})$, mais les vecteurs obtenus dépendent de l'initialisation choisie et de l'itération d'arrêt de l'algorithme. Afin de pouvoir comparer les modes des deux décompositions, on a opéré une décomposition spectrale au sens de L^2 de la décomposition GSD $\mathbf{W}\mathbf{f}(\mathbf{W})$. Cela permet de sélectionner dans l'espace propre engendré par $\mathbf{W}$ une base de vecteurs triés par ordre décroissant de leur contribution en norme L^2 dans la décomposition GSD.

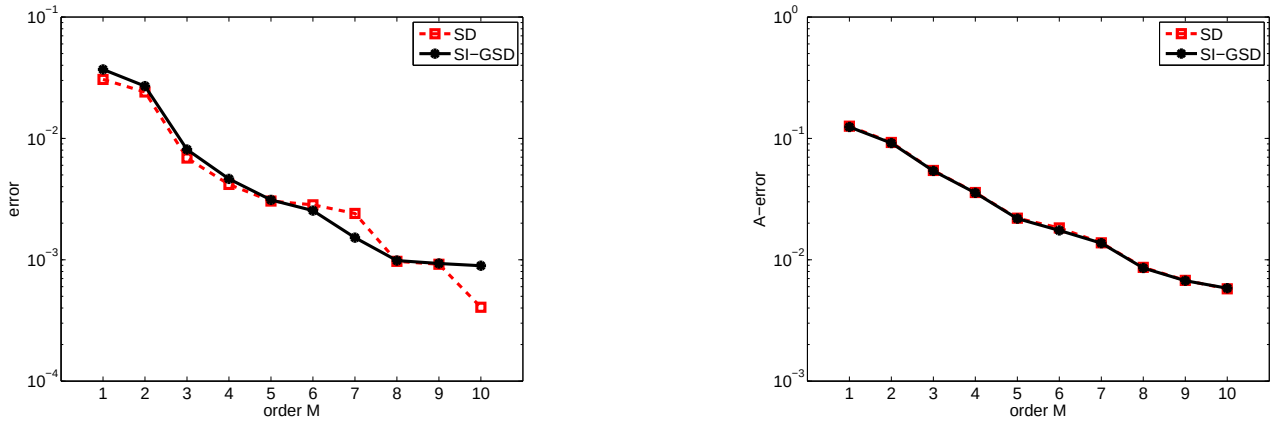
On peut également s'intéresser à une comparaison avec une (SD) au sens d'une autre métrique :

$$(\mathrm{SD}) - E(\mathbf{A}) : \quad (\mathbf{\Lambda}, \mathbf{W}) = \underset{\mathbf{\Lambda},\mathbf{W}}{argmin} \|\mathbf{u} - \mathbf{\Lambda}\mathbf{W}\|^2_{E(\mathbf{A})}, \quad \|\mathbf{v}\|_{E(\mathbf{A})} = E(\mathbf{v}^T E(\mathbf{A})\mathbf{v}) \tag{II.34}$$

Ceci correspond à une décomposition de Hilbert-Karhunen-Loève de la solution au sens de la métrique induite par $E(\mathbf{A})$. On observe sur la figure que cette décomposition a des propriétés de convergence très proche de la GSD.

4.4 Convergence de l'algorithme Subspace Iteration

Afin d'évaluer la convergence de l'algorithme 1 (SI-GSD), il nous faut comparer les sous-espaces linéaires engendrés par les itérés $\mathbf{W}^{(k)}$, *i.e.* les espaces $Im(\mathbf{W}^{(k)})$. Cette comparaison est rendue



(a) L^2-norm (b) $\mathbf{A}$-norm

FIG. II.5 – Comparaison entre GSD et SD dans la métrique induite par $E(\mathbf{A})$: convergence en norme L^2 (a) et en norme $\mathbf{A}$ (b)

possible par le calcul du plus grand angle principal entre des sous-espaces. Deux matrices $\mathbf{W}$ et $\widetilde{\mathbf{W}}$ étant données, le plus grand angle principal entre $Im(\mathbf{W})$ et $Im(\widetilde{\mathbf{W}})$ est défini par

$$\angle(\mathbf{W}, \widetilde{\mathbf{W}}) = \underset{\mathbf{U} \in Im(\mathbf{W})}{max} \; \underset{\widetilde{\mathbf{U}} \in Im(\widetilde{\mathbf{W}})}{min} \angle(\mathbf{U}, \widetilde{\mathbf{U}})$$

où $\angle(\mathbf{U}, \widetilde{\mathbf{U}})$ est l'angle classique entre deux vecteurs [68]. La figure II.6 montre le sinus de l'angle $\angle(\mathbf{W}^{(k)}, \mathbf{W}^{(k+1)})$ entre deux sous-espaces successifs de l'algorithme SI-GSD, pour différents ordres de décomposition. On observe une rapide convergence (4 à 5 itérations), quel que soit l'ordre de décomposition.

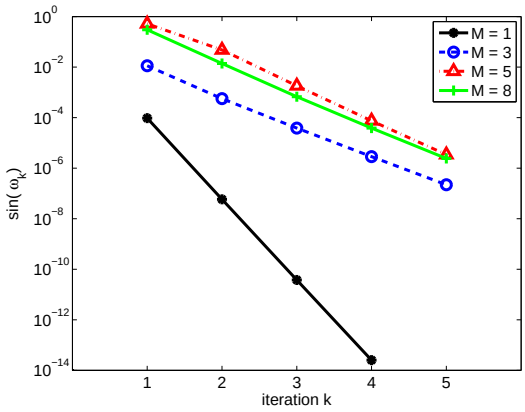


FIG. II.6 – Convergence de (SI-GSD) pour différents ordre M de décomposition : sinus du plus grand angle principal entre deux itérés $\omega_k = \angle(\mathbf{W}^{(k)}, \mathbf{W}^{(k+1)})$

Une autre mesure pertinente de la convergence consiste à observer la convergence de la décomposition $\mathbf{W}^{(k)}\mathbf{f}(\mathbf{W}^{(k)})$ obtenue à chaque itération, cette décomposition étant la même sur la classe d'équivalence des matrices engendrant le même sous-espace linéaire de $\mathbb{R}^n$. La figure II.7 montre l'estimation de la distance (en norme $\mathbf{A}$) entre la décomposition $\mathbf{W}^{(k)}\mathbf{f}(\mathbf{W}^{(k)})$ et une décomposition $\mathbf{u}^{(M)}$ de référence, obtenue avec un grand nombre d'itérations de SI-GSD.

4.5 Etude de l'algorithme d'Arnoldi (A-GSD)

La figure II.8 montre la convergence (en norme $\mathbf{A}$) des décompositions GSD obtenues par l'algorithme 1 (SI-GSD) et par l'algorithme 2 (A-GSD). On vérifie bien que la décomposition SI-GSD est meilleure que la décomposition A-GSD. A-GSD ne fournit en effet qu'une approximation de la

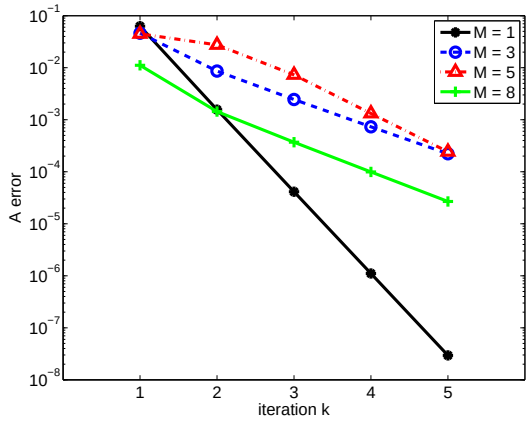


FIG. II.7 – Convergence de (SI-GSD) pour différents ordre M de décomposition : erreur $\|\mathbf{W}^{(k)}\mathbf{f}(\mathbf{W}^{(k)}) - \mathbf{u}^{(M)}\|_{\mathbf{A}}$ en fonction de k

GSD optimale, obtenue par SI-GSD. SI-GSD construit le sous-espace propre dominant de l'opérateur $\mathbf{T}$ tandis que A-GSD construit un espace de Krylov (généralisé) qui n'est qu'une approximation du sous-espace propre dominant ("approximation de Ritz").

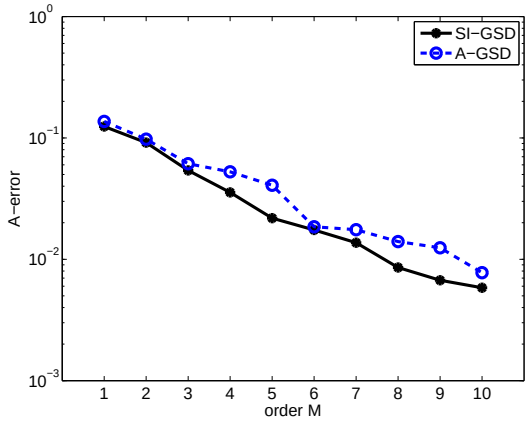
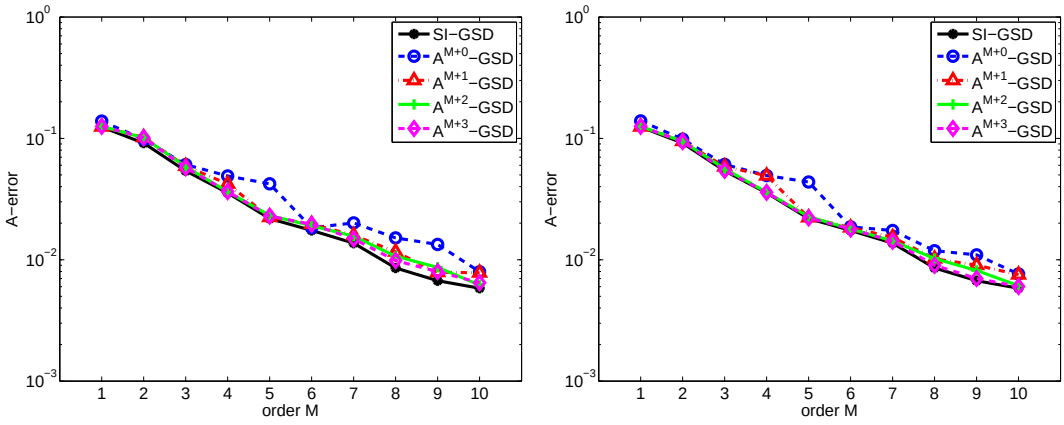


FIG. II.8 – SI-GSD versus A-GSD : convergence de la décomposition en norme $\mathbf{A}$

Dans les problèmes aux valeurs propres classiques, on montre que les vecteurs de Ritz dominants convergent vers les vecteurs propres dominants. On peut interpréter cette propriété de la manière suivante : pour M fixé, l'angle entre le sous-espace propre dominant de dimension M et un sous-espace de Krylov de dimension $M' > M$ tend vers zéro quand M' augmente. Cela veut dire que le sous-espace de Krylov tend à contenir les vecteurs propres dominants. Afin de vérifier cette propriété pour notre pseudo-problème aux valeurs propres, on utilise l'algorithme d'Arnoldi pour la construction d'un sous-espace de Krylov de dimension $M + k$ puis on sélectionne les M principaux modes de la décomposition $\mathbf{u}^{(M+k)}$ obtenue grâce à une décomposition spectrale tronquée à l'ordre M. On note A^{M+k}-GSD cette procédure. La figure II.9 illustre la convergence de A^{M+k}-GSD en fonction de M pour différentes valeurs de k. On observe bien que la décomposition d'ordre M se rapproche de la décomposition obtenue par SI-GSD lorsque k augmente.

Remarque II.17

La sélection des M modes utilise une métrique L^2 ou une métrique induite par $E(\mathbf{A})$. Pour obtenir une convergence vers la décomposition GSD optimale d'ordre M, la sélection devrait être effectuée dans la métrique induite par l'opérateur $\mathbf{A}$. Cette sélection ne correspond plus à une décomposition spectrale mais à une décomposition spectrale généralisée. Pour effectuer cette sélection, on pourrait appliquer une méthode SI-GSD pour construire l'espace propre dominant de dimension M de la restriction de l'opérateur $\mathbf{T}$ au sous-espace de Krylov de dimension $M + k$. On devrait alors



(a) Métrique L^2 (b) Métrique $E(\mathbf{A})$

FIG. II.9 – SI-GSD versus A^{M+k}-GSD : sélection des M modes les plus significatifs par rapport à la métrique naturelle de $L^2(\Theta, dP; \mathbb{R}^n)$ (a) ou par rapport à la métrique induite par $E(\mathbf{A})$ (b)

> *observer une vraie convergence avec k de la décomposition d'ordre M obtenue par A^{M+k}-GSD vers la décomposition optimale.*

4.6 Comparaisons entre les algorithmes GSD et l'algorithme de référence PCG

La figure II.10 compare les temps de calcul obtenus par différents algorithmes GSD et l'algorithme de référence PCG. P-GSD (resp. P'-GSD) désigne l'algorithme 4 avec update complet (resp. partiel) des variables aléatoires. A-GSD désigne l'algorithme d'Arnoldi. On observe une nette supériorité de l'algorithme d'Arnoldi. Ceci est dû au fait que pour un ordre M de décomposition, il ne nécessite que la résolution de M problèmes déterministes de taille n, M problèmes stochastiques de taille P et un problème stochastique de taille $M \times P$ (étape d'actualisation des variables aléatoires).

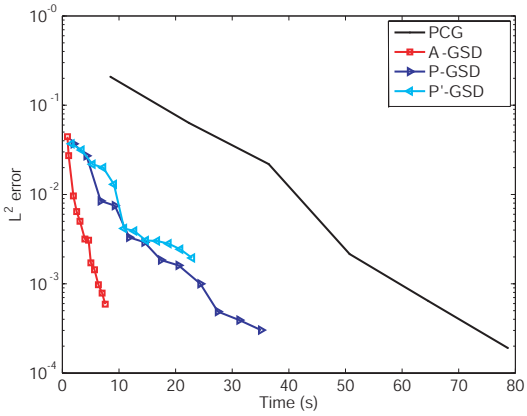
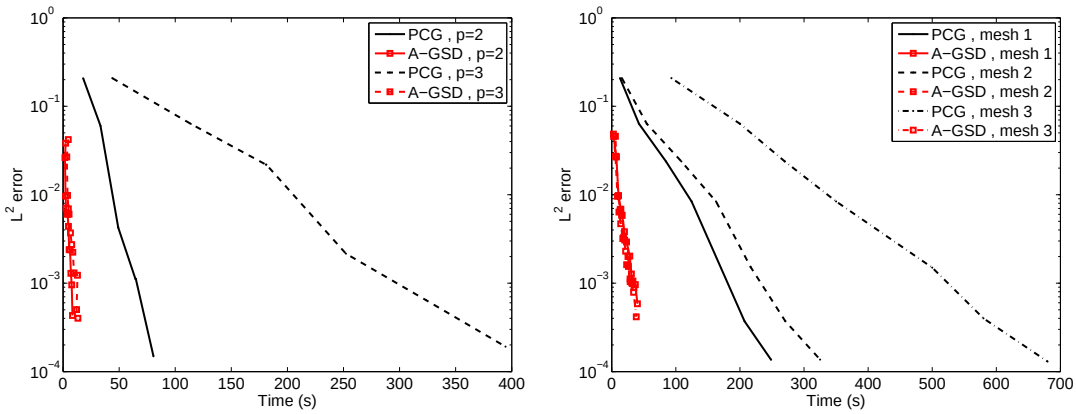


FIG. II.10 – Comparaison entre méthodes de résolution : erreur L^2 en fonction du temps de calcul (discrétisation de référence)

On veut à présent tester l'influence de la taille des problèmes (dimension des espaces d'approximation) sur les temps de résolution. Au niveau spatial, on considère 4 maillages éléments finis différents, numérotés de 1 à 4, et correspondant respectivement à $n = 1150$, 1624, 3590 et 6166. Au niveau stochastique, on considère différents degrés de chaos ($p = 2$, 3 et 4), correspondant à différentes dimensions de l'espace d'approximation $\mathcal{S}_P$ ($P = 66$, 286 et 1001). Sur la figure II.11(a), on montre les convergence de A-GSD et PCG pour le maillage 4 donné et pour différents degrés de chaos. On observe que A-GSD est relativement insensible à la dimension P tandis que le taux de convergence de PCG est fortement dégradé lorsque P augmente. Sur la figure II.11(b), on montre les convergence de A-GSD et PCG pour $p = 4$ fixé et pour différents maillages. On observe que A-GSD est relativement insensible à

la dimension n tandis que le taux de convergence de PCG est fortement dégradé lorsque n augmente. Ces bonnes propriétés de A-GSD sont expliquées par le découplage des problèmes déterministes et stochastiques.



(a) Influence de P à n fixé (maillage 4)

(b) Influence de n à P fixé ($p = 4$)

FIG. II.11 – Influence de la dimension déterministe (différents maillages) et de la dimension stochastique P (différents ordre de chaos) : erreur L^2 en fonction du temps de calcul

5 Applications à un problème de thermique instationnaire

On applique la méthode à un problème de thermique instationnaire linéaire. Cette application permet d'illustrer les propriétés de la méthode et sa mise en oeuvre pour le cas d'une équation aux dérivées partielles stochastique parabolique linéaire.

5.1 Formulation du problème et approximation

Le domaine spatial d'étude Ω est représenté sur la figure II.12. Le problème s'écrit : trouver un champ de température $u : \Omega \times (0,T) \times \Theta \to \mathbb{R}$ tel que

$$\begin{aligned} c\partial_t u - \nabla \cdot (\kappa \nabla u) &= f \quad \text{sur} \quad \Omega \times (0,T) \\ -\kappa \nabla u \cdot n &= g_i \quad \text{sur} \quad \Gamma_i \times (0,T),\ i = 1,2 \\ u &= 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma_0 \times (0,T) \\ u_{|t=0} &= u_0 \quad \text{sur} \quad \Omega \end{aligned} \tag{II.35}$$

où $(0,T)$ le domaine temporel, avec $T = 1$, c et κ des paramètres matériaux, f une source volumique de chaleur et g_1 (resp. g_2) un flux normal de chaleur sur une partie Γ_1 (resp. Γ_2) de la frontière. Des conditions de Dirichlet homogènes sont appliquées sur une partie Γ_0 de la frontière, qui est la partie complémentaire de $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$. Pour les exemples numériques, on choisit $u_0 = 0$. Cependant, nous gardons cette condition initiale non nulle pour une présentation plus générale de la méthode.

On introduit au niveau spatial une approximation éléments finis. Le problème se ramène alors au système d'équations différentielles stochastiques : trouver $\mathbf{u} : (0,T) \times \Theta \to \mathbb{R}^{n_x}$ tel que

$$\mathbf{u}(0,\theta) = \mathbf{u}_0(\theta) \tag{II.36}$$

$$\mathbf{C}(\theta)\dot{\mathbf{u}}(t,\theta) + \mathbf{K}(\theta)\mathbf{u}(t,\theta) = \mathbf{f}(t,\theta) \tag{II.37}$$

où $\mathbf{C}$ et $\mathbf{K}$ sont des matrices aléatoires et où $\mathbf{f}(t,\cdot)$ est un vecteur aléatoire. Au niveau temporel, on introduit un schéma d'Euler implicite. On note $(0 = t_0, t_1, \ldots, t_{n_t} = T)$ la grille temporelle et $\delta t_i = (t_i - t_{i-1})$ les pas de temps. On note $\mathbf{u}(\theta) = (\mathbf{u}(t_1,\theta)^T, \ldots \mathbf{u}(t_n,\theta)^T)^T \in \mathbb{R}^{n_x n_t}$. En posant $n = n_x n_t$, le problème stochastique discrétisé au niveau spatial et temporel peut alors se ramener au problème générique suivant : trouver $\mathbf{u} : \Theta \to \mathbb{R}^n$ tel que

$$a(\mathbf{u},\mathbf{v};\theta) = b(\mathbf{v};\theta) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \tag{II.38}$$

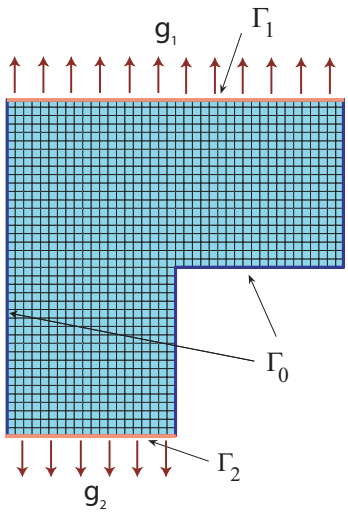


FIG. II.12 – Problème de thermique instationnaire : domaine $\Omega = ((0,1)\times(0,2)) \cup ((1,2)\times(1,2))$ et maillage éléments finis associé

où $a(\cdot,\cdot;\theta)$ et $b(\cdot;\theta)$ sont respectivement des formes bilinéaire et linéaire sur $\mathbb{R}^{n_x n_t}$ définies par

$$a(\mathbf{u},\mathbf{v};\theta) = \mathbf{v}(t_1)^T\mathbf{C}(\theta)\mathbf{u}(t_1) + \sum_{i=2}^{n_t}\mathbf{v}(t_i)^T\mathbf{C}(\theta)(\mathbf{u}(t_i)-\mathbf{u}(t_{i-1})) + \sum_{i=1}^{n_t}\delta t_i\mathbf{v}(t_i)^T\mathbf{K}(\theta)\mathbf{u}(t_i) \tag{II.39}$$

$$b(\mathbf{v};\theta) = \mathbf{v}(t_1)^T\mathbf{C}(\theta)\mathbf{u}_0(\theta) + \sum_{i=1}^{n_t}\delta t_i\mathbf{v}(t_i)^T\mathbf{f}(t_i,\theta) \tag{II.40}$$

Remarque II.18

> *On notera que le schéma d'Euler implicite est équivalent à une approche de Galerkin discontinue temporelle de degré* 0. *La formulation* (II.38) *est la forme variationnelle définissant l'approximation de Galerkin discontinue au niveau temporel.*

5.2 Modélisation probabiliste et approximation

Les paramètres matériau sont considérés comme de simples variables aléatoires, indépendantes du temps et de l'espace. On prend $c(\theta) = \xi_1(\theta) + \xi_2(\theta)$ et $\kappa = \xi_3(\theta) + \xi_4(\theta)$, où $\xi_1,\ldots,\xi_4 \in U(0.7,1.3)$ sont 4 variables aléatoires uniformes indépendantes et identiquement distribuées[2]. On prend pour la source volumique une variable aléatoire indépendante du temps et de l'espace : $f = \xi_5(\theta) \in N(1,0.2)$[3]. On choisit pour les flux aux frontières : $g_1(t,\theta) = \xi_6(\theta)\frac{t}{T}$ et $g_2(t,\theta) = \xi_7(\theta)\frac{t}{T}$, où $\xi_6,\xi_7 \in N(1,0.2)$ sont deux variables gaussiennes. Le contenu probabiliste est donc représenté par $m = 7$ variables aléatoires $\{\xi_i\}_{i=1}^7$, qui sont considérées mutuellement indépendantes. Pour l'approximation au niveau stochastique, on introduit un chaos polynomial généralisé de degré p [171] en ces 7 variables aléatoires. Les fonctions de base de $\mathcal{S}_P$ sont donc des polynômes multi-dimensionnels, qui sont le produit de polynômes de Legendre en ξ_1, ξ_2, ξ_3 et ξ_4 et de polynômes d'Hermite en ξ_5, ξ_6 et ξ_7. Pour le problème de référence, on choisit $p = 4$, ce qui correspond à une dimension de $\mathcal{S}_P$ égale à $P = \frac{(p+m)!}{m!p!} = 330$.

Le problème stochastique se ramène alors à la forme générique (II.3), avec

$$A(\mathbf{u},\mathbf{v}) = E\left(a(\mathbf{u}(\theta),\mathbf{v}(\theta);\theta)\right), \quad B(\mathbf{v}) = E\left(b(\mathbf{v}(\theta);\theta)\right)$$

5.3 Solution de référence et indicateur d'erreur

La solution du problème de référence (II.3) est notée $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$. Elle est calculée de manière classique en résolvant à chaque pas de temps un problème stochastique linéaire classique. A chaque

[2] $\xi \in U(a,b)$ désigne une variable aléatoire uniforme sur (a,b)

[3] $\xi \in N(\mu,\sigma)$ désigne une variable gaussienne de moyenne μ et d'écart-type σ

pas de temps t_i, on cherche $\mathbf{u}(t_i,\theta) \in \mathbb{R}^{n_x} \otimes \mathcal{S}_P$ qui vérifie

$$E\left(\mathbf{v}^T\left(\mathbf{C}(\theta)+\mathbf{K}(\theta)\delta t_i\right)\mathbf{u}(t_i,\theta)\right) = E\left(\mathbf{v}^T\left(\mathbf{C}(\theta)\mathbf{u}(t_{i-1},\theta)+\mathbf{f}(t_i,\theta)\delta t_i\right)\right) \tag{II.41}$$

Le problème (II.41), qui est un système de $n_x \times P$ équations (classique des méthodes spectrales de type Galerkin), est résolu en utilisant un gradient conjugué préconditionné (PCG) avec une tolérance de 10^{-5}. Le préconditionneur est choisi classiquement en se basant sur l'espérance $E(\mathbf{C}+\mathbf{K}\delta t_i)$ de l'opérateur (voir section 4 du chapitre I). Dans la suite, on notera (PCG) cette méthode de résolution incrémentale classique.

On note $\mathbf{u}^{(M)}$ une décomposition spectrale d'ordre M. Afin de comparer les solutions approchées, on introduit la mesure d'erreur suivante :

$$\varepsilon^{(M)} = \frac{\|\mathbf{u}-\mathbf{u}^{(M)}\|}{\|\mathbf{u}\|} \tag{II.42}$$

où $\|\cdot\|$ est une norme L^2 sur l'espace d'approximation :

$$\|\mathbf{u}\|^2 = \sum_{i=1}^{n_t} \delta t_i E(\mathbf{u}(t_i,\theta)^T\mathbf{u}(t_i,\theta)) \tag{II.43}$$

Remarque II.19

La norme L^2 définie dans (II.43) coincide avec la norme naturelle de $L^2(\Theta, dP; L^2((0,T);\mathbb{R}^n))$ si on considère que l'approximation temporelle est constante sur chaque intervalle temporel et est semi-continue inférieurement :

$$\|\mathbf{u}\|^2 \equiv \int_\Theta \int_0^T \mathbf{u}(t,\theta)^T\mathbf{u}(t,\theta)\,dt\,dP(\theta)$$

5.4 Aspects calcul pour la construction de la GSD

Dans cet exemple, on ne considère que l'algorithme d'Arnoldi (A-GSD) pour la construction de la GSD. La génération d'un sous-espace de Krylov $\mathcal{K}_M(\mathbf{T},\mathbf{U})$ de dimension M nécessite la résolution de $M+1$ problèmes déterministes $\mathbf{U}=\mathbf{F}(\lambda)$ (en comptant l'initialisation) et M problèmes stochastiques $\lambda = \mathbf{F}(\mathbf{U})$. Enfin, il nécessite une étape d'actualisation $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{f}(\mathbf{W})$. Détaillons ces trois problèmes.

Problème déterministe : $\mathbf{U} = \mathbf{F}(\lambda)$

Connaissant $\lambda \in \mathcal{S}_P$, ce problème déterministe peut s'écrire : trouver $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$A(\lambda\mathbf{U},\lambda\mathbf{V}) = B(\lambda\mathbf{V}), \quad \forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^n$$

On peut montrer que ce problème est équivalent au système d'équations suivants :

$$E(\mathbf{C}\lambda^2)\mathbf{U}(t_1) + \delta t_1 E(\mathbf{K}\lambda^2)\mathbf{U}(t_1) = E(\mathbf{C}\lambda\mathbf{u}_0(\theta)) + \delta t_1 E(\lambda\mathbf{f}(t_1,\cdot)) \tag{II.44}$$

$$E(\mathbf{C}\lambda^2)(\mathbf{U}(t_i)-\mathbf{U}(t_{i-1})) + \delta t_i E(\mathbf{K}\lambda^2)\mathbf{U}(t_i) = \delta t_i E(\lambda\mathbf{f}(t_i,\cdot)), \quad i = 2\ldots n_t \tag{II.45}$$

Ce problème est en fait équivalent à la résolution du problème d'évolution déterministe suivant par un schéma d'Euler implicite :

$$E(\mathbf{C}\lambda^2)\mathbf{U}(0) = E(\mathbf{C}\lambda\mathbf{u}_0) \tag{II.46}$$

$$E(\mathbf{C}\lambda^2)\dot{\mathbf{U}}(t) + E(\mathbf{K}\lambda^2)\mathbf{U}(t) = E(\lambda\mathbf{f}(t,\cdot)) \tag{II.47}$$

On notera que dans le cas d'une condition initiale non nulle, cela revient à prendre en compte cette condition initiale de manière faible. Etant donné le problème étudié, on peut ici écrire $\mathbf{C}(\theta) = c(\theta)\mathbf{C}_0$, $\mathbf{K}(\theta) = \kappa(\theta)\mathbf{K}_0$, avec $\mathbf{C}_0$ et $\mathbf{K}_0$ des matrices déterministes et $\mathbf{f}(t;\theta) = \xi_5(\theta)\mathbf{f}_1 + \xi_6(\theta)\mathbf{f}_2(t) + \xi_7(\theta)\mathbf{f}_3(t)$, avec $\mathbf{f}_1(t)$, $\mathbf{f}_2(t)$ et $\mathbf{f}_3(t)$ des vecteurs déterministes. La résolution du problème déterministe peut donc faire appel à un code standard en utilisant $E(c\lambda^2)$ et $E(\kappa\lambda^2)$ comme valeurs des paramètres matériaux et $E(\xi_i\lambda)$, $i = 5...7$, comme facteurs devant les fonctions temporelles $\mathbf{f}_i$.

Problème stochastique : $\lambda = \mathbf{f}(\mathbf{U})$

Connaissant $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^n$, ce problème peut s'écrire : trouver $\lambda \in \mathcal{S}_P$ tel que

$$E(\lambda^* \overline{A} \lambda) = E(\lambda^* \overline{B}) \quad \forall \lambda^* \in \mathcal{S}_P$$

où $\overline{A}(\theta)$ et $\overline{B}(\theta)$ sont des variables aléatoires définies par

$$\overline{A}(\theta) = a(\mathbf{U}, \mathbf{U}; \theta) = c(\theta) a_1(\mathbf{U}, \mathbf{U}) + \kappa(\theta) a_2(\mathbf{U}, \mathbf{U}) \tag{II.48}$$

$$\overline{B}(\theta) = b(\mathbf{U}; \theta) = \xi_5 b_1(\mathbf{U}) + \xi_6 b_2(\mathbf{U}) + \xi_7 b_3(\mathbf{U}) \tag{II.49}$$

où les a_i et b_i sont des formes bilinéaires et linéaires déterministes sur $\mathbb{R}^n$. On notera que d'un point de vue continu, le quantités $a_i(\mathbf{U}, \mathbf{U})$ et $b_i(\mathbf{U})$ s'interprète comme des intégrales spatiales et temporelles. Ces quantités sont des quantités classiquement calculées par les codes de calcul usuels.

Problème d'actualisation des variables aléatoires : $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{F}(\mathbf{W})$

Connaissant $\mathbf{W} = (\mathbf{U}_1 \dots \mathbf{U}_M)$, ce problème peut s'écrire : trouver $\{\lambda_i\}_{i=1}^M \in (\mathcal{S}_P)^M$ tel que

$$E(\lambda_i^* \sum_{j=1}^{M} \overline{A}_{ij} \lambda_j) = E(\lambda_i^* \overline{B}_i), \quad \forall \lambda_i^* \in \mathcal{S}_P, \ \forall i = 1 \dots M$$

où les $\overline{A}_{ij}(\theta)$ et $\overline{B}_i(\theta)$ sont des variables aléatoires définies par

$$\overline{A}_{ij}(\theta) = a(\mathbf{U}_j, \mathbf{U}_i; \theta) = c(\theta) a_1(\mathbf{U}_j, \mathbf{U}_i) + \kappa(\theta) a_2(\mathbf{U}_j, \mathbf{U}_i) \tag{II.50}$$

$$\overline{B}_i(\theta) = b(\mathbf{U}_i; \theta) = \xi_5 b_1(\mathbf{U}_i) + \xi_6 b_2(\mathbf{U}_i) + \xi_7 b_3(\mathbf{U}_i) \tag{II.51}$$

C'est un problème de taille $M \times P$ dont la résolution est très classique dans le cadre des méthodes stochastiques de type Galerkin.

5.5 Comparaison entre décomposition spectrale généralisée (GSD) et classique (SD)

On compare tout d'abord la décomposition spectrale généralisée (GSD) avec la décomposition spectrale classique de la solution de référence (SD), optimale vis-à-vis de la norme L^2 définie dans (II.43). On choisit ici une grille temporelle uniforme, si bien que cette décomposition peut être obtenue par une décomposition de Karhunen-Loève classique du vecteur aléatoire $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$. La GSD est obtenue par l'algorithme 2 (A-GSD). La figure II.13 montre que les convergences des deux décompositions sont sensiblement les mêmes vis-à-vis de la norme L^2.

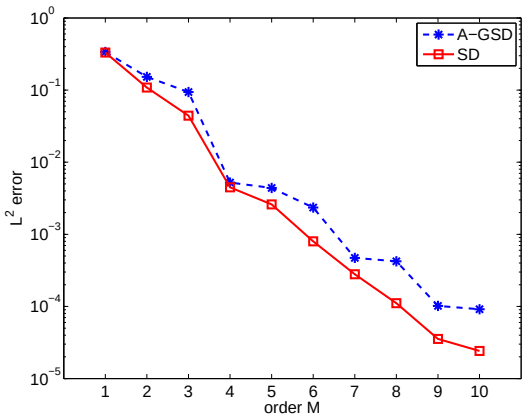


FIG. II.13 – Convergence de GSD, obtenue par (A-GSD), versus convergence de SD classique (dans la métrique L^2)

Afin de tester la capacité de A-GSD à capturer les vecteurs propres dominants, on utilise la procédure A^{M+k}-GSD décrite dans le paragraphe 4.5 qui consiste à construire par la méthode A-GSD un sous-espace de Krylov de dimension $M+k$ et de sélectionner ensuite les M modes principaux de la

décomposition $\mathbf{u}^{(M+k)}$ en opérant une décomposition spectrale tronquée à l'ordre M. On utilise ici une sélection optimale au sens de la norme (II.43). La figure II.14 montre la convergence de la décomposition GSD d'ordre M, obtenue par A^{M+k}-GSD pour différents k, et la compare à la convergence de la SD classique. On remarque qu'en augmentant la taille du sous-espace de Krylov généré, la décomposition GSD d'ordre M se rapproche d'une décomposition optimale au sens de L^2.

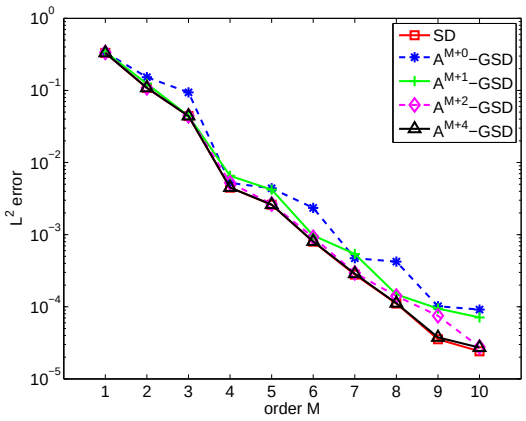


FIG. II.14 – (SD) versus (A^{M+k}-GSD) : sélection des M modes prépondérants par rapport à la métrique L^2

5.6 Qualité de la décomposition spectrale généralisée

Sur la figure II.15 (resp. II.16), on peut voir les quantiles (5% et 95%) de l'approximation GSD en un point donné de l'espace (resp. en un temps donné et sur une ligne verticale donnée). On observe que l'approximation de ces quantiles converge très vite avec l'ordre de la décomposition. Pour $M = 4$, correspondant à une erreur L^2 de 10^{-2}, l'approximation de ces quantiles est déjà très bonne.

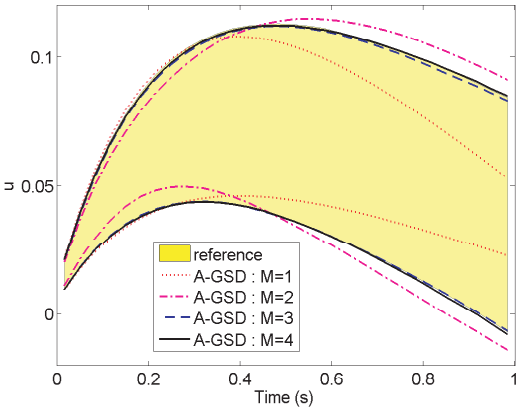


FIG. II.15 – Quantiles 0.05 et 0.95 des solutions approchées au point $(0.5, 1.5)$

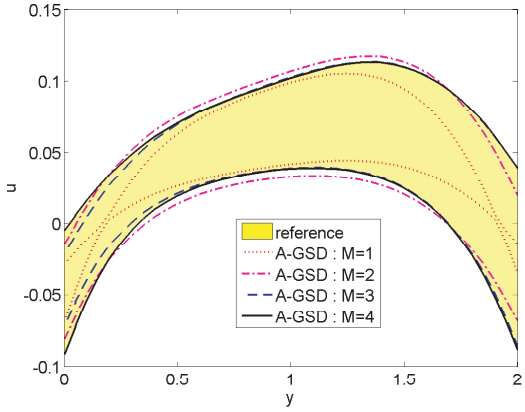


FIG. II.16 – Quantiles 0.05 et 0.95 des solutions approchées sur la ligne verticale $x = 0.5$ et au temps $t = 0.65s$

5.7 Coûts de calcul

On illustre à présent l'efficacité de l'algorithme GSD en le comparant à la méthode de résolution classique PCG. La figure II.17 montre l'évolution de l'erreur en fonction du temps de calcul. On peut observer que le taux de convergence de A-GSD est nettement supérieur à celui de PCG.

Pour aller plus loin dans la comparaison, on analyse à présent l'influence des dimensions P et n des espaces d'approximation stochastique et déterministe. La figure II.18 montre les courbes de convergence pour différentes degrés de chaos $p = 3$, 4 and 5, correspondant respectivement à $P = 120$,

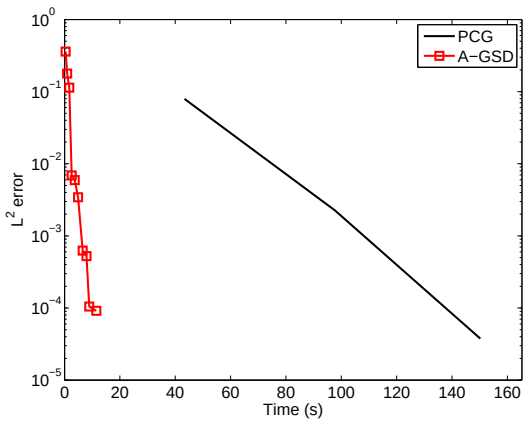


FIG. II.17 – Erreur versus temps de calcul pour PCG et A-GSD (discrétisation de référence)

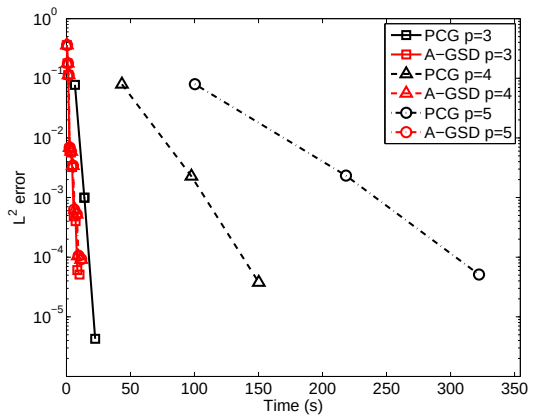


FIG. II.18 – Influence sur PCG et A-GSD de la dimension de l'espace d'approximation stochastique (pour p=3, 4 or 5)

330 et 792. On observe qu'une augmentation de P détériore le taux de convergence de PCG tandis qu'elle n'a qu'une faible influence sur le taux de convergence de A-GSD (et donc sur son coût de calcul).

Dans la figure II.19, on montre, pour l'algorithme PCG, le temps de calcul nécessaire pour atteindre une erreur relative de 10^{-2} en fonction de la dimension $n \times P$ de l'espace d'approximation. Les différents points sont obtenus en faisant varier le degré du chaos, la finesse du maillage éléments finis et le nombre de pas de temps. On observe que le temps de calcul de PCG croît de manière quasi-linéaire en fonction de $n \times P$ (pente unitaire dans le tracé log-log). La figure (II.20) illustre le gain en temps de calcul obtenu par l'approche A-GSD en fonction de la dimension $n \times P$. Ce gain est obtenu en comparant les temps de calcul de A-GSD et PCG pour atteindre une erreur relative de 10^{-2}. On observe que le gain en temps de calcul croît quasi linéairement en fonction de $n \times P$ et peut atteindre, pour les calculs menés, un facteur 100.

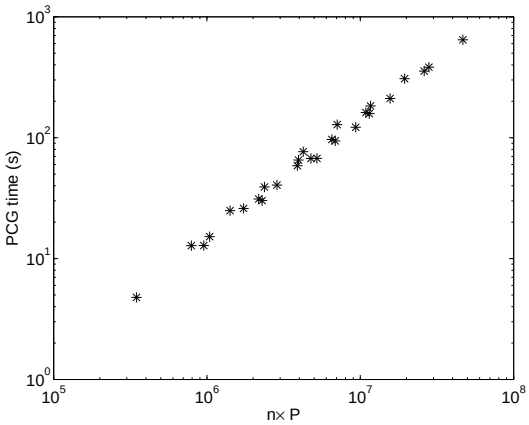


FIG. II.19 – $time(PCG)$ en fonction de $n \times P$

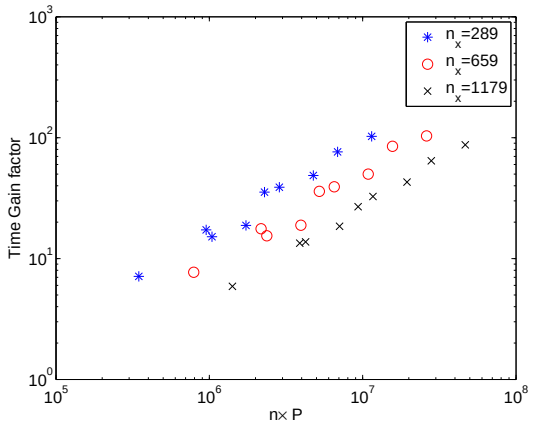


FIG. II.20 – Gain en temps de calcul : facteur $T_g = \frac{time(PCG)}{time(A-GSD)}$ en fonction de $n \times P$

Pour finir, un autre point très important de l'approche GSD doit être mentionné. Il s'agit du gain en terme de capacités mémoires requises pour mener le calcul. Ce gain en capacité mémoire pour stocker la solution s'exprime simplement

$$M_g = \frac{memory(PCG)}{memory(A-GSD)} = \frac{nP}{M(n+P)}$$

et peut atteindre une valeur de 200 pour les plus fines discrétisations traitées dans cet exemple. Cet aspect capacité mémoire est capital. Notamment, dans cet exemple, les discrétisations testées ont été

limitées par les capacités mémoires requises par l'algorithme de référence PCG. Sur la même machine, des calculs bien plus fins ont pu être menés par l'approche GSD.

6 Application aux problèmes non-linéaires

6.1 Application directe de la méthode

La méthode présentée dans ce chapitre ainsi que les algorithmes s'appliquent directement à la résolution d'un problème non-linéaire

$$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P, \quad A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = B(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{II.52}$$

où A est une forme semi-linéaire. Les algorithmes GSD conduisent alors directement à une décomposition spectrale de la solution. Les algorithmes de type méthode des puissances ont été appliqués dans [125] à la résolution d'une équation de Burgers stochastique (non-linéarité quadratique) et à une équation de diffusion elliptique (non-linéarité cubique). Des travaux en cours portent sur la mise en oeuvre de l'algorithme A-GSD pour la résolution d'une équation de Navier-Stokes stationnaire incompressible (non-linéarité quadratique) [103].

Les algorithmes GSD nécessitent la résolution de problèmes déterministes non-linéaires et de problèmes stochastiques non-linéaires, qui peuvent généralement être résolus par des solveurs classiques. Les algorithmes GSD s'avèrent particulièrement efficaces et pertinents lorsque les formes semi-linéaire et linéaire du problème peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = E\left(\sum_{k=1}^{m_A} A_k(\theta) a_k(\mathbf{u}, \mathbf{v})\right)$$
$$B(\mathbf{v}) = E\left(\sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta) b_k(\mathbf{v})\right)$$

où les $b_k(\cdot)$ sont des formes linéaires déterministes sur $\mathbb{R}^n$ et où les $a_k(\cdot,\cdot)$ sont des formes bilinéaires déterministes sur $\mathbb{R}^n$ voire semi-linéaires avec non-linéarités polynômiales, ce qui est le cas des applications traitées dans [125, 103]. En effet, dans ce cas, les algorithmes GSD permettent de découpler la résolution de problèmes stochastiques et de problèmes déterministes, ces derniers ayant une structure mathématique classique. Les détails de calcul sont introduits dans l'annexe B pour le cas particulier d'une non-linéarité quadratique (notamment le cas des équations de Burgers ou de Navier-Stokes).

6.2 Variante

Une variante, introduite dans [120], consiste à résoudre le problème (II.52) par un solveur non-linéaire itératif et à appliquer les algorithmes GSD pour la résolution des problèmes stochastiques linéaires à chaque itération.

Les algorithmes non-linéaires classiques ramènent la résolution du problème (II.52) à la résolution de problèmes linéaires successifs (voir section 4.4.2 du chapitre I) : connaissant $\mathbf{u}^{(k)} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, trouver $\mathbf{u}^{(k+1)} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ tel que

$$A^{(k)}(\mathbf{u}^{(k+1)}, \mathbf{v}) = B^{(k)}(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$$

où $A^{(k)}$ est une forme bilinéaire et où $B^{(k)}$ est une forme linéaire. Par exemple, dans le cas d'un algorithme de Newton, la forme $A^{(k)}$ est définie comme la dérivée de Gâteaux A' de A, évaluée en $\mathbf{u}^{(k)}$, soit

$$A^{(k)}(\mathbf{w}, \mathbf{v}) := A'(\mathbf{w}, \mathbf{v}; \mathbf{u}^{(k)}) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon}(A(\mathbf{u}^{(k)} + \epsilon \mathbf{w}, \mathbf{v}) - A(\mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{v})),$$

et la forme linéaire $B^{(k)}$ est définie par

$$B^{(k)}(\mathbf{v}) = B(\mathbf{v}) - A(\mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{v}) + A^{(k)}(\mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{v}).$$

La méthode GSD peut donc être appliquée à chacun des problèmes linéaires successifs, conduisant à une décomposition spectrale généralisée $\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{W}^{(k+1)} \mathbf{\Lambda}^{(k+1)}$ de l'itéré $k+1$. Un avantage de

la méthode GSD est qu'elle permet alors d'exploiter au fil des itérations l'information calculée dans les itérations précédentes. En effet, l'algorithme non-linéaire convergeant, on imagine naturellement que les décompositions spectrales des itérés successifs seront très semblables. Dans [120], il a donc été proposé un algorithme ré-exploitant les bases spectrales générées au cours des itérations afin d'initialiser la résolution des problèmes linéaires successifs. Si on conserve les bases déterministes, cette étape d'initialisation consiste à actualiser les variables aléatoires associées vis-à-vis du problème courant. Après cette étape d'initialisation, de nouvelles fonctions déterministes et stochastiques peuvent être construites (par un algorithme GSD linéaire) afin d'atteindre une précision souhaitée. Cette stratégie est synthétisée dans l'algorithme 5. On pourra voir dans l'exemple traité dans [120] qu'au fil des itérations non-linéaires, de moins en moins de nouvelles fonctions sont générées, ce qui se traduit par une diminution du coût de résolution des problèmes linéaires successifs.

Algorithm 5

1: *Initialize* $\mathbf{u}^0 = 0$
2: ***for*** $k = 0...k_{max}$ ***do***
3: *(Reuse) Find* $\mathbf{\Lambda}^{(k)} \in \mathbb{R}^{M_k} \otimes \mathcal{S}_P$ *solving*

$$A^{(k)}(\mathbf{W}^{(k)}\mathbf{\Lambda}^{(k)}, \mathbf{W}^{(k)}\mathbf{\Lambda}^*) = B^{(k)}(\mathbf{W}^{(k)}\mathbf{\Lambda}^*) \quad \forall \mathbf{\Lambda}^* \in \mathbb{R}^{M_k} \otimes \mathcal{S}_P$$

4: *With a GSD solver, find* $(\mathbf{W}, \mathbf{\Lambda})$ *such that* $\mathbf{u}^{(k+1)} \approx \mathbf{W}^{(k)}\mathbf{\Lambda}^{(k)} + \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}$ *approximates the problem* $A^{(k)}(\mathbf{u}^{(k+1)}, \mathbf{v}) = B^{(k)}(\mathbf{v})$
5: *Set* $\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{W}^{(k+1)}\mathbf{\Lambda}^{(k+1)}$ *with* $\mathbf{W}^{(k+1)} = (\mathbf{W}^{(k)}\ \mathbf{W})$ *and* $\mathbf{\Lambda}^{(k+1)} = ({\mathbf{\Lambda}^{(k)}}^T\ \mathbf{\Lambda}^T)^T$
6: *Perform a KL decomposition of* $\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{W}^{(k+1)}\mathbf{\Lambda}^{(k+1)}$ *and truncate with respect to the current residual error (remove less contributing modes)* $\rightarrow$ *obtain new couple* $(\mathbf{W}^{(k+1)}, \mathbf{\Lambda}^{(k+1)})$
7: *Check convergence*
8: ***end for***

7 Conclusions et perspectives

Ce chapitre a présenté les développements d'une nouvelle méthode de résolution d'équations aux dérivées partielles stochastiques. Cette méthode, baptisée GSD, s'inscrit dans le cadre des approches spectrales stochastiques de type Galerkin. Elle exploite la structure de produit tensoriel des espaces d'approximation en conduisant à une décomposition de la solution aléatoire sur une base réduite de fonctions déterministes et de fonctions stochastiques. Les espaces engendrés par ces bases réduites apparaissent comme les espaces propres dominants d'un pseudo problème aux valeurs propres. La GSD généralise ainsi le concept de décomposition spectrale. Des algorithmes dédiés ont été proposés pour la construction de bases réduites (quasi) optimales. Ces algorithmes, en découplant la résolution de problèmes déterministes et de problèmes stochastiques sur bases réduites, permettent d'obtenir des gains en temps de calcul considérables par rapport aux techniques de résolution classiques. De part le type de représentation de la solution, ils permettent également une réduction drastique des ressources mémoire nécessaires. Plusieurs variantes des algorithmes GSD ont été proposées, qui nécessitent la résolution de sous-problèmes différents (simple problème déterministe, problème déterministe sur base réduite stochastique, problème stochastique sur base réduite déterministe, ...). En pratique, le choix d'une variante pourra être guidé par les questions suivantes : quels types de sous-problèmes sont les plus faciles à implémenter ? existe-t-il un solveur robuste adapté à un type de sous-problème, éventuellement déjà implémenté dans des codes classiques ?

Pour certaines classes d'équations aux dérivées partielles, certains des algorithmes GSD demandent la résolution d'un petit nombre de problèmes déterministes ayant une structure mathématique classique, ce qui autorise l'utilisation de codes de calcul déterministes bien maîtrisés. En ce sens, la méthode GSD permet de retrouver une forte dose de non-intrusivité et pallie ainsi un autre inconvénient majeur des approches spectrales de type Galerkin, qui nécessitent la conception de techniques de résolution ad-hoc (solveurs non-linéaires adaptés, préconditionneurs, ...). En particulier, dans le cas de problèmes où l'approximation de Galerkin classique ne s'avère pas stable (*i.e.* problèmes à "convection dominante"), la question de la stabilisation des méthodes de Galerkin stochastique est un point délicat [102]. La méthode GSD permet quant à elle l'utilisation de techniques de stabilisation bien maîtrisés dans le cadre déterministe. Des travaux en cours concernent l'application de la méthode GSD aux équations de Navier-Stokes et devraient permettre de justifier l'intérêt de la GSD. Une autre perspective concerne l'application de la méthode aux problèmes de dynamique en calcul de structures. En séparant les problèmes déterministes des problèmes stochastiques, la méthode GSD devrait permettre l'utilisation de solveurs dynamiques classiques, et notamment de solveurs explicites où le pas de temps est conditionné par le problème déterministe courant. Dans le cadre des méthodes de Galerkin standards, l'utilisation d'un schéma temporel explicite nécessite le choix d'un pas de temps très conservatif, qui peut être intuitivement évalué à partir de la réalisation la plus défavorable des paramètres matériaux.

L'introduction d'indicateurs d'erreur pertinents, basés sur des techniques d'estimation d'erreur *a posteriori*, apparaît comme une perspective incontournable. L'évaluation de "l'erreur de réduction", *i.e.* la distance entre l'approximation sur base réduite et l'approximation de Galerkin dans $\mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$, est un point relativement bien maîtrisé qui est mené classiquement afin de définir des critères d'arrêt des algorithmes. Une manière standard mais souvent coûteuse d'évaluer cette erreur consiste à calculer le résidu du problème discrétisé. D'autres critères moins coûteux sont proposés dans [119]. Une question plus primordiale concerne l'estimation *a posteriori* de la distance entre la solution approchée et la solution du modèle mathématique non discrétisé (dans $\mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$). Il est en effet inutile d'évaluer avec précision (*e.g.* la précision machine) l'approximation de Galerkin lorsque l'erreur par rapport à la solution exacte est non négligeable (*e.g.* 10^{-2}, 10^{-3}...). Une telle estimation permettrait de fournir des critères d'arrêt plus pertinents pour la construction des bases réduites. On pourrait également imaginer une construction adaptative des bases réduites, optimisant les discrétisations déterministes et stochastiques afin d'atteindre une erreur souhaitée sur une quantité d'intérêt.

La méthode GSD exploite la structure de l'espace de travail $\mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$, qui s'écrit comme un produit tensoriel d'un espace de fonctions déterministes $\mathcal{V}$ et d'un espace de fonctions stochastiques $\mathcal{S}$. En fait,

les principes de la GSD et les algorithmes proposés s'appliquent assez naturellement à d'autres types de problèmes présentant cette structure produit tensoriel de l'espace de travail. Les problèmes les plus immédiats sont les problèmes d'évolution, où $\mathcal{V}$ désigne un espace de fonctions spatiales et $\mathcal{S}$ un espace de fonctions temporelles à valeurs scalaires. Dans ce contexte, elle offre une technique de construction automatique de bases réduites, alternative aux techniques de réduction de modèle classiques telle que la POD [152, 7, 133, 5, 170, 96]. On notera d'ailleurs que la méthode GSD est inspirée de la méthode d'approximation radiale développée dans ce contexte [87, 89, 124]. On peut également mentionner comme autre type d'application directe des algorithmes GSD les analyses dynamiques dans l'espace des fréquences où $\mathcal{V}$ désigne un espace de fonctions spatiales à valeurs dans $\mathbb{C}$ et où $\mathcal{S}$ désigne des fonctions de la fréquence à valeurs dans $\mathbb{C}$. Ces différentes applications (non stochastiques) pourraient tirer partie de l'efficacité des algorithmes GSD présentés dans ce mémoire.

Une autre perspective concerne l'extension de la méthodologie à des espaces de travail s'écrivant comme le produit tensoriel de plusieurs espaces fonctionnels. Pour les problèmes d'évolution stochastiques, pour lesquels l'espace de travail s'écrit $\mathcal{V}^x \otimes \mathcal{V}^t \otimes \mathcal{S}$, l'extension de la GSD permettrait de découpler les dimensions spatiale ($\mathcal{V}^x$), temporelle ($\mathcal{V}^t$) et stochastique ($\mathcal{S}$). Elle pourrait permettre une réduction supplémentaire des coûts de calcul de la méthode présentée dans ce chapitre (diminution des besoins mémoires pour le stockage des fonctions spatio-temporelles, diminution du temps de calcul des intégrations temporelles et spatiales). Dans le cadre des problèmes stochastiques, on peut également penser à ré-écrire l'espace $\mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$ sous la forme $\mathcal{V} \otimes \mathcal{S}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{S}_m$, où les $\mathcal{S}_i$ sont les espaces de fonctions d'une seule variable aléatoire de base. L'extension de la méthode à ce type de problème pourrait permettre de découpler les dimensions stochastiques et ainsi d'envisager le traitement de problèmes à grande dimension stochastique. Notons enfin que ce type de problématique apparaît plus généralement dans le cas d'équations aux dérivées partielles multi-dimensionnelles définies sur des domaines hyper-rectangulaires. Dans ce contexte, une méthodologie de calcul basée sur la séparation des variables a été proposée [32, 3, 4]. Cette méthode repose sur les mêmes principes de base que la GSD, bien que fournissant des algorithmes différents, non basés sur une interprétation de la construction comme un problème aux valeurs propres. Une extension de la GSD à ces problèmes multi-dimensionnels nécessitera une nouvelle interprétation du problème de construction des bases réduites et le développement d'algorithmes ad-hoc.

Chapitre III

Méthodes éléments finis stochastiques pour la prise en compte d'incertitudes géométriques

Dans le cadre de la résolution des équations aux dérivées partielles stochastiques, la prise en compte d'incertitudes sur la géométrie (domaine de définition des équations), est un point encore mal maîtrisé. Ce chapitre résume mes travaux de recherche concernant l'élaboration d'une nouvelle méthode de calcul pour répondre à cette problématique. Cette méthode est une extension au cadre stochastique de la méthode X-FEM (eXtended Finite Element Method).

Sommaire

1 Problématique et contexte scientifique . . . 65

2 Formulation d'un problème défini sur un domaine aléatoire . . . 65

2.1 Formulation du problème déterministe . . . 66

2.2 Formulation du problème stochastique . . . 66

2.3 Formulation faible du problème et caractère bien posé . . . 66

2.4 Discrétisation probabiliste . . . 67

3 Méthodes éléments finis stochastiques : approches classiques . . . 67

3.1 Approches non-intrusives et éléments finis classiques avec remaillages . . . 67

3.2 Introduction d'un mapping aléatoire . . . 68

4 Reformulation et approximation du problème sur un domaine fictif déterministe . . . 70

4.1 Prolongement de la solution sur un domaine fictif déterministe . . . 70

4.2 Reformulation et analyse mathématique du problème . . . 70

4.3 Définition classique des espaces d'approximation . . . 71

4.4 Approximation de Galerkin . . . 72

4.5 Autres méthodes de projection . . . 73

4.6 Traitement des conditions de Dirichlet . . . 74

5 Représentation de la géométrie à l'aide de fonctions de level-sets . . . 77

5.1 Level-sets aléatoires . . . 77

5.2 Description de domaines et interfaces aléatoires . . . 77

5.3 Construction des level-sets . . . 78

5.4 Discrétisation des level-sets . . . 79

5.5 Intégration . . . 79

6 Résolution numérique de problèmes définis sur des domaines aléatoires . . . 80

6.1 Vision globale de la procédure de résolution . . . 80

6.2 Calcul des décompositions des matrices et vecteurs aléatoires . . . 80

6.3 Illustration : Homogénéisation d'un matériau à micro-structure aléatoire 83
7 Problèmes à interfaces matérielles aléatoires 86
7.1 Formulation d'un problème à interface matérielle aléatoire 86
7.2 Approximation éléments finis stochastiques standard 87
7.3 Méthode de partition de l'unité 88
7.4 Enrichissement de l'approximation dans le cas d'une interface matérielle 89
7.5 Illustrations 93
8 Conclusions et perspectives 94

1 Problématique et contexte scientifique

Dans le cadre de méthodes éléments finis stochastiques de type Galerkin pour la résolution d'équations aux dérivées partielles stochastiques, la prise en compte d'incertitudes portant sur l'opérateur ou les termes sources est aujourd'hui relativement bien maîtrisée. Cependant, la prise en compte d'incertitudes sur la géométrie reste un point encore très peu abordé mais qui peut susciter un intérêt majeur dans de nombreuses applications. Notamment, dans le calcul de structures, diverses applications nécessitent la modélisation d'aléas géométriques : modélisation des incertitudes liées à un procédé de fabrication, homogénéisation de matériaux multi-phasés aléatoires, impact d'une fissure aléatoire sur la tenue d'une structure...

Une manière simple de résoudre des équations aux dérivées partielles définies sur des domaines aléatoires consiste à utiliser une approche stochastique dite "non-intrusive" (Monte-Carlo, surface de réponse...) couplée à une méthode éléments finis classique déterministe. Cependant, ces approches demandent généralement de nombreuses résolutions déterministes, chaque résolution nécessitant la construction d'un nouveau maillage conforme à la géométrie. De plus, elles ne conduisent pas à une description explicite de la solution en fonction des variables décrivant l'aléa sur la géométrie. Afin de pallier les problèmes de remaillage et de fournir une description explicite de la solution, une alternative possible consiste à construire une approximation éléments finis classique sur un domaine déterministe de référence et à introduire un mapping aléatoire entre ce domaine et le domaine physique aléatoire. Une telle démarche a été utilisée dans [172, 162, 166] et également dans [58] pour le cas d'interfaces aléatoires au sein de milieux stratifiés. La difficulté principale de cette approche repose sur la construction du mapping dans le cas de géométries complexes [163].

Une partie de mes travaux de recherche a consisté à développer une nouvelle méthode éléments finis stochastiques permettant de pallier les principaux inconvénients des approches classiques. La méthode proposée, baptisée X-SFEM pour eXtended Stochastic Finite Element Method, est basée sur une extension au cadre stochastique de la méthode éléments finis étendus (X-FEM) [115, 18]. Les objectifs principaux qui ont guidé le développement de cette stratégie sont les suivants : définir une méthode d'approximation robuste, contrôler la précision de l'approximation, éviter les problèmes de remaillage et obtenir une description explicite de la solution autorisant un post-traitement aisé de la solution. Pour le cas d'équations définies sur des domaines aléatoires, la méthode X-SFEM présente de fortes similitudes avec une approche récemment introduite [31], notamment dans la reformulation du problème continu et la construction des espaces d'approximation. Cette méthode est une extension au cadre stochastique de la Fictitious Domain Method [67]. Dans le cas particulier des domaines aléatoires, la différence essentielle avec X-SFEM se situe dans la description de la géométrie aléatoire et dans la mise en oeuvre numérique de la méthode. On notera d'ailleurs que dans ce cas particulier, X-SFEM correspond à une extension d'un cas dégénéré de l'approche X-FEM [39, 161] où des méthodes d'approximation standards peuvent être utilisées au niveau spatial.

Dans une première partie de ce chapitre, nous nous intéresserons au cas d'équations aux dérivées partielles définies sur un domaine aléatoire, ce qui permettra de dresser un état de l'art de stratégies existantes pour ce cas particulier (section 3) et d'introduire progressivement les premiers points de la méthode X-SFEM : reformulation du problème et construction classique d'espaces d'approximation (section 4), utilisation de la technique des level-sets [148] pour la description de géométries aléatoires (section 5), mise en oeuvre numérique (section 6). Après avoir introduit les différents ingrédients de la méthode pour ce premier cas d'étude, nous exposerons les développements nécessaires pour le traitement de problèmes à interfaces matérielles aléatoires (section 7), ce qui permettra d'introduire un autre point clé de la méthode : l'enrichissement des espaces d'approximation par la méthode la partition de l'unité [110].

2 Formulation d'un problème défini sur un domaine aléatoire

Tout en essayant de conserver une vision générale de ce type problème, on illustrera les différentes méthodologies sur un problème modèle : l'étude des déformations d'une structure élastique linéaire sous l'hypothèse des petites déformations. Ce problème modèle illustre plus généralement le cas d'équations

aux dérivées partielles elliptiques linéaires définies sur un domaine aléatoire.

2.1 Formulation du problème déterministe

On considère une structure occupant un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Elle est soumise à des efforts volumiques $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ sur Ω et des efforts surfaciques $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ sur une partie Γ_2 de la frontière. La structure est fixée sur une partie Γ_1 de la frontière $\partial\Omega$ telle que $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$. Sur la partie complémentaire de $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ dans $\partial\Omega$, notée Γ_0, on impose des efforts surfaciques nuls. On note $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ le champ de déplacement et $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})$ la partie symétrique du gradient de $\boldsymbol{u}$ (tenseur des déformations). On considère un matériau élastique linéaire et on note $\boldsymbol{C}$ le tenseur de Hooke. La formulation variationnelle de ce problème peut s'écrire : trouver $\boldsymbol{u} \in \mathcal{V} = \{\boldsymbol{v} \in (H^1(\Omega))^d; \boldsymbol{v} = 0 \; sur \; \Gamma_1\}$ tel que

$$\int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})\, dx = \int_\Omega \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{f}\, dx + \int_{\Gamma_2} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}\, dx \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V} \tag{III.1}$$

2.2 Formulation du problème stochastique

On considère à présent le domaine aléatoire. On introduit un espace de probabilité $(\Theta, \mathcal{B}, P)$ permettant de représenter le contenu probabiliste du problème. La domaine aléatoire est caractérisé par une variable aléatoire $\Omega : \theta \in \Theta \mapsto \Omega(\theta) \subset \mathbb{R}^d$. $\Omega(\theta)$ représente une réalisation du domaine associée à l'événement élémentaire $\theta \in \Theta$.

Pour $\theta \in \Theta$ donné, on introduit naturellement un espace fonctionnel associé $\mathcal{V}(\theta)$ pour le champ de déplacement :

$$\mathcal{V}(\theta) = \{\boldsymbol{v} \in (H^1(\Omega(\theta)))^d; \boldsymbol{v} = 0 \; sur \; \Gamma_1(\theta)\} \tag{III.2}$$

Le problème stochastique peut alors être formulé de la manière suivante : trouver $\boldsymbol{u} : \theta \in \Theta \mapsto \boldsymbol{u}(\cdot, \theta) \in \mathcal{V}(\theta)$ tel que l'on ait P-presque sûrement

$$a(\boldsymbol{u}(\cdot, \theta), \boldsymbol{v}; \theta) = b(\boldsymbol{v}; \theta) \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}(\theta), \tag{III.3}$$

où $a(\cdot, \cdot; \theta)$ est une forme bilinéaire continue symétrique coercive sur $\mathcal{V}(\theta) \times \mathcal{V}(\theta)$ et $b(\cdot; \theta)$ est une forme linéaire continue sur $\mathcal{V}(\theta)$, définies par

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}; \theta) = \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})\, dx, \tag{III.4}$$

$$b(\boldsymbol{v}; \theta) = \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v}\, dx + \int_{\Gamma_2(\theta)} \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{v}\, ds. \tag{III.5}$$

La formulation (III.3) est une formulation forte au niveau stochastique.

2.3 Formulation faible du problème et caractère bien posé

A présent, on introduit une formulation faible du problème au niveau stochastique. On considère que le problème peut être formulé dans l'espace fonctionnel suivant :

$$\mathcal{W} = \{\boldsymbol{v} : \theta \in \Theta \mapsto \boldsymbol{v}(\cdot, \theta) \in \mathcal{V}(\theta); \int_\Theta \|\boldsymbol{u}\|^2_{\mathcal{V}(\theta)}\, dP(\theta) < \infty\} := L^2(\Theta, dP; \mathcal{V}). \tag{III.6}$$

La formulation faible du problème s'écrit alors : trouver $\boldsymbol{u} \in \mathcal{W}$ tel que

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = B(\boldsymbol{v}) \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{W}, \tag{III.7}$$

où

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \int_\Theta a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}; \theta)\, dP(\theta) := E(a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}; \theta)), \tag{III.8}$$

$$B(\boldsymbol{v}) = \int_\Theta b(\boldsymbol{v}; \theta)\, dP(\theta) := E(b(\boldsymbol{v}; \theta)). \tag{III.9}$$

On considérera que la forme bilinéaire A est continue et coercive sur $\mathcal{W}\times\mathcal{W}$ et que B est continue sur $\mathcal{W}$. Ces propriétés garantissent le caractère bien posé du problème. Dans le cas de domaines déterministes, on peut se reporter à [15, 50, 154] pour une étude détaillée des hypothèses suffisantes de régularité sur les données conduisant à ces propriétés (voir également section 4 du chapitre I). Peu de travaux ont été consacrés à l'étude mathématique approfondie des problèmes à géométrie incertaine et notamment à l'étude des propriétés de régularité de la géométrie nécessaires pour garantir le caractère bien posé. Quelques résultats mathématiques concernant l'impact d'incertitudes sur le domaine peuvent être trouvés dans [11, 12].

Remarque III.1

Les propriétés de coercivité et de continuité de A et B peuvent être naturellement héritées de celles de a et b. Considérons que $\forall \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}(\theta)$,

$$\begin{aligned}
&|a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v};\theta)| \leqslant c_a \|\boldsymbol{u}\|_{\mathcal{V}(\theta)} \|\boldsymbol{v}\|_{\mathcal{V}(\theta)},\\
&a(\boldsymbol{v},\boldsymbol{v};\theta) \geqslant \alpha_a \|\boldsymbol{v}\|^2_{\mathcal{V}(\theta)},\\
&|b(\boldsymbol{v};\theta)| \leqslant c_b \|\boldsymbol{v}\|_{\mathcal{V}(\theta)}
\end{aligned}$$

où $c_a, c_b < \infty$ et $\alpha_a > 0$. Ces constantes dépendent a priori des propriétés matériaux, des chargements et de la géométrie. Cependant, s'il existe de telles constantes indépendantes de l'événement et telles que les propriétés ci-dessus soient presque sûrement vérifiées, on peut aisément montrer que A et B possèdent les propriétés de coercivité et de continuité avec ces mêmes constantes. Ces conditions sont suffisantes mais très certainement non nécessaires. Elles sont cependant vérifiées dans les exemples traités dans ce chapitre.

2.4 Discrétisation probabiliste

On adopte une vision paramétrique des incertitudes en considérant que le contenu probabiliste du problème peut être représenté par un nombre fini de variables aléatoires $\boldsymbol{\xi} : \Theta \to \boldsymbol{\Xi} \subset \mathbb{R}^m$ de loi de probabilité connue $P_{\boldsymbol{\xi}}$. Notamment, on considère que le domaine aléatoire peut s'exprimer en fonction de ces variables aléatoires, $\Omega(\theta) \equiv \Omega(\boldsymbol{\xi}(\theta))$. Les quantités intervenant dans la formulation (III.7) peuvent donc être écrites en fonction de ces variables aléatoires :

$$\mathcal{V}(\theta) \equiv \mathcal{V}(\boldsymbol{\xi}(\theta)), \quad a(\cdot,\cdot;\theta) \equiv a(\cdot,\cdot;\boldsymbol{\xi}(\theta)), \quad b(\cdot;\theta) \equiv b(\cdot;\boldsymbol{\xi}(\theta)).$$

D'après le lemme de Doob-Dynkin [127], on peut donc se ramener à un problème défini sur l'espace de probabilité $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$ et définir un nouvel espace fonctionnel de travail :

$$\mathcal{W} = \{\boldsymbol{u} : \boldsymbol{\xi} \in \Xi \mapsto \boldsymbol{u}(\cdot,\boldsymbol{\xi}) \in \mathcal{V}(\boldsymbol{\xi}); E(\|\boldsymbol{u}(\cdot,\boldsymbol{\xi})\|^2_{\mathcal{V}(\boldsymbol{\xi})}) < \infty\} := L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}; \mathcal{V}). \tag{III.10}$$

où l'espérance mathématique est définie par $E(f(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} f(\mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y})$.

3 Méthodes éléments finis stochastiques : approches classiques

L'espace fonctionnel de travail $\mathcal{W}$, défini dans (III.6) ou de manière équivalente dans (III.10), n'a pas la structure d'un produit tensoriel d'un espace fonctionnel déterministe par un espace fonctionnel stochastique. L'application des méthodes éléments finis stochastiques décrites dans le chapitre I n'est donc clairement pas immédiate. Dans cette partie, nous rappelons des approches classiques permettant d'étendre ces méthodes à notre problème d'intérêt et présentons également une technique alternative plus récente, basée sur l'introduction de mappings aléatoires.

3.1 Approches non-intrusives et éléments finis classiques avec remaillages

Une manière naturelle de résoudre un problème stochastique défini sur un domaine aléatoire consiste à utiliser une méthode stochastique non-intrusive, telle qu'une méthode d'intégration directe ou une méthode de projection ou de régression sur une base fonctionnelle (voir section 2 du chapitre

I). Ces techniques nécessitent alors la résolution du problème (III.3) pour des événements élémentaires donnés $\theta_k \in \Theta$. Ces techniques ont l'avantage de ne nécessiter qu'un simple code de calcul déterministe. Pour un événement donné $\theta_k \in \Theta$, on peut introduire un maillage éléments finis $\mathcal{T}_h(\theta_k)$ du domaine $\Omega(\theta_k)$ et l'espace d'approximation éléments finis associé $\mathcal{V}_h(\theta_k) \subset \mathcal{V}(\theta_k)$.

Le premier inconvénient de ces techniques est qu'elles peuvent nécessiter de nombreux calculs déterministes, chacun de ces calculs comprenant les étapes suivantes : maillage du domaine, assemblage et résolution du problème éléments finis associé. Un autre inconvénient est que les solutions $\boldsymbol{u}_h(\cdot, \theta_k) \in \mathcal{V}_h(\theta_k)$ sont définies sur des maillages différents et que les problèmes éléments finis associés ont une structure algébrique différente. L'information sur les réalisations non calculées est donc en général inaccessible. Notamment, on ne pourra pas obtenir une représentation explicite de la solution en fonction des variables aléatoires de base. De plus, effectuer une analyse probabiliste *a posteriori* de la solution complète nécessiterait de stocker les maillages et solutions éléments finis de tous les événements élémentaires calculés.

Ce type d'approche, bien que conduisant à un grand coût de calcul, peut cependant être viable si on s'intéresse à une quantité d'intérêt particulière indépendante de la géométrie $J(\boldsymbol{u}_h(\cdot, \theta); \theta)$. Des calculs déterministes avec remaillages sont alors effectués pour obtenir les réalisations $J(\boldsymbol{u}_h(\cdot, \theta_k))$ de cette quantité d'intérêt (voir section 2 du chapitre I pour la description des approches non-intrusives).

3.2 Introduction d'un mapping aléatoire

Afin d'éviter les problèmes de remaillage et d'obtenir une description explicite de la solution, une technique alternative consiste à caractériser le domaine aléatoire $\Omega(\theta)$ à l'aide d'un mapping aléatoire défini sur un domaine de référence déterministe Ω^0. Le problème peut alors être écrit sur Ω^0, ce qui permet d'introduire une approche éléments finis stochastiques standard. Une telle stratégie a été introduite dans [172, 162]. Nous la détaillons brièvement afin d'en retirer ses avantages et inconvénients.

3.2.1 Description de la géométrie aléatoire à l'aide d'un mapping aléatoire

On introduit un domaine de référence déterministe $\Omega^0 \subset \mathbb{R}^d$ et on suppose qu'il existe un mapping $\boldsymbol{\Phi}(\cdot, \theta)$ entre Ω^0 et une réalisation $\Omega(\theta)$ du domaine aléatoire : $\boldsymbol{\Phi}(\cdot, \theta) : \boldsymbol{x}^0 \in \Omega^0 \mapsto \boldsymbol{x} = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}^0, \theta) \in \Omega(\theta)$. On note $\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\cdot, \theta)$ le mapping inverse. La donnée de Ω^0 et $\boldsymbol{\Phi}$ permet de caractériser complètement la géométrie aléatoire. On suppose que les parties $\Gamma_i(\theta)$ de la frontière sont les images par $\boldsymbol{\Phi}(\cdot, \theta)$ de parties complémentaires déterministes Γ_i^0 of $\partial\Omega^0$. On note $\boldsymbol{\Phi}_{|i}$ la restriction de $\boldsymbol{\Phi}$ sur Γ_i^0.

Une manière de construire un mapping ayant de bonnes propriétés de régularité (continuité, différentiabilité) consiste à se donner un domaine de référence et à définir le mapping comme la solution de l'équation aux dérivées partielles suivante : trouver $\boldsymbol{\Phi} : \Omega^0 \times \Theta \to \mathbb{R}^d$ tel que

$$\boldsymbol{\Delta}_0 \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}^0, \theta) = 0 \quad sur\ \Omega^0 \times \Theta \tag{III.11}$$

$$\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}^0, \theta) = \boldsymbol{x}(\theta) \quad sur\ \partial\Omega^0 \times \Theta \tag{III.12}$$

où $\boldsymbol{\Delta}_0$ désigne l'opérateur Laplacien par rapport à la variable $\boldsymbol{x}^0$. C'est un problème stochastique à opérateur déterministe et second membre aléatoire qui peut être résolu par une approche éléments finis stochastiques classique. Ce problème conduit à un mapping qui respecte la frontière aléatoire du domaine et qui possède de bonnes propriétés de régularité. Cette méthodologie est généralement limitée à des domaines simples, aisément paramétrables [172].

3.2.2 Construction de l'espace d'approximation

On introduit un maillage éléments finis fixe $\mathcal{T}_h^0$ du domaine Ω^0 et l'espace d'approximation associé : $\mathcal{V}_n^0 = \{\boldsymbol{v}^0(\boldsymbol{x}^0) = \sum_{i=1}^n \boldsymbol{\varphi}_i^0(\boldsymbol{x}^0) v_i,\ \ v_i \in \mathbb{R}\}$, où les $\boldsymbol{\varphi}_i^0 \in \mathcal{V}^0 = \{\boldsymbol{v} \in (H^1(\Omega^0))^d; \boldsymbol{v} = 0\ sur\ \Gamma_1^0\}$ sont les fonctions de base éléments finis associées au maillage $\mathcal{T}_h^0$. L'espace d'approximation $\mathcal{V}_n^0$ étant indépendant de l'événement, un espace d'approximation ayant une structure de produit tensoriel peut être introduit : $\mathcal{W}_{n,P}^0 \cong \mathcal{V}_n^0 \otimes \mathcal{S}_P$. Un espace d'approximation de $\mathcal{W}_{n,P} \subset \mathcal{W}$ peut alors être simplement

défini par un mapping adapté des fonctions de $\mathcal{W}^0_{n,P}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_{n,P} &= \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},\theta) = \boldsymbol{v}^0(\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{x},\theta),\theta),\ \boldsymbol{v}^0 \in \mathcal{W}^0_{n,P}\} \\ &= \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},\theta) = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x},\theta) v_i(\theta), v_i(\theta) \in \mathcal{S}_P\},\end{aligned} \tag{III.13}$$

où $\boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x},\theta) = \boldsymbol{\varphi}^0_i(\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{x},\theta))$. L'image de $\mathcal{T}^0_h$ par le mapping $\boldsymbol{\Phi}(\cdot,\theta)$ est un maillage $\mathcal{T}_h(\theta)$ de $\Omega(\theta)$ qui peut être considéré comme un maillage aléatoire.

3.2.3 Définition et construction de l'approximation

L'approximation de Galerkin $\boldsymbol{u}_{n,P}$ peut alors être définie classiquement en injectant dans la formulation (III.7) l'espace d'approximation $\mathcal{W}_{n,P}$. En notant $\mathbf{u} = (u_1 \dots u_n)^T \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ le vecteur aléatoire associé à un élément $\boldsymbol{u}_{n,P} = \sum_{i=1}^n \boldsymbol{\varphi}_i u_i \in \mathcal{W}_{n,P}$, cela conduit à la résolution du système d'équations :

$$E(\mathbf{v}^T \mathbf{A}\mathbf{u}) = E(\mathbf{v}^T \mathbf{b}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{III.14}$$

où $\mathbf{A}$ est une matrice aléatoire et $\mathbf{b}$ un vecteur aléatoire dont les coefficients peuvent s'obtenir par intégration sur le domaine de référence. Pour toute fonction $f(\boldsymbol{x},\theta)$, avec $\boldsymbol{x} \in \Omega(\theta)$, notons $f^0(\boldsymbol{x}^0,\theta) = f(\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}^0,\theta),\theta)$ la fonction correspondante définie sur $\Omega^0 \times \Theta$. Les coefficients de $\mathbf{A}$ et $\mathbf{b}$ peuvent alors s'écrire :

$$(\mathbf{A}(\theta))_{ij} = a(\boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\varphi}_i; \theta) = \int_{\Omega^0} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}^0_i) : \boldsymbol{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}^0_j)\ J^0\, dx^0, \tag{III.15}$$

$$(\mathbf{b}(\theta))_i = b(\boldsymbol{\varphi}_i; \theta) = \int_{\Omega^0} \boldsymbol{\varphi}^0_i \cdot \boldsymbol{f}^0\ J^0\, dx^0 + \int_{\Gamma^0_2} \boldsymbol{\varphi}^0_i \cdot \boldsymbol{F}^0\ J^0_{|2}\, ds^0, \tag{III.16}$$

où J^0 et $J^0_{|2}$ sont les jacobiens de $\boldsymbol{\Phi}$ et $\boldsymbol{\Phi}_{|2}$ respectivement. Dans l'équation (III.15), le tenseur de déformation peut s'exprimer de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}^0_j) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}^0_j}{\partial \boldsymbol{x}} + \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}^0_j}{\partial \boldsymbol{x}}^T\right), \quad \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}^0_j}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}^0_j}{\partial \boldsymbol{x}^0} \cdot \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}}{\partial \boldsymbol{x}^0}\right)^{-1}. \tag{III.17}$$

L'aléa sur la géométrie est contenu uniquement dans les mappings $\boldsymbol{\Phi}$ et $\boldsymbol{\Phi}_{|2}$ et leurs jacobiens. On notera que ce problème pourrait être écrit comme un problème d'élasticité classique sur Ω^0 en modifiant la définition du tenseur d'élasticité et des efforts. L'intégration du premier membre et du second membre du système (III.14) n'est pas triviale et nécessite un soin particulier. Une représentation stochastique explicite des mappings peut faciliter cette étape d'intégration.

Une autre définition de l'approximation, basée sur une approche de projection, peut également être utilisée. Cela consiste à définir le vecteur aléatoire $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ par [1]

$$\mathbf{u}(\theta) = \sum_\alpha \mathbf{u}_\alpha H_\alpha(\theta), \quad \mathbf{u}_\alpha =< \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}, H_\alpha >_{L^2(\Theta,dP)} = \int_\Theta \mathbf{A}(\theta)^{-1}\mathbf{b}(\theta) H_\alpha(\theta) dP(\theta) \tag{III.18}$$

Cependant, dans ce cas, l'approximation $\boldsymbol{u}_{n,P}$ obtenue apparaît comme la projection de la solution semi-discrétisée $\boldsymbol{u}_h$ par rapport au produit scalaire suivant :

$$\ll \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \gg = \int_\Theta \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} (J^0)^{-1}\, dx\, dP(\theta) = \int_\Theta \int_{\Omega^0} \boldsymbol{u}^0 \cdot \boldsymbol{v}^0\, dx\, dP(\theta). \tag{III.19}$$

qui ne correspond pas à une projection L^2 classique de la solution définie sur le domaine physique.

[1] L'expression (III.18) suppose que les fonctions H_α sont orthonormées dans $L^2(\Theta, dP)$.

3.2.4 Commentaires

Comparée aux approches classiques éléments finis avec remaillages, cette méthode a l'avantage de ne pas nécessiter de remaillage. Elle conduit aussi à une description explicite de la solution. Cependant, elle présente différents inconvénients. Tout d'abord, la construction du mapping $\mathbf{\Phi}$ n'est pas triviale et nécessite le développement de méthodes numériques ad-hoc [163, 172]. Les restrictions sur la régularité du mapping ne permettent pas de traiter le cas de géométries complexes, notamment des géométries pour lesquelles des événements différents peuvent être associés à des topologies différentes du domaine. De plus, comme l'approximation n'a pas une structure de produit tensoriel, un post-traitement du vecteur aléatoire $\mathbf{u}$ ne donne pas d'information pertinente sur la solution physique. Par exemple, l'espérance $E(\mathbf{u})$ fournit l'espérance de $\boldsymbol{u}^0(\boldsymbol{x}^0, \theta)$ mais pas l'espérance du déplacement physique $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \theta)$ en un point donné $\boldsymbol{x}$.

4 Reformulation et approximation du problème sur un domaine fictif déterministe

Afin de retrouver une structure produit tensoriel de l'espace de travail et ainsi de pouvoir mettre en oeuvre les méthodes d'approximation classiques, une possibilité consiste à reformuler le problème sur un domaine fictif déterministe englobant le domaine physique, en considérant un prolongement de la solution sur ce domaine. Dans un cadre déterministe, cette reformulation sur un domaine fictif indépendant de la géométrie est introduit dans différentes méthodes : méthode X-FEM [39, 161], Fictitious Domain Method [67].

La méthode présentée dans la suite de ce chapitre [126, 123] est une extension au cadre stochastique de la méthode X-FEM. La reformulation utilisée est semblable à celle utilisée dans le contexte de la Fictitious Domain Method, dont l'extension au cadre stochastique a été proposée en parallèle de mes activités de recherche [31].

4.1 Prolongement de la solution sur un domaine fictif déterministe

On définit un domaine fictif D qui contient toutes les réalisations du domaine aléatoire (voir figure III.1) :

$$\cup_{\theta\in\Theta}\Omega(\theta) \subset D.$$

L'objectif est d'introduire une reformulation équivalente du problème en considérant un prolongement de la solution $\boldsymbol{u}$ sur $D \times \Theta$. Bien sûr, on ne s'intéressera en pratique qu'à la partie physique de la solution.

Définition III.2

La partie physique d'une solution $\boldsymbol{u}$ définie sur $D \times \Theta$ est la restriction $\boldsymbol{u}_{|\mathcal{P}}$ de $\boldsymbol{u}$ sur le domaine physique $\mathcal{P} \subset D \times \Theta$, défini par

$$\mathcal{P} = \{(\boldsymbol{x}, \theta) \in D \times \Theta; \boldsymbol{x} \in \Omega(\theta)\}. \tag{III.20}$$

Pour l'instant, on considère le cas où la partie Γ_1 du domaine où on impose les conditions de Dirichlet est déterministe et est contenue dans une partie de la frontière ∂D (figure III.2). On soulèvera cette hypothèse un peu plus loin.

4.2 Reformulation et analyse mathématique du problème

On peut à présent introduire l'espace fonctionnel de fonctions spatiales

$$\overline{\mathcal{V}} = \{\boldsymbol{v} \in (H^1(D))^d; \boldsymbol{v} = 0 \ sur \ \Gamma_1\}, \tag{III.21}$$

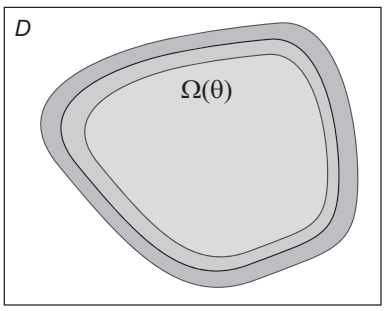


FIG. III.1 – Domaine déterministe D incluant toutes les réalisations du domaine physique $\Omega(\theta)$

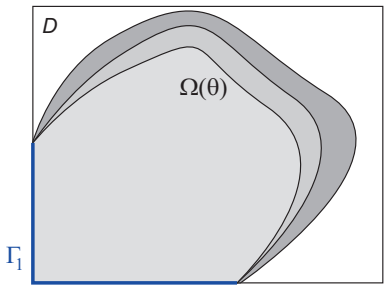


FIG. III.2 – Cas où Γ_1 est déterministe et $\Gamma_1 \subset \partial D$

qui est indépendant de l'événement élémentaire. La solution aléatoire peut alors être recherchée dans l'espace fonctionnel

$$\overline{\mathcal{W}} = \{\boldsymbol{v} : \theta \in \Theta \to \boldsymbol{v}(\cdot,\theta) \in \overline{\mathcal{V}}; \int_\Theta \|\boldsymbol{v}\|^2_{\overline{\mathcal{V}}}\, dP(\theta) < \infty\} := L^2(\Theta, dP; \overline{\mathcal{V}}), \tag{III.22}$$

Le problème stochastique (III.7) peut être reformulé comme suit :

$$\boldsymbol{u} \in \overline{\mathcal{W}}, \quad A(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = B(\boldsymbol{v}) \quad \forall \boldsymbol{v} \in \overline{\mathcal{W}} \tag{III.23}$$

où les formes A et B sont toujours définies comme dans la formulation initiale (III.7). La forme bilinéaire A n'est que semi-coercive sur $\overline{\mathcal{W}}$. Il existe donc une infinité de solutions au problème (III.23). On montre cependant la propriété suivante [126].

Propriété III.3

La partie physique de la solution est unique et coincide avec la solution du problème initial (III.7). En d'autres termes, toutes les solutions du problème (III.23) ne diffèrent que par des fonctions dont le support est inclus dans la partie complémentaire de $\mathcal{P}$, appelée "domaine non physique". Si on introduit la relation d'équivalence suivante sur $\overline{\mathcal{W}}$,

$$\boldsymbol{u}_1 \sim \boldsymbol{u}_2 \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{u}_2 \quad sur \quad \mathcal{P},$$

le problème (III.23) admet une solution unique sur l'espace quotient $\overline{\mathcal{W}}/\sim$.

Par la suite, on note $I_{\mathcal{P}}(\boldsymbol{x},\theta)$ la fonction indicatrice de $\mathcal{P}$, définies sur $D \times \Theta$, qui s'écrit

$$I_{\mathcal{P}}(\boldsymbol{x},\theta) = \begin{cases} 1 & si\ (\boldsymbol{x},\theta) \in \mathcal{P} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} := I_{\Omega(\theta)}(\boldsymbol{x}), \tag{III.24}$$

où $I_{\Omega(\theta)}(\boldsymbol{x})$ est la fonction indicatrice classique du domaine spatial $\Omega(\theta)$. Les formes bilinéaire A et linéaire B peuvent alors être réécrites de la manière suivante :

$$A(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \int_\Theta \int_D \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})\, I_{\mathcal{P}}\, dx\, dP(\theta), \tag{III.25}$$

$$B(\boldsymbol{v}) = \int_\Theta \int_D \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{f}\, I_{\mathcal{P}}\, dx\, dP(\theta) + \int_\Theta \int_{\Gamma_2(\theta)} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}\, ds\, dP(\theta). \tag{III.26}$$

4.3 Définition classique des espaces d'approximation

Dans le cas où Γ_1 est déterministe, l'espace fonctionnel $\overline{\mathcal{W}}$ défini dans (III.22) retrouve une structure de produit tensoriel d'espaces :

$$\overline{\mathcal{W}} = L^2(\Theta, dP; \overline{\mathcal{V}}) \cong \overline{\mathcal{V}} \otimes L^2(\Theta, dP). \tag{III.27}$$

De plus, le fait que Γ_1 soit incluse dans un partie de la frontière ∂D du domaine fictif rend plus aisée la construction d'un espace d'approximation conforme pour $\overline{\mathcal{V}}$.

On introduit un maillage $\mathcal{T}_h$ du domaine D et on note $\{\boldsymbol{\varphi}_i\}_{i=1}^n$ une base d'approximation éléments finis associée dans $\overline{\mathcal{V}}$. L'espace d'approximation spatial peut donc s'écrire :

$$\overline{\mathcal{V}}_h = \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x}) v_i = \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})\mathbf{v},\ \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n\}. \tag{III.28}$$

Un espace d'approximation $\overline{\mathcal{W}}_h \subset \overline{\mathcal{W}}$ peut alors être défini de la manière suivante :

$$\overline{\mathcal{W}}_h = \overline{\mathcal{V}}_h \otimes \mathcal{S} = \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},\theta) = \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})\mathbf{v}(\theta),\ \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}\}. \tag{III.29}$$

Au niveau stochastique, on introduit un espace d'approximation classique $\mathcal{S}_P \subset \mathcal{S}$, avec $\mathcal{S}_P = span\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}_P}$, et on obtient ainsi un espace d'approximation $\overline{\mathcal{W}}_{h,P} \subset \overline{\mathcal{W}}$ défini par

$$\overline{\mathcal{W}}_{h,P} = \overline{\mathcal{V}}_h \otimes \mathcal{S}_P = \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},\theta) = \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})\mathbf{v}(\theta),\ \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P\}. \tag{III.30}$$

4.4 Approximation de Galerkin

L'approximation de Galerkin $\boldsymbol{u}_{h,P} \in \overline{\mathcal{W}}_{h,P}$ est définie par :

$$A(\boldsymbol{u}_{h,P}, \boldsymbol{v}_{h,P}) = B(\boldsymbol{v}_{h,P}) \quad \forall \boldsymbol{v}_{h,P} \in \overline{\mathcal{W}}_{h,P}, \tag{III.31}$$

4.4.1 Propriété d'optimalité de la solution

La forme A étant symétrique, continue et semi-coercive sur $\overline{\mathcal{W}}$, elle définit sur $\overline{\mathcal{W}}$ un semi-produit scalaire

$$\ll \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \gg_A = A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}). \tag{III.32}$$

et une semi-norme associée, notée $\|\cdot\|_A$. Si on note $\boldsymbol{u}$ une solution particulière du problème (III.23), l'approximation de Galerkin satisfait

$$\|\boldsymbol{u}_{h,P} - \boldsymbol{u}\|_A = \min_{\boldsymbol{v}_{h,P} \in \overline{\mathcal{W}}_{h,P}} \|\boldsymbol{v}_{h,P} - \boldsymbol{u}\|_A. \tag{III.33}$$

$\|\cdot\|_A$ n'étant qu'une semi-norme sur $\overline{\mathcal{W}}$, l'approximation de Galerkin n'est pas forcément définie de manière unique. Cependant, le noyau de cette norme étant l'ensemble des fonctions dont le support est inclus dans le complémentaire de $\mathcal{P}$, sa restriction à $\mathcal{W}$ est une norme. On peut donc interpréter (III.33) comme suit : la partie physique de l'approximation $\boldsymbol{u}_{h,P|\mathcal{P}}$ est la projection unique de la solution physique exacte $\boldsymbol{u}_{|\mathcal{P}}$ par rapport au produit scalaire induit par la restriction de $\ll, \gg_A$ à $\mathcal{W}$.

4.4.2 Système d'équations à résoudre

Le problème (III.31) se ramène au problème classique suivant :

$$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P, \quad E(\mathbf{v}^T\mathbf{A}\mathbf{u}) = E(\mathbf{v}^T\mathbf{b}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{III.34}$$

où $\mathbf{A}$ et $\mathbf{b}$ sont respectivement une matrice aléatoire et un vecteur aléatoire, dont les composantes sont définies par

$$(\mathbf{A}(\theta))_{ij} = \int_D \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_j) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_i)\ I_{\Omega(\theta)}\, dx \tag{III.35}$$

$$(\mathbf{b}(\theta))_i = \int_D \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{f}\ I_{\Omega(\theta)}\, dx + \int_{\Gamma_2(\theta)} \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \mathbf{F}\, ds \tag{III.36}$$

Les aspects calculs pour la résolution du problème (III.34) seront détaillés dans la section 6.

4.4.3 Question d'unicité de l'approximation

On a vu qu'il existait une infinité de solutions du problème initial dans $\overline{\mathcal{W}}$. L'approximation de Galerkin peut également ne pas être définie de manière unique, ce qui se traduit par un système d'équations (III.34) seulement semi-défini. C'est le cas si la base de fonctions $\boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x})H_\alpha(\theta)$ est dans le noyau à gauche de la forme bilinéaire A, qui on le rappelle est seulement semi-coercive sur $\overline{\mathcal{W}}$. Cela intervient si la mesure de l'intersection entre le support de la fonction de base et le domaine physique $\mathcal{P}$ est nulle, soit

$$\mu(supp(\boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x})H_\alpha(\theta)) \cap \mathcal{P}) = 0, \tag{III.37}$$

où $\mu = \lambda \otimes P$ est la mesure produit sur $D \times \Theta$, avec λ la mesure de Lebesgue sur D. Le support des fonctions de base est défini par

$$supp(\boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x})H_\alpha(\theta)) = closure(\{(\boldsymbol{x}, \theta) \in D \times \Theta; \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x})H_\alpha(\theta) \neq 0\}). \tag{III.38}$$

Les degrés de liberté $u_{i,\alpha}$ associés sont alors indéterminés. Cependant, comme ils ne contribuent qu'à la partie non-physique de la solution, ils peuvent être arbitrairement choisis sans perturber la solution physique obtenue. En pratique, ces degrés de liberté indéterminés seront facilement détectés dans la procédure de résolution car ils correspondent à des termes diagonaux nuls dans le système (III.34), *i.e.* $E((\mathbf{A})_{ii}H_\alpha H_\alpha) = 0$. Dans le cas particulier où $supp(H_\alpha) = \Theta$, ce qui est le cas avec des bases d'approximation spectrales au niveau stochastique, la condition (III.37) est équivalente à $P(\{\lambda(supp(\boldsymbol{\varphi}_i) \cap \Omega) = 0\}) = 1$. Cela apparaît si le sous-ensemble d'éléments de $\mathcal{T}_h$ composant $supp(\boldsymbol{\varphi}_i)$ est presque sûrement hors du domaine aléatoire Ω. Les éléments presque sûrement hors du domaine étant automatiquement détectés durant la procédure de résolution décrite dans la section 6, le repérage des degrés de liberté indéterminés est donc immédiat. On notera finalement que si $supp(H_\alpha) = \Theta$ et si tous les éléments dans $\mathcal{T}_h$ ont une probabilité non nulle d'intersecter le domaine Ω, le système (III.34) est défini et l'approximation de Galerkin est unique.

4.5 Autres méthodes de projection

4.5.1 Méthode de projection L^2 au niveau stochastique

Une autre manière de définir une approximation $\boldsymbol{u}_{h,P} \in \overline{\mathcal{W}}_{h,P}$ est d'utiliser une méthode de projection L^2 au niveau stochastique, afin de pouvoir utiliser un code déterministe classique. Notons $\boldsymbol{u}_h$ la solution du problème semi-discrétisé :

$$\boldsymbol{u}_h \in \overline{\mathcal{W}}_h, \quad A(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h) = L(\boldsymbol{v}_h) \quad \forall \boldsymbol{v}_h \in \overline{\mathcal{W}}_h. \tag{III.39}$$

En notant $\boldsymbol{u}_h = \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})\mathbf{u}(\theta)$, le vecteur aléatoire $\mathbf{u}(\theta)$ est une solution faible du système d'équations

$$\mathbf{A}(\theta)\mathbf{u}(\theta) = \mathbf{b}(\theta), \tag{III.40}$$

où la matrice $\mathbf{A}$ et le vecteur $\mathbf{b}$ sont définis respectivement par les équations (III.35) et (III.36). Pour un événement élémentaire donné $\theta \in \Theta$, l'équation (III.40) correspond à un calcul déterministe classique dans le cadre de la méthode X-FEM (voire de la Fictitious Domain Method). $\mathbf{A}(\theta)$ peut n'être que semi-définie positive. Une manière naturelle de définir une pseudo-inverse $\mathbf{A}(\theta)^+$ de $\mathbf{A}(\theta)$ consiste à mettre à zéro les degrés de liberté indéterminés. Ces degrés de liberté sont associés aux fonctions de base $\boldsymbol{\varphi}_i$ dont le support est tel que $\lambda(supp(\boldsymbol{\varphi}_i) \cap \Omega(\theta)) = 0$, c'est-à-dire les fonctions telles qu'aucun des éléments finis composant leur support n'intersecte le domaine $\Omega(\theta)$. Une méthode de projection L^2 classique consiste alors à projeter $\mathbf{u}$ sur $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ par rapport au produit scalaire naturel de $L^2(\Theta, dP; \mathbb{R}^n)$. Les coefficients de la décomposition $\mathbf{u}(\theta) = \sum_{\alpha \in \mathcal{J}_P} \mathbf{u}_\alpha H_\alpha(\theta)$ sont alors obtenus par une intégration stochastique adaptée [2] :

$$\mathbf{u}_\alpha = < H_\alpha, \mathbf{u} >_{L^2(\Theta, dP)} = E(H_\alpha \mathbf{u}) \approx \sum_k \omega_k H_\alpha(\theta_k)\mathbf{A}^+(\theta_k)\mathbf{b}(\theta_k). \tag{III.41}$$

[2] L'expression (III.41) suppose que les fonctions H_α sont orthonormées dans $L^2(\Theta, dP)$.

Au niveau continu, cela revient à définir $\boldsymbol{u}_{h,P}$ comme la projection de $\boldsymbol{u}_h \in \overline{\mathcal{W}}_h$ sur $\overline{\mathcal{W}}_{h,P}$ au sens suivant :

$$\|\boldsymbol{u}_{h,P} - \boldsymbol{u}_h\|_{L^2(D\times\Theta,d\mu)} = \min_{\boldsymbol{v}_{h,P}\in\overline{\mathcal{W}}_{h,P}} \|\boldsymbol{v}_{h,P} - \boldsymbol{u}_h\|_{L^2(D\times\Theta,d\mu)}, \tag{III.42}$$

où $\mu = \lambda \otimes P$ est la mesure produit sur $D \times \Theta$, et

$$\|\boldsymbol{v}\|^2_{L^2(D\times\Theta,d\mu)} = \int_\Theta \int_D \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},\theta)\cdot\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},\theta)dx\, dP(\theta). \tag{III.43}$$

Les exemples numériques montrent qu'une telle définition de l'approximation conduit à des résultats d'une qualité nettement inférieure à l'approche de Galerkin. En fait, des erreurs importantes sont faites sur les éléments finis $K \in \mathcal{T}_h$ qui ont une probabilité non nulle et strictement inférieure à 1 d'intersecter le domaine physique, *i.e.* $0 < P(\{\lambda(K \cap \Omega(\theta)) = 0\}) < 1$.

4.5.2 Comment définir une bonne méthode de projection L^2 ?

L'inconvénient de la projection L^2 présentée ci-dessus est qu'elle donne un poids à la partie non physique de la solution, qui en pratique est obtenue par un prolongement à zéro artificiel de la solution physique. Une approche de projection L^2 classique souffre alors du manque de régularité au niveau stochastique de la solution ainsi prolongée. L'utilisation de bases d'approximation stochastiques classiques (polynômiales) conduira alors à de mauvaises propriétés de convergence de l'approximation. De plus, l'obtention des projections nécessitera une intégration stochastique précise et adaptée aux irrégularités de la solution semi-discrète $\boldsymbol{u}_h$.

En fait, une "bonne" méthode de projection L^2 devrait être basée sur l'utilisation d'une norme physique, comme pour l'approche de Galerkin. Par exemple, on pourrait définir la solution approchée de la manière suivante :

$$\|\boldsymbol{u}_{h,P} - \boldsymbol{u}_h\|_{L^2(\mathcal{P},d\mu)} = \min_{\boldsymbol{v}_{h,P}\in\overline{\mathcal{W}}_{h,P}} \|\boldsymbol{v}_{h,P} - \boldsymbol{u}_h\|_{L^2(\mathcal{P},d\mu)}, \tag{III.44}$$

où $\boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x},\theta) = \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})\mathbf{u}(\theta)$ est la solution du problème semi-discret (III.39) et où la norme $\|\cdot\|_{L^2(\mathcal{P},d\mu)}$ est la norme L^2 classique sur la restriction des fonctions au domaine physique $\mathcal{P}$. Cela conduit à la résolution du problème suivant :

$$\int_\Theta \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{v}_{h,P}\cdot\boldsymbol{u}_{h,P}\, dx\, dP(\theta) = \int_\Theta \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{v}_{h,P}\cdot\boldsymbol{u}_h\, dx\, dP(\theta). \tag{III.45}$$

Le problème (III.45) est équivalent au système d'équations suivant :

$$\sum_{\alpha\in\mathcal{J}_P} E(H_\beta \mathbf{M} H_\alpha)\mathbf{u}_\alpha = E(H_\beta \mathbf{M}\mathbf{u}) \quad \forall\beta\in\mathcal{J}_P, \tag{III.46}$$

où $\mathbf{M} : \Theta \to \mathbb{R}^{n\times n}$ est une matrice de masse géométrique aléatoire, dont les coefficients sont définis par

$$(\mathbf{M}(\theta))_{ij} = \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{\varphi}_j(\boldsymbol{x})\, dx = \int_D \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{\varphi}_j(\boldsymbol{x})\, I_{\mathcal{P}}(\boldsymbol{x},\theta)\, dx. \tag{III.47}$$

Une bonne méthode de projection, basée sur une norme physique, conduit donc à la résolution d'un problème similaire au problème (III.34) définissant l'approximation de Galerkin. Cette bonne méthode de projection L^2 conduit donc aux mêmes difficultés techniques que l'approche de Galerkin. La non-intrusivité d'une approche de projection classique est donc clairement perdue.

4.6 Traitement des conditions de Dirichlet

Jusqu'ici, nous avons considéré le cas où la frontière Γ_1 de type Dirichlet était une partie déterministe de la frontière du domaine fictif. Dans le cas où $\Gamma_1(\theta)$ est aléatoire, $\overline{\mathcal{W}}$ n'a plus une structure de produit tensoriel. L'application des méthodes éléments finis stochastiques standards nécessitent donc une nouvelle reformulation du problème. On présente des démarches possibles permettant de prendre en compte de telles conditions.

4.6.1 Multiplicateur de Lagrange sur la frontière

On peut introduire un multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{p}$ défini sur la frontière afin d'imposer les conditions de Dirichlet au sens faible [8]. On introduit les espaces fonctionnels suivants :

$$\widetilde{\mathcal{W}} = L^2(\Theta, dP; (H^1(D))^d) \cong (H^1(D))^d \otimes L^2(\Theta, dP) \tag{III.48}$$

$$\mathcal{Q} = \{\boldsymbol{p} : \theta \in \Theta \mapsto \boldsymbol{p}(\cdot, \theta) \in H^{-1/2}(\Gamma_1(\theta)); \int_\Theta \|\boldsymbol{p}(\cdot, \theta)\|^2_{H^{-1/2}(\Gamma_1(\theta))}\, dP(\theta) < \infty\}. \tag{III.49}$$

Le problème peut alors être réécrit sous la forme d'un problème mixte : trouver $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{p}) \in \widetilde{\mathcal{W}} \times \mathcal{Q}$ tel que $\forall (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{q}) \in \widetilde{\mathcal{W}} \times \mathcal{Q}$,

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) + C(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{v}) = B(\boldsymbol{v}), \tag{III.50}$$

$$C(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{u}) = 0, \tag{III.51}$$

où

$$C(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{u}) = \int_\Theta \int_{\Gamma_1(\theta)} \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{u}\, ds\, dP(\theta) \tag{III.52}$$

Construction des espaces d'approximation

La construction de l'espace d'approximation $\widetilde{\mathcal{W}}_{h,P}$ pour $\boldsymbol{u}$ devient classique puisque $\widetilde{\mathcal{W}} = (H^1(D))^d \otimes \mathcal{S}$. Par contre, un soin particulier doit être apporté au choix d'un espace d'approximation $\mathcal{Q}_{h',P} \subset \mathcal{Q}$, afin de vérifier les conditions inf-sup discrètes, ou conditions LBB [27]. Cette condition demande l'existence d'une constante $\beta > 0$ indépendante de h, h' et P et telle que

$$\underset{\boldsymbol{q} \in \mathcal{Q}_{h',P}}{inf} \quad \underset{\boldsymbol{v} \in \widetilde{\mathcal{W}}_{h,P}}{sup} \frac{C(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{v})}{\|\boldsymbol{q}\|_{\mathcal{Q}} \|\boldsymbol{v}\|_{\widetilde{\mathcal{W}}}} \geqslant \beta \tag{III.53}$$

Une idée, utilisée dans [31], consiste à introduire un mapping aléatoire $\gamma(\theta)$ qui à une frontière déterministe Γ_1^0 associe la frontière $\Gamma_1(\theta)$. Pour $\boldsymbol{v} \in (H^{1/2}(\Gamma_1))^d$, notons $\boldsymbol{v}^0 = \boldsymbol{v} \circ \gamma^{-1} \in (H^{1/2}(\Gamma_1^0))^d$. On introduit la forme bilinéaire

$$C_0(\boldsymbol{q}^0, \boldsymbol{v}^0) = \int_\Theta \int_{\Gamma_1^0} \boldsymbol{q}^0 \cdot \boldsymbol{v}^0\, ds\, dP$$

On associe à $\boldsymbol{p} \in H^{-1/2}(\Gamma_1)$ un élément $\boldsymbol{p}^0$ de $(H^{-1/2}(\Gamma_1^0))^d$ défini par

$$C_0(\boldsymbol{p}^0, \boldsymbol{v}^0) = C(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{v}) \quad \forall \boldsymbol{v}^0 \in (H^{1/2}(\Gamma_1^0))^d$$

On peut alors introduire une approximation éléments finis sur Γ_1^0 en utilisant un maillage fixe de la frontière. Cela conduit à la définition d'un espace d'approximation classique $\mathcal{Q}^0_{h',P} \subset (H^{-1/2}(\Gamma_1^0))^d \otimes \mathcal{S}$. L'espace d'approximation $\mathcal{Q}_{h',P}$ peut alors être défini par

$$\mathcal{Q}_{h',P} = \{\boldsymbol{p} \in \mathcal{Q}; \quad \boldsymbol{p}^0 \in \mathcal{Q}^0_{h',P}\}$$

Remarque III.4

Dans [31], une formulation différente est utilisée. Les auteurs considèrent le cas où $\Gamma_1(\theta) = \partial\Omega(\theta)$. La forme bilinéaire A est remplacée par la forme suivante

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \int_\Theta \int_D \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})\, dx$$

où l'intégrale spatiale est prolongée au domaine D tout entier et l'espace de travail $\widetilde{W} = (H_0^1(D))^d \otimes \mathcal{S}$. L'intérêt est que la forme bilinéaire $A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = E(a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}))$, où a est une forme bilinéaire déterministe sur $(H_0^1(D))^d$.

Remarque III.5

Dans le cas où Γ_1 est déterministe et immergée dans le domaine D, $\mathcal{Q} \cong H^{-1/2}(\Gamma_1) \otimes \mathcal{S}$ a une structure produit tensoriel. La construction d'espaces d'approximation peut donc être menée indépendamment au niveau spatial et stochastique. On peut alors tirer partie des travaux réalisés dans le cadre déterministe pour la construction d'approximations éléments finis de $(H^1(D))^d$ et $(H^{-1/2}(\Gamma_1))^d$ vérifiant la condition LBB [65, 113, 54]. Notamment, dans le cadre déterministe 2D, avec une approximation éléments finis P^1 de $H_1(\Omega)$ sur un maillage de triangle et une approximation éléments finis P^0 de $H^{-1/2}(\Gamma_1)$, la condition LBB est vérifiée si $3 \leqslant h'/h \leqslant L$ où L est une constante, h et h' étant les tailles caractéristiques des maillages du domaine et de l'interface.

Définition de l'approximation de Galerkin

L'approximation de Galerkin est obtenue en injectant les espaces d'approximation dans la formulation mixte (III.50)-(III.51). En identifiant $\mathcal{W}_{h,P} \cong \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ et $\mathcal{Q}_{h',P} \cong \mathbb{R}^{n'} \otimes \mathcal{S}_P$, on peut alors définir l'approximation de Galerkin du problème mixte par la résolution du système d'équations suivant : trouver $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ et $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{n'} \otimes \mathcal{S}_P$ tel que

$$E(\mathbf{v}^T\mathbf{A}\mathbf{u}) + E(\mathbf{v}^T\mathbf{C}\mathbf{p}) = E(\mathbf{v}^T\mathbf{b}) \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{III.54}$$

$$E(\mathbf{q}^T\mathbf{C}^T\mathbf{u}) = 0 \quad \forall \mathbf{q} \in \mathbb{R}^{n'} \otimes \mathcal{S}_P \tag{III.55}$$

Remarque III.6

Dans [31], l'approximation $\mathcal{S}_P$ correspond à une interpolation de Lagrange sur des points de quadrature de Gauss stochastiques (voir section 3.2.3 du chapitre I). En notant $\{\theta_k, \omega_k\}$ les points et poids de quadrature, les auteurs utilisent alors l'expression approchée de la forme bilinéaire C :

$$C(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{u}) = E(\mathbf{v}^T\mathbf{C}\mathbf{p}) \approx \sum_k \omega_k \mathbf{v}(\theta_k)^T\mathbf{C}(\theta_k)\mathbf{p}(\theta_k) \tag{III.56}$$

Etant donnée la forme choisie pour A (voir remarque III.4), la matrice $\mathbf{A}$ est déterministe. On montre alors aisément que grâce à l'approximation (III.56), le système (III.54)-(III.55) se ramène à un ensemble de problèmes déterministes découplés (voir remarque I.12) :

$$\mathbf{A}\mathbf{u}(\theta_k) + \mathbf{C}(\theta_k)\mathbf{p}(\theta_k) = \mathbf{b}(\theta_k) \tag{III.57}$$

$$\mathbf{C}(\theta_k)^T\mathbf{u}(\theta_k) = 0 \tag{III.58}$$

qui sont des problèmes classiques obtenus dans le cadre de la Fictitious Domain Method déterministe. On notera que l'impact de l'approximation (III.56) sur la prise en compte des conditions aux limites n'est pas clairement étudié.

4.6.2 Alternatives à explorer

Le problème des approches précédentes réside dans la construction des espaces de multiplicateurs définis sur la frontière, qui nécessite la définition d'un mapping aléatoire. Une autre idée consiste à reformuler le problème à l'aide d'un multiplicateur distribué sur le domaine, avec $\mathcal{Q} \subset L^2(D) \otimes \mathcal{S}$, tout en gardant la même formulation (III.50)-(III.51) (même expression des formes bilinéaires). On obtient ainsi des espaces de travail ayant une structure de produit tensoriel à la fois pour le champ de déplacement et le multiplicateur. On pourra par exemple envisager une approximation éléments finis P^1 pour le déplacement et P^0 pour le multiplicateur, ces approximations étant définies sur des maillages différents (éventuellement imbriqués). Une étude mathématique plus précise de ce problème et des choix des espaces d'approximation éléments finis devra être menée (conditions sur les maillages pour garantir la condition LBB, ...). On notera que dans le cadre déterministe, d'autres types de reformulation ont été introduites avec des multiplicateurs distribués sur le domaine [66].
Finalement, afin d'éviter l'utilisation de multiplicateur de Lagrange, d'autres alternatives pour prendre en compte les conditions de Dirichlet peuvent être envisagées : méthode de pénalité [9], méthode de Nitsche [118]. Ces différentes approches restent à explorer.

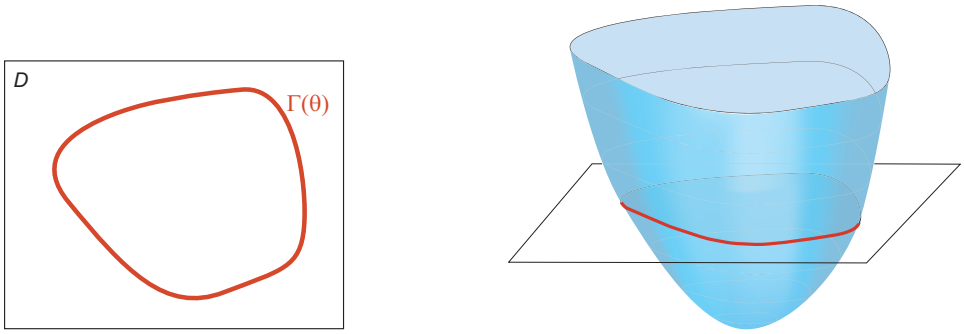
5 Représentation de la géométrie à l'aide de fonctions de level-sets

Après la reformulation du problème définie dans le paragraphe précédent, on présente ici un des ingrédients principaux de la méthode X-SFEM : la représentation de la géométrie aléatoire à l'aide de fonctions level-sets [128, 148]. Les avantages de ce type de représentation sont nombreux : représentation numérique simple d'une géométrie, représentation de formes complexes (changement possible de topologie), obtention aisée de grandeurs géométriques (mesures de volumes et surfaces, courbure, ...).

5.1 Level-sets aléatoires

La géométrie peut être représentée de manière implicite en utilisant la technique des level-sets [148]. Cette technique consiste à représenter une hyper-surface contenue dans un domaine $D \in \mathbb{R}^d$ (surface pour $d = 3$, courbe pour $d = 2$) par l'iso-zéro d'une fonction ϕ, appelée fonction level-set. Une hyper-surface aléatoire $\Gamma(\theta)$ pourra donc naturellement être représentée à l'aide d'un fonction level-set aléatoire $\phi(\boldsymbol{x}, \theta)$ telle que

$$\Gamma(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) = 0\}. \tag{III.59}$$



(a) Courbe $\Gamma(\theta) \subset D$ (b) Fonction $\phi(\cdot, \theta)$

FIG. III.3 – Level-set aléatoire $\phi(\boldsymbol{x}, \theta)$ dont l'iso-zéro représente une courbe $\Gamma(\theta)$ incluse dans D

La level-set est généralement (mais pas nécessairement) prise comme la fonction distance signée à l'hyper-surface : $\phi(\boldsymbol{x}, \theta) = \pm dist(\boldsymbol{x}, \Gamma(\theta))$. Cette fonction distance a des propriétés intéressantes : bonne régularité, obtention aisée de grandeurs géométriques caractéristiques. Par exemple, sur Γ, le gradient de ϕ par rapport à $\boldsymbol{x}$ est le vecteur normal unitaire. La mesure de dirac $\delta_{\Gamma(\theta)}$ sur $\Gamma(\theta)$ peut être caractérisée à l'aide de ϕ : $\delta_{\Gamma(\theta)}(\boldsymbol{x}) = \delta(\phi(\boldsymbol{x}, \theta))$, où δ est la fonction Dirac usuelle.

5.2 Description de domaines et interfaces aléatoires

Dans les cas où Γ est fermée dans D, *i.e.* $\partial\Gamma = \emptyset$ (figure III.4(a)) ou si $\partial\Gamma \in \partial D$ (figure III.4(b)), la fonction level-set permet de caractériser un domaine aléatoire. En effet, dans ces deux cas, la fonction ϕ permet de partitionner D en deux domaines aléatoires complémentaires, correspondant aux domaines de D où la fonction est négative ou positive. Dans le cas où on cherche à décrire un domaine aléatoire $\Omega(\theta)$, on pourra choisir par convention :

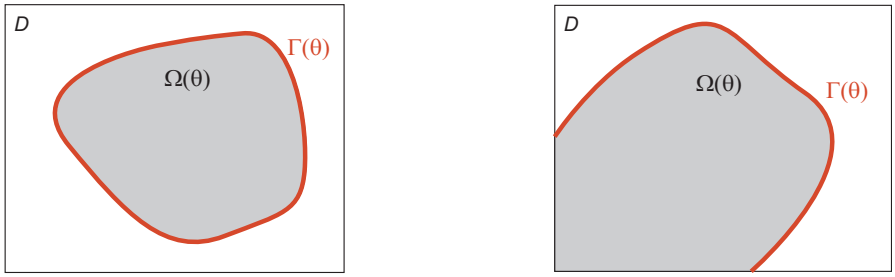
$$\Omega(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) < 0\} \tag{III.60}$$

On notera que la fonction indicatrice d'un tel domaine s'exprime simplement :

$$I_{\Omega(\theta)}(\boldsymbol{x}) = \mathcal{H}(-\phi(\boldsymbol{x}, \theta)) \tag{III.61}$$

où $\mathcal{H} : \mathbb{R} \to \{0, 1\}$ est la fonction heaviside définie par

$$\mathcal{H}(y) = \begin{cases} 1 & if\ y > 0 \\ 0 & if\ y \leqslant 0 \end{cases} \tag{III.62}$$

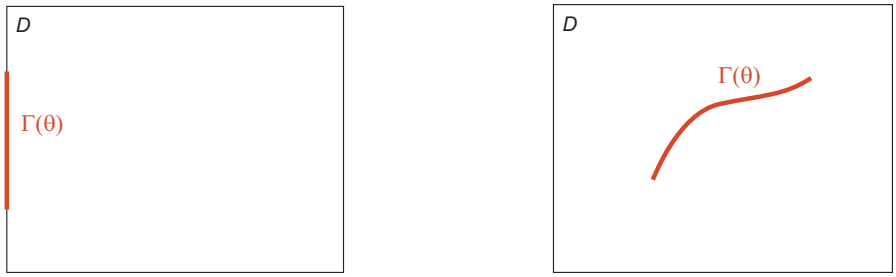


(a) $\partial\Gamma = \emptyset$ (b) $\partial\Gamma \subset \partial D$

FIG. III.4 – Cas d'hyper-surfaces représentables par une fonction level-set.

On peut également s'intéresser à la représentation d'une partie aléatoire de la frontière de D (figure III.5(a)), notamment pour l'application de conditions aux limites particulières. Dans ce cas, cette partie de la frontière peut être caractérisée par la restriction d'une level-set à la frontière de D :

$$\Gamma(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in \partial D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) < 0\}$$



(a) $\Gamma \subset \partial D$ (b) $\Gamma \subset D$, $\partial\Gamma \neq \emptyset$

FIG. III.5 – Autres cas d'hyper-surfaces.

Enfin, on pourra également s'intéresser à la description d'une hyper-surface Γ ouverte dans D (figure III.5(b)). Elle peut représenter une partie de la frontière d'un domaine aléatoire inclus dans D ou encore une fissure aléatoire dans un calcul de structure. Dans ce cas, une fonction level-set auxiliaire sera introduite. La première fonction ϕ permettra de caractériser le support de Γ et la seconde fonction $\widetilde{\phi}$ permettra de définir Γ sur ce support :

$$\Gamma(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) = 0; \widetilde{\phi}(\boldsymbol{x}, \theta) < 0\}$$

5.3 Construction des level-sets

Pour certaines formes particulières (cercles, hyper-sphères, hyper-plans, ellipsoides, polygones, ...), une expression explicite des fonctions level-sets peut être utilisée [161]. En considérant les paramètres décrivant ces formes comme des variables aléatoires, on définit alors simplement les level-sets aléatoires associées.

Dans le cadre de la technique des level-sets, une manière simple de construire des formes complexes consiste à utiliser des opérations booléennes classiques sur des domaines de base[3]. Supposons que Ω_1 et Ω_2 soient deux domaines, caractérisés respectivement par deux level-sets aléatoires ϕ_1 et ϕ_2, sur lesquels on effectue des opérations booléennes de base pour obtenir un domaine Ω. La level-set ϕ caractérisant Ω peut alors être obtenue par de simples opérations algébriques sur les level-sets :

- union : $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$,

$$\phi(\boldsymbol{x}, \theta) = min\{\phi_1(\boldsymbol{x}, \theta), \phi_2(\boldsymbol{x}, \theta)\} \tag{III.63}$$

[3]Opérations classiques sur les domaines en CAO (Conception Assistée par Ordinateur) pour la définition d'une géométrie

- intersection : $\Omega = \Omega_1 \cap \Omega_2$,

$$\phi(\boldsymbol{x}, \theta) = max\{\phi_1(\boldsymbol{x}, \theta), \phi_2(\boldsymbol{x}, \theta)\} \tag{III.64}$$

- complément : $\Omega = \Omega_1^c$,

$$\phi(\boldsymbol{x}, \theta) = -\phi_1(\boldsymbol{x}, \theta) \tag{III.65}$$

Dans ce chapitre, nous considérons que les level-sets sont obtenues par ce type de technique. La question de l'identification de ces level-sets aléatoires à partir d'expériences sera abordée dans le chapitre IV.

5.4 Discrétisation des level-sets

En pratique, les fonctions level-sets sont discrétisées au niveau spatial en introduisant un maillage éléments finis du domaine D. En notant $\{\varphi_i(\boldsymbol{x})\}_{i\in I}$ l'ensemble des fonctions d'interpolation associées aux noeuds $\{\boldsymbol{x}_i\}_{i\in I}$ du maillage, on introduit l'approximation suivante de la level-set :

$$\phi(\boldsymbol{x}, \theta) = \sum_{i\in I} \varphi_i(\boldsymbol{x})\phi_i(\theta),$$

où les $\phi_i(\theta)$ sont des variables aléatoires correspondant aux valeurs nodales de la level-set aléatoire. L'utilisation d'une interpolation linéaire pour la level-set entraîne donc une approximation linéaire par morceaux de la géométrie.

Remarque III.7

> *Le maillage utilisé pour la représentation de la level-set (donc de la géométrie) peut être différent de celui utilisé pour l'approximation de la solution d'un problème physique. Cependant, dans le cadre de la méthode X-SFEM proposée, l'utilisation d'un même maillage simplifie les aspects calculs.*

L'incertitude sur la géométrie est donc complètement caractérisée par les valeurs nodales de la level-set. Après une étape de modélisation probabiliste (voir section 2.4 et chapitre IV), la level-set sera exprimée en fonction d'un vecteur de variables aléatoires $\boldsymbol{\xi}$. Ces variables aléatoires peuvent être simplement les paramètres d'une level-set analytique ou encore les variables aléatoires de base (ou germe) d'une décomposition de la level-set sur une base de fonctions stochastiques $H_\alpha(\boldsymbol{\xi}(\theta))$:

$$\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}(\theta)) = \sum_{i\in I}\sum_{\alpha} \varphi_i(\boldsymbol{x}) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}(\theta))\phi_{i,\alpha}. \tag{III.66}$$

Dans ce dernier cas, la géométrie aléatoire sera complètement déterminée par la donnée des coefficients $\phi_{i,\alpha}$ de la décomposition. Cette représentation explicite de la level-set permet donc une évaluation rapide des réalisations de la level-set et donc des réalisations associées de la géométrie.

5.5 Intégration

Les intégrales sur des domaines ou interfaces représentées par des level-sets aléatoires peuvent s'exprimer de la manière suivante :

$$\Omega(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) < 0\}, \qquad \int_{\Omega(\theta)} f(\boldsymbol{x})dx = \int_D f(\boldsymbol{x})\mathcal{H}(-\phi(\boldsymbol{x}, \theta))dx$$

$$\Gamma(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) = 0\}, \qquad \int_{\Gamma(\theta)} f(\boldsymbol{x}(s))ds = \int_D f(\boldsymbol{x})\delta(\phi(\boldsymbol{x}, \theta))ds$$

$$\Gamma(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in \partial D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) < 0\}, \qquad \int_{\Gamma(\theta)} f(\boldsymbol{x}(s))ds = \int_{\partial D} f(\boldsymbol{x}(s))\mathcal{H}(-\phi(\boldsymbol{x}(s), \theta))ds$$

$$\Gamma(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) = 0, \widetilde{\phi}(\boldsymbol{x}, \theta) < 0\}, \qquad \int_{\Gamma(\theta)} f(\boldsymbol{x}(s))ds = \int_D f(\boldsymbol{x})\delta(\phi(\boldsymbol{x}, \theta))\mathcal{H}(-\widetilde{\phi}(\boldsymbol{x}, \theta))dx$$

En pratique, lorsque les level-sets sont interpolées sur un maillage éléments finis, ces intégrales sont calculées de manière classique par des méthodes de quadrature adaptées sur les éléments du maillage. Des quadratures exactes peuvent même être définies en opérant des subdivisions des éléments finis.

6 Résolution numérique de problèmes définis sur des domaines aléatoires

On s'intéresse dans ce paragraphe à la mise en oeuvre de la méthode X-SFEM pour la résolution de problèmes définis sur un domaine aléatoire. On se concentre ici sur les aspects numériques pour la construction de l'approximation de Galerkin, définie par le problème (III.31). On considère que le contenu probabiliste du problème peut être représenté par un ensemble de variables aléatoires $\boldsymbol{\xi}$ et on notera $(\Xi, \mathcal{B}_\Xi, P_{\boldsymbol{\xi}})$ l'espace de probabilité associé. Toutes les quantités aléatoires seront exprimées en fonction de $\boldsymbol{\xi}$ (voir section 2.4).

6.1 Vision globale de la procédure de résolution

La recherche de l'approximation de Galerkin $\boldsymbol{u}_{h,P} \in \overline{\mathcal{W}}_{h,P}$, définie par le problème (III.31), se ramène à la recherche d'un vecteur aléatoire $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, solution du système (III.34), et dont le développement sur la base stochastique s'écrit

$$\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_P} \mathbf{u}_\alpha H_\alpha(\boldsymbol{\xi})$$

L'ensemble des coefficients de cette décomposition est donc solution du système d'équations :

$$\sum_{\alpha \in \mathcal{I}_P} E(\mathbf{A} H_\beta H_\alpha)\mathbf{u}_\alpha = E(\mathbf{b} H_\beta) \quad \forall \beta \in \mathcal{I}_P. \tag{III.67}$$

où $\mathbf{A}$ et $\mathbf{b}$ sont définis par les équations (III.35) et (III.36). Une première étape consiste à décomposer ces quantités sur la base de fonctions orthonormales $\{H_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{I}}$ de $\mathcal{S} = L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$.

$$\mathbf{A} = \sum_{\gamma \in \mathcal{I}_A} \mathbf{A}_\gamma H_\gamma, \quad \mathbf{A}_\gamma = E(\mathbf{A} H_\gamma), \tag{III.68}$$

$$\mathbf{b} = \sum_{\gamma \in \mathcal{I}_b} \mathbf{b}_\gamma H_\gamma, \quad \mathbf{b}_\gamma = E(\mathbf{b} H_\gamma). \tag{III.69}$$

D'après les propriétés d'orthonormalité des fonctions de base, les coefficients de la décomposition de $\mathbf{b}$ conduisent directement aux termes du second membre du système (III.67). Les coefficients doivent donc être calculés pour les indices $\mathcal{I}_b = \mathcal{I}_P$. Les matrices intervenant dans le premier membre du système (III.67) peuvent être écrites

$$E(\mathbf{A} H_\alpha H_\beta) = \sum_{\gamma \in \mathcal{I}_A} \mathbf{A}_\gamma E(H_\gamma H_\alpha H_\beta). \tag{III.70}$$

Quand on utilise des fonctions de base H_α polynômiales (éventuellement polynômiales par morceaux), si $\mathcal{I}_P$ correspond à des polynômes de degré au plus p, les coefficients $\mathbf{A}_\gamma$ peuvent n'être calculés que pour l'ensemble d'indices $\mathcal{I}_A$ correspondant aux polynômes de degré au plus $2p$. En effet, $E(H_\gamma H_\beta H_\alpha) = 0$ pour $\gamma \in (\mathcal{I} \backslash \mathcal{I}_A)$. Le calcul des $E(H_\gamma H_\alpha H_\beta)$ est classique dans le cadre des méthodes de Galerkin stochastique (voir chapitre I). De même, le système (III.67) peut être résolu par les techniques décrites dans le chapitre I (section 4.4), voire par la nouvelle approche proposée dans le chapitre II.

6.2 Calcul des décompositions des matrices et vecteurs aléatoires

Dans la procédure générale décrite précédemment, la seule étape qu'il reste à détailler concerne le calcul des décompositions (III.68) et (III.69) de la matrice et du vecteur aléatoire. Afin de simplifier l'exposé, on se restreint ici au cas où les propriétés matérielles (le tenseur $\boldsymbol{C}$) et les termes sources (efforts $\boldsymbol{f}$ et $\boldsymbol{F}$) sont déterministes. On supposera également que le domaine et la partie Γ_2 de la frontière peuvent être caractérisés par la seule donnée d'une fonction level-set aléatoire ϕ :

$$\Omega(\boldsymbol{\xi}) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) < 0\} \tag{III.71}$$

$$\Gamma_2(\boldsymbol{\xi}) = \{\boldsymbol{x} \in D; \phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) = 0\} \cup \{\boldsymbol{x} \in \partial_2 D; \phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) < 0\} \tag{III.72}$$

où $\partial_2 D$ est une partie déterministe de la frontière ∂D.

6.2.1 Décomposition de matrices et vecteurs élémentaires

La matrice et le vecteur éléments finis sont obtenus à partir de contributions élémentaires :

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{K\in\mathcal{T}_h} \mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi}), \quad \mathbf{b}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{K\in\mathcal{T}_h} \mathbf{b}_K(\boldsymbol{\xi}), \tag{III.73}$$

où les composantes des matrices et vecteurs élémentaires sont définies par

$$(\mathbf{A}_K)_{ij} = \int_K \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_j) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_i)\, \mathcal{H}(-\phi)\, dx, \tag{III.74}$$

$$(\mathbf{b}_K)_i = \int_K \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{f}\, \mathcal{H}(-\phi)\, dx + \int_{\partial K\cap\partial_2 D} \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{F}\, \mathcal{H}(-\phi)\, ds + \int_K \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{F}\, \delta(\phi)\, dx. \tag{III.75}$$

Les décompositions stochastiques (III.68) et (III.69) peuvent donc être opérées élément par élément. On doit donc calculer les coefficients $\{\mathbf{A}_{K,\gamma}\}_{\gamma\in\mathcal{I}_A}$ et $\{\mathbf{b}_{K,\gamma}\}_{\gamma\in\mathcal{I}_b}$, définis par

$$\mathbf{A}_{K,\gamma} = E(\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})H_\gamma(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} \mathbf{A}_K(\mathbf{y})H_\gamma(\mathbf{y})\, dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}), \tag{III.76}$$

$$\mathbf{b}_{K,\gamma} = E(\mathbf{b}_K(\boldsymbol{\xi})H_\gamma(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} \mathbf{b}_K(\mathbf{y})H_\gamma(\mathbf{y})\, dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}). \tag{III.77}$$

Ces coefficients peuvent être obtenus par une intégration numérique adaptée sur $\boldsymbol{\Xi}$ par rapport à la mesure $dP_{\boldsymbol{\xi}}$. Notons $Q_K = \{(\boldsymbol{\xi},\omega)\}$ une règle de quadrature, où les $\boldsymbol{\xi}$ et les ω désignent respectivement les points et poids d'intégration (voir section 2.1 du chapitre I). Cette règle de quadrature permet d'estimer une intégrale sur $\boldsymbol{\Xi}$:

$$E(f(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} f(\mathbf{y})dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}) \approx \sum_{(\boldsymbol{\xi},\omega)\in Q_K} \omega f(\boldsymbol{\xi}). \tag{III.78}$$

Le calcul des coefficients de la décomposition nécessite donc le calcul de quantités élémentaires $\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})$ et $\mathbf{b}_K(\boldsymbol{\xi})$ pour des réalisations $\boldsymbol{\xi}$, correspondant à des réalisations données $\phi(\cdot,\boldsymbol{\xi})$ de la level-set aléatoire. Ces calculs élémentaires sont classiques dans le cadre de la méthode X-FEM déterministe [115, 161]. Si l'élément est coupé par l'iso-zéro de la level-set $\phi(\cdot,\boldsymbol{\xi})$, une subdivision de l'élément et de ses côtés, illustrée sur la figure III.6, permet de définir une quadrature spatiale sur $K\cap\Omega(\boldsymbol{\xi})$, $\partial K\cap\Gamma_2(\boldsymbol{\xi})$ et $K\cap\Gamma_2(\boldsymbol{\xi})$, conduisant à un calcul exact de $\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})$ et $\mathbf{b}_K(\boldsymbol{\xi})$.

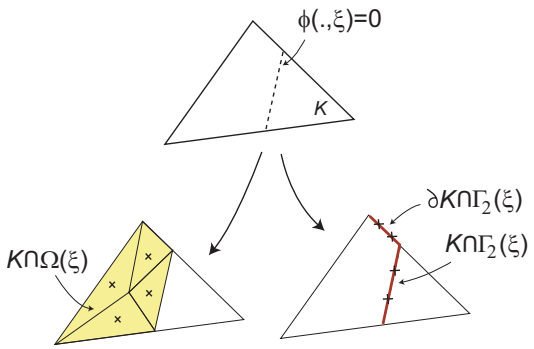


FIG. III.6 – Pour une réalisation donnée $\phi(\cdot,\boldsymbol{\xi})$ de la level-set, subdivision d'un élément fini triangulaire K et de ses côtés pour une intégration numérique sur $K\cap\Omega(\boldsymbol{\xi})$, $\partial K\cap\Gamma_2(\boldsymbol{\xi})$ et $K\cap\Gamma_2(\boldsymbol{\xi})$.

Remarque III.8

En pratique, on observe cependant que l'utilisation d'une quadrature précise, indépendante de $\boldsymbol{\xi}$, peut être suffisante pour intégrer correctement les quantités élémentaires $\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})$ et $\mathbf{b}_K(\boldsymbol{\xi})$. L'intérêt est de pouvoir évaluer une fois pour toutes des grandeurs éléments finis classiques (jacobien,

matrices gradients des fonctions de base, ...) et ainsi d'alléger les coûts de calcul. Cette démarche s'avère raisonnable car l'erreur d'intégration introduite s'avère généralement inférieure aux erreurs d'intégration commises par les procédures d'intégration stochastique décrites plus loin (voir [37]).

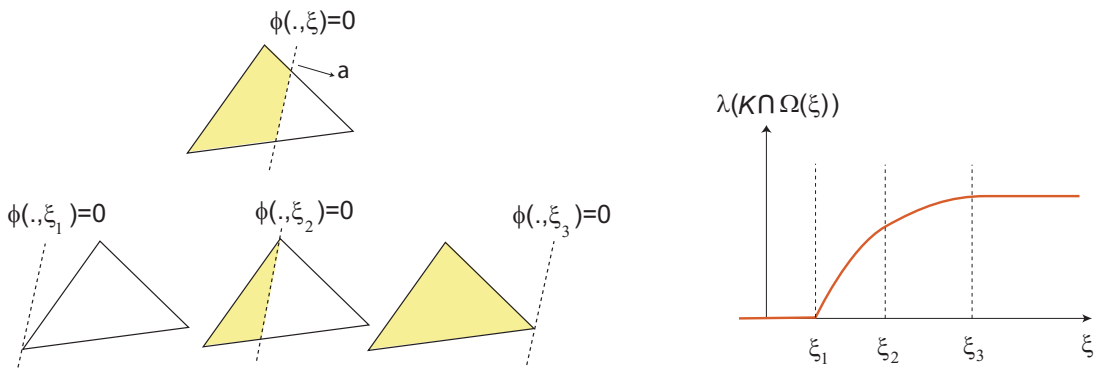
6.2.2 Régularité stochastique des matrices et vecteurs élémentaires et intégration stochastique

Il nous reste donc à définir une règle de quadrature Q_K adaptée au niveau stochastique. Le choix de cette règle dépend clairement de la régularité de $\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})$ et $\mathbf{b}_K(\boldsymbol{\xi})$ par rapport à la variable $\boldsymbol{\xi}$. Par exemple, si les composantes de $\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})$ étaient des polynômes en $\boldsymbol{\xi}$ de degré au plus j, et si on utilisait des fonctions de base H_γ de degré au plus p, l'intégration de $(\mathbf{A}_K H_\gamma)$ sur Ξ nécessiterait l'intégration de fonctions polynômiales de degré au plus $p+j$ en $\boldsymbol{\xi}$. On pourrait alors construire une quadrature de Gauss classique par rapport à la mesure $dP_{\boldsymbol{\xi}}$ afin d'intégrer exactement les coefficients $\mathbf{A}_{K,\gamma}$.

Prenons un exemple simple afin d'analyser la régularité des matrices et vecteurs élémentaires par rapport à $\boldsymbol{\xi}$. On considère un maillage spatial $\mathcal{T}_h$ composé de triangles à 3 noeuds. On considère également que le tenseur de Hooke est constant. Les fonctions éléments finis $\boldsymbol{\varphi}_i$ étant linéaires sur $K \in \mathcal{T}_h$, la matrice élémentaire $\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})$ s'écrit

$$\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{A}_K^0 \int_K \mathcal{H}(-\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}))\, dx = \mathbf{A}_K^0 \lambda(K \cap \Omega(\boldsymbol{\xi})), \tag{III.79}$$

où $(\mathbf{A}_K^0)_{ij} = \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_i) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_j)$ est une matrice constante. La régularité stochastique de $\mathbf{A}_K$ dépend donc uniquement de la régularité de la fonction $\lambda(K \cap \Omega(\boldsymbol{\xi}))$, qui est la mesure de l'intersection entre l'élément K et le domaine physique. Considérons que la level-set définisse un hyper-plan avec une normale unitaire $\boldsymbol{a}$ fixée et une position qui dépend d'une unique variable aléatoire ξ. La level-set peut donc s'écrire $\phi(\boldsymbol{x}, \xi) = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{a} - \xi$. La figure III.7 illustre alors la dépendance par rapport à ξ de la fonction $\lambda(K \cap \Omega(\xi))$. Le domaine stochastique, ici inclus dans $\mathbb{R}$, peut être scindé en 4 intervalles. Sur $]-\infty, \xi_1[$ et $]\xi_3, +\infty[$, $\lambda(K \cap \Omega(\xi))$ est constant et respectivement égale à 0 et $\lambda(K)$. Sur les deux autres intervalles $]\xi_1, \xi_2[$ et $]\xi_2, \xi_3[$, $\lambda(K \cap \Omega(\xi))$ est polynômiale de degré 2 en ξ. Ces deux derniers intervalles correspondent au cas où la level-set coupe deux côtés de l'élément, chaque intervalle étant associé à différentes paires de côtés.



(a) Level-set $\phi(\boldsymbol{x}, \xi) = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{a} - \xi$ (b) $\xi \mapsto \lambda(K \cap \Omega(\xi))$

FIG. III.7 – Régularité de la fonction $\lambda(K \cap \Omega(\xi))$ par rapport à ξ.

De la même manière, si les efforts $\boldsymbol{F}$ et $\boldsymbol{f}$ sont des fonctions polynômiales en $\boldsymbol{x}$, on peut aisément montrer que leurs contributions dans $\mathbf{b}_K$ sont des fonctions de ξ polynômiales par morceaux. Il apparaît donc clairement que de telles fonctions de ξ ne peuvent pas être intégrées proprement par une méthode de quadrature définie sur Ξ tout entier. L'idée est donc de construire une partition adaptée de Ξ où sur chaque domaine de la partition, les quantités à intégrer sont (quasi) régulières. Une quadrature plus précise peut alors être définie sur cette partition. En fait, cette partition peut complètement être caractérisée par les valeurs de la level-set. La partition idéale de Ξ correspond à des sous-domaines associés à un état constant de l'élément K, défini par le signe de la level-set sur les noeuds de l'élément. Pour l'exemple ci-dessus, les 4 états de l'élément, correspondant chacun à

un sous-domaine stochastique, sont illustrés sur la figure III.8. Dans [123], un algorithme automatique basé sur une procédure octree a été proposé afin de construire une partition stochastique adaptée pour l'intégration. Les exemples numériques traités dans [123, 37] étudient de manière détaillée cette procédure d'intégration et l'impact de sa précision sur l'approximation de Galerkin obtenue.

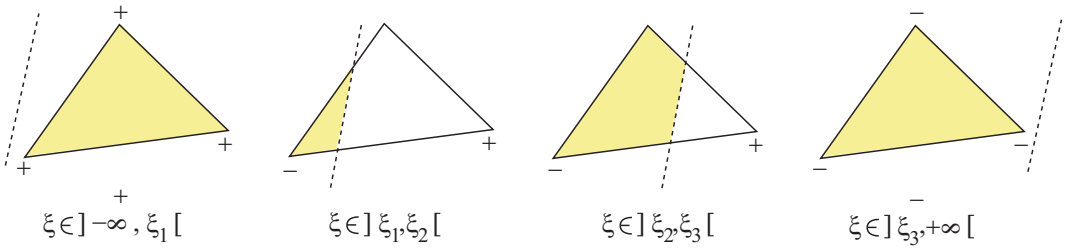
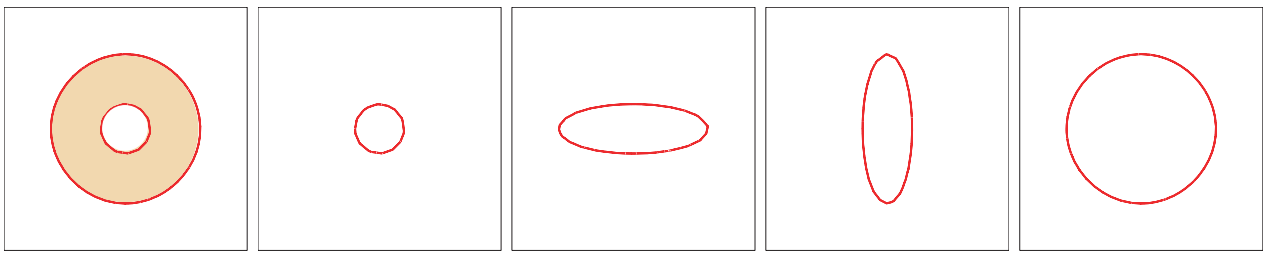


FIG. III.8 – Signe de la level-set $\phi(\cdot, \xi)$ aux noeuds de l'élément K pour chaque sous-domaine stochastique.

6.3 Illustration : Homogénéisation d'un matériau à micro-structure aléatoire

On trouvera dans [126, 123, 37] des détails sur la mise en oeuvre numérique de la méthode ainsi qu'un ensemble d'applications sur des problèmes modèles. Ces applications illustrent les propriétés de la méthode : convergence de l'approximation, stabilité vis-à-vis des erreurs d'intégration, efficacité.

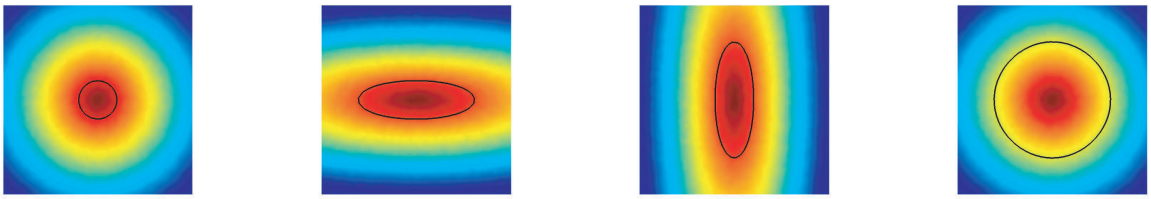
On présente ici l'application de la méthode à un calcul d'opérateur homogénéisé sur un volume élémentaire représentatif (VER). Le VER est inclus dans $D = [0, 1]^2$ et comprend un trou elliptique, centré en $(0.5, 0.5)$ et de demi-axes aléatoires $a(\theta), b(\theta) \in U(0.1, 0.3)$, qui sont des variables aléatoires uniformes indépendantes. On montre sur la figure III.9 4 réalisations du contour elliptique, correspondant à des valeurs extrêmes des variables a et b, ainsi que le domaine de variabilité du contour. La level-set, dans le cas d'une ellipse, peut s'écrire : $\phi(x, y, \theta) = 1 - (\frac{x}{a(\theta)})^2 - (\frac{y}{b(\theta)})^2$. Les 4 réalisations "extrêmes" de la level-set sont illustrées sur la figure III.10. On considère un matériau homogène élastique isotrope de module d'Young 1 et de coefficient de Poisson 0.3. On se place en hypothèse des contraintes planes.



(a) Variabilité (b) $a = 0.1$, $b = 0.1$ (c) $a = 0.3$, $b = 0.1$ (d) $a = 0.1$, $b = 0.3$ (e) $a = 0.3$, $b = 0.3$

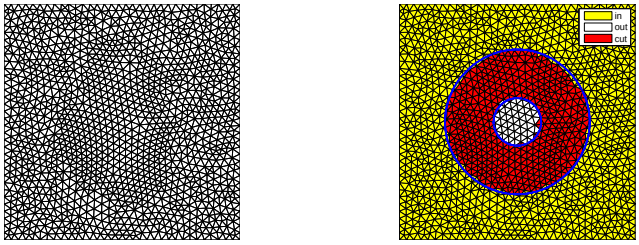
FIG. III.9 – Domaine avec trou elliptique : domaine de variabilité du contour elliptique (a) et 4 réalisations extrêmes du contour

On utilise le maillage représenté sur la figure III.11(a). Le maillage peut être divisé en trois groupes d'éléments : les éléments presque sûrement dans le domaine (in), les éléments presque sûrement hors du domaine (out) et les éléments ayant une probabilité non nulle d'être coupés. Afin de mieux conditionner le problème discrétisé, un élément ayant une probabilité supérieure à 5.10^{-3} d'être dans le domaine (resp. hors du domaine) sera considéré in (resp. out). La figure III.11(b) illustre les différents types d'éléments obtenus.



(a) $a = 0.1$, $b = 0.1$ (b) $a = 0.3$, $b = 0.1$ (c) $a = 0.1$, $b = 0.3$ (d) $a = 0.3$, $b = 0.3$

Fig. III.10 – Domaine avec trou elliptique : 4 réalisations extrêmes de la level-set



(a) maillage (b) Etat des éléments

Fig. III.11 – Domaine avec trou elliptique : maillage éléments finis (a), état des éléments (b)

On choisit comme procédure d'homogénéisation une approche avec conditions aux limites en contraintes homogènes. On note $\boldsymbol{\sigma}_M$ la contrainte macroscopique. On choisit comme conditions aux limites : $\Gamma_1 = \emptyset$, $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{\sigma}_M \cdot \boldsymbol{n}$ sur $\Gamma_2 = \partial D$ et $\boldsymbol{F} = 0$ sur $\Gamma_0 = \partial\Omega \backslash \partial D$. La solution en contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ vérifie ainsi :

$$\frac{1}{mes(D)} \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{\sigma} dx = \boldsymbol{\sigma}_M$$

On définit alors la la déformation macroscopique $\boldsymbol{\varepsilon}_M$ en fonction du déplacement solution $\boldsymbol{u}$ par la formule suivante :

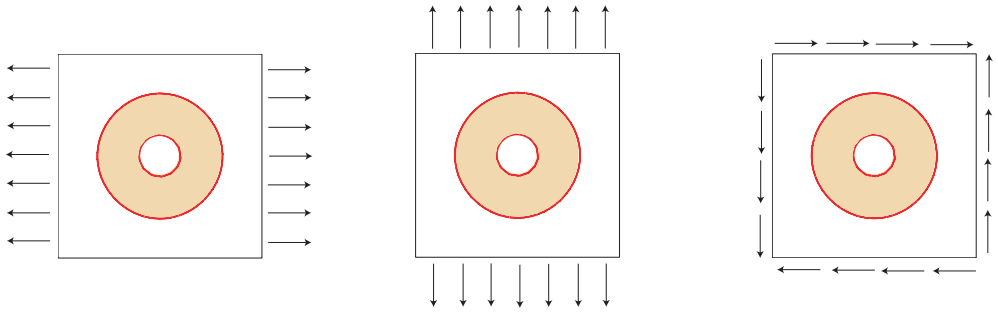
$$\boldsymbol{\varepsilon}_M = \frac{1}{mes(D)} \int_{\partial D} \boldsymbol{u} \otimes^s \boldsymbol{n} \, ds dx$$

où $\otimes^s$ désigne le produit tensoriel symétrisé. Cette définition garantit la vérification de

$$mes(D) \boldsymbol{\sigma}_M : \boldsymbol{\varepsilon}_M = \int_{\Omega(\theta)} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) \, dx$$

Le tenseur de rigidité homogénéisé aléatoire $\boldsymbol{C}_M$ relie la contrainte macroscopique à la déformation macroscopique par la relation : $\boldsymbol{\sigma}_M = \boldsymbol{C}_M : \boldsymbol{\varepsilon}_M$. En pratique, on calcule les composantes du tenseur de souplesse homogénéisé en effectuant trois cas de chargements, correspondant aux trois états de contraintes macroscopiques suivants (représentés sur la figure III.12) :

$$\boldsymbol{\sigma}_M^{(11)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_M^{(22)} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_M^{(12)} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$



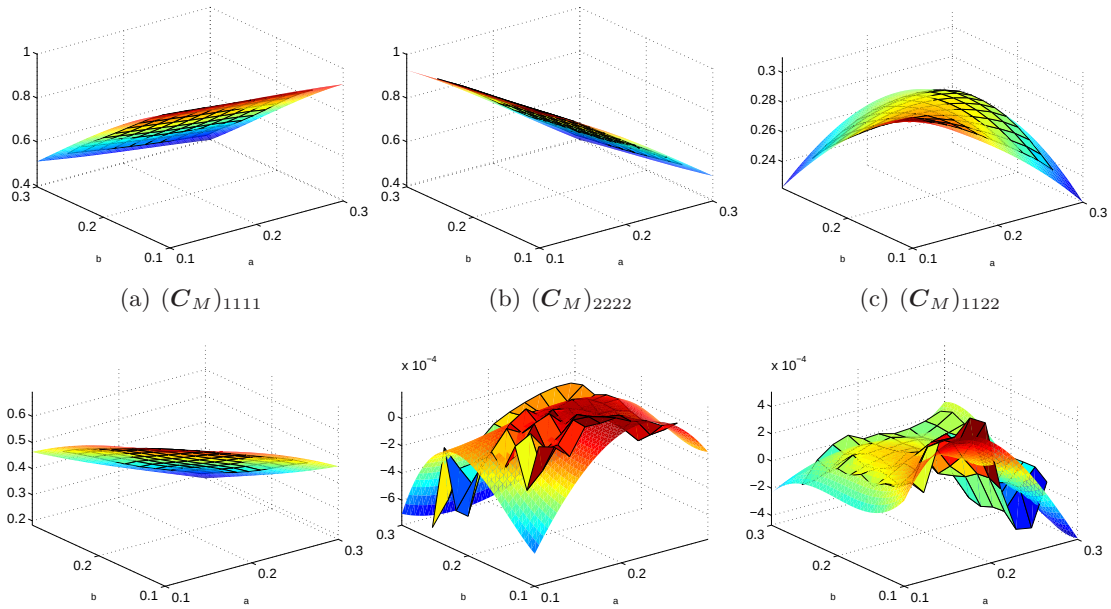
(a) $\boldsymbol{F} = n_x \boldsymbol{e_x}$ (b) $\boldsymbol{F} = n_y \boldsymbol{e_y}$ (c) $\boldsymbol{F} = n_x \boldsymbol{e_y} + n_y \boldsymbol{e_x}$

FIG. III.12 – Domaine avec trou elliptique : 3 cas de conditions aux limites (contraintes homogènes) sur ∂D

On note $\boldsymbol{u}^{(ij)}(\boldsymbol{x}, \theta)$ les 3 champs de déplacement aléatoires correspondants. Ces trois calculs permettent de déduire les différentes composantes du tenseur de souplesse homogénéisé $\boldsymbol{C}_M^{-1}$:

$$(\boldsymbol{C}_M^{-1}(\theta))_{ijkl} = \frac{1}{mes(D)} \int_{\partial D} (\boldsymbol{u}^{(kl)} \otimes^s \boldsymbol{n})_{ij} \, ds$$

et par inversion, le tenseur de rigidité homogénéisé. Pour le calcul des solutions $\boldsymbol{u}^{(ij)}$ par la méthode X-SFEM, on utilise un chaos polynômial de Legendre de degré 3 en dimension 2 comme base d'approximation au niveau stochastique. On calcule ensuite en post-traitement une décomposition du tenseur $\boldsymbol{C}_M$ sur le même chaos polynômial de Legendre de degré 3 (par une méthode de projection L^2). Ce post-traitement est très rapide. On illustre sur la figure III.14 les surfaces de réponse obtenues pour les différentes composantes $(\boldsymbol{C}_M)_{ijkl}$ en fonction de a et b. La surface de réponse obtenue par la méthode X-SFEM est comparée avec une surface de réponse obtenue par une approche X-FEM déterministe classique. On observe une très bonne représentation du tenseur homogénéisé sur toute la plage de variation des variables aléatoires. Les surfaces de réponse obtenues pour les termes $(\boldsymbol{C}_M)_{1112}$ et $(\boldsymbol{C}_M)_{2212}$ sont un peu moins bonnes. Cependant, ces termes sont négligeables par rapports aux autres termes du tenseur.



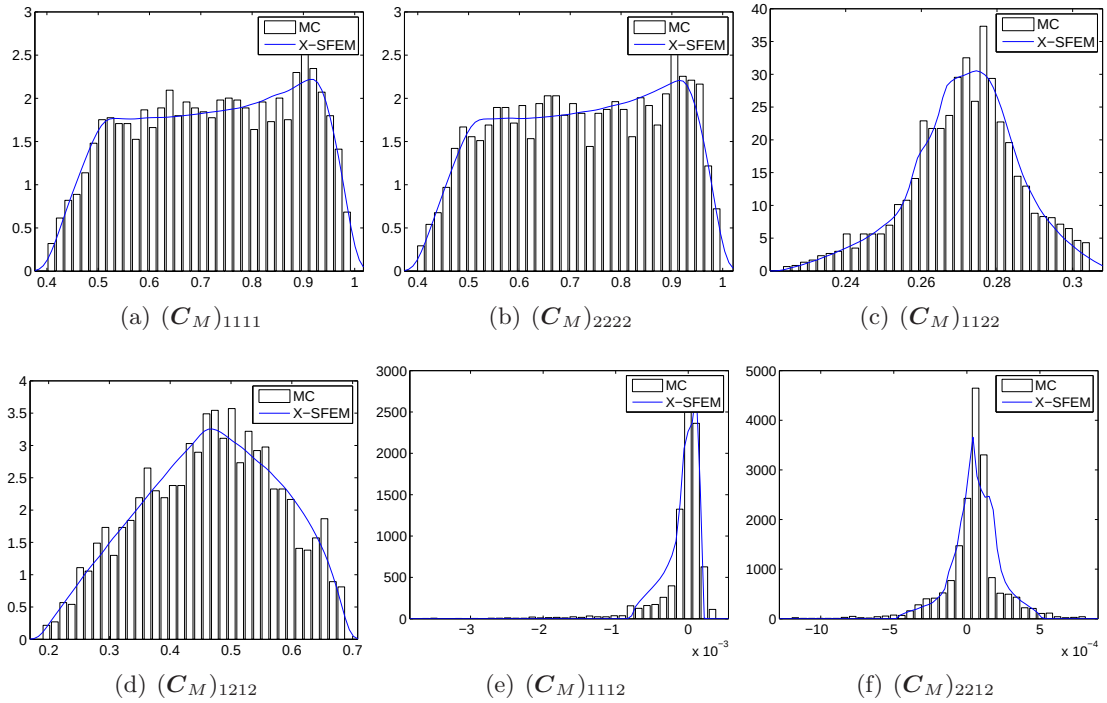
(a) $(\boldsymbol{C}_M)_{1111}$ (b) $(\boldsymbol{C}_M)_{2222}$ (c) $(\boldsymbol{C}_M)_{1122}$

(d) $(\boldsymbol{C}_M)_{1212}$ (e) $(\boldsymbol{C}_M)_{1112}$ (f) $(\boldsymbol{C}_M)_{2212}$

FIG. III.13 – Domaine avec trou elliptique : surface de réponse des composantes de l'opérateur de rigidité homogénéisé $\boldsymbol{C}_M$ obtenue par X-SFEM et par une approche X-FEM déterministe (contours noirs)

Sur la figure III.14, on peut observer les PDF des composantes du tenseur homogénéisé. Les PDF provenant de la solution X-SFEM sont obtenues en effectuant 10^6 réalisations du tenseur homogénéisé (réalisations calculées très rapidement à partir de la représentation sur le chaos polynômial de $\boldsymbol{C}_M$). Ces PDF sont comparées avec celles obtenues par une approche de Monte-Carlo avec 2500 tirages. Le calcul déterministe associé à chaque tirage est résolu par une méthode X-FEM déterministe. Les PDF obtenues par la méthode X-SFEM, bien que complexes, sont très proches des PDF obtenues par l'approche Monte-Carlo. Une plus grande erreur est faite sur les termes $(\boldsymbol{C}_M)_{1112}$ et $(\boldsymbol{C}_M)_{2212}$. Cependant, la forme générale de la PDF est tout de même respectée pour ces termes.

On notera qu'avec ce nombre de tirages, la méthode de Monte-Carlo est encore loin d'avoir convergé. Pour donner un ordre d'idée sur les temps de calcul, l'obtention des PDF par l'approche X-SFEM (calcul des champs de déplacements et post-traitement du tenseur homogénéisé) demande ici à peu près 35 fois (resp. 140 fois) fois moins de temps que par l'approche Monte-Carlo avec 2500 tirages (resp. 10000 tirages).



(a) $(\boldsymbol{C}_M)_{1111}$ (b) $(\boldsymbol{C}_M)_{2222}$ (c) $(\boldsymbol{C}_M)_{1122}$

(d) $(\boldsymbol{C}_M)_{1212}$ (e) $(\boldsymbol{C}_M)_{1112}$ (f) $(\boldsymbol{C}_M)_{2212}$

Fig. III.14 – Domaine avec trou elliptique : pdf des composantes de l'opérateur de rigidité homogénéisé $\boldsymbol{C}_M$ obtenues par X-SFEM et par une approche de Monte-Carlo (MC)

7 Problèmes à interfaces matérielles aléatoires

On s'intéresse ici au cas de milieux multi-phasés séparés par une interface aléatoire. Dans un contexte plus général, il s'agit de problèmes où l'opérateur différentiel comprend des paramètres différents selon la phase considérée. On montre comment la méthode X-SFEM peut être étendue au traitement de ce type de problèmes.

7.1 Formulation d'un problème à interface matérielle aléatoire

On choisit toujours comme problème modèle un problème d'élasticité linéaire. Le domaine d'étude Ω est à présent considéré déterministe mais composé de la réunion de deux domaines aléatoires $\Omega_1(\theta)$ et $\Omega_2(\theta)$, séparés par une interface $\Gamma(\theta) = \partial\Omega_1(\theta) \cap \partial\Omega_2(\theta)$ (voir figure III.15). Sur le domaine Ω_i, les propriétés matérielles sont caractérisées par un tenseur d'élasticité $\boldsymbol{C}_i$. On peut travailler dans ce cas dans l'espace fonctionnel

$$\mathcal{W} = \mathcal{V} \otimes \mathcal{S}, \quad \mathcal{V} = \{\boldsymbol{v} \in (H^1(\Omega))^d; \boldsymbol{v} = 0 \; sur \; \Gamma_1\}, \quad \mathcal{S} = L^2(\Theta, dP)$$

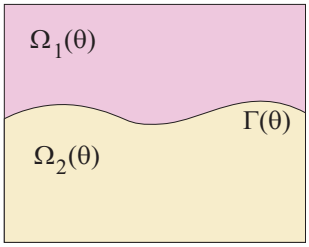


FIG. III.15 – Problème à interface matérielle aléatoire

La formulation variationnelle du problème peut alors s'écrire :

$$\boldsymbol{u} \in \mathcal{W}, \quad A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = B(\boldsymbol{v}) \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{W} \tag{III.80}$$

où

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \sum_{i=1}^{2} \int_{\Theta} \int_{\Omega_i(\theta)} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{C}_i : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) \, dx \, dP(\theta) \tag{III.81}$$

$$B(\boldsymbol{v}) = \int_{\Theta} \int_{\Omega} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{f} \, dx \, dP(\theta) + \int_{\Theta} \int_{\Gamma_2} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F} \, ds \, dP(\theta) \tag{III.82}$$

On considère que l'interface $\Gamma(\theta)$ est représentée par l'iso-zéro d'une fonction level-set aléatoire $\phi(\cdot, \theta)$. Les deux domaines aléatoires peuvent alors être caractérisés de la manière suivante :

$$\Omega_1(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in \Omega; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) < 0\} \qquad \Omega_2(\theta) = \{\boldsymbol{x} \in \Omega; \phi(\boldsymbol{x}, \theta) > 0\} \tag{III.83}$$

La forme bilinéaire du problème peut alors s'écrire simplement :

$$A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \int_{\Theta} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) : (\boldsymbol{C}_1 \mathcal{H}(-\phi(\boldsymbol{x}, \theta)) + \boldsymbol{C}_2 \mathcal{H}(\phi(\boldsymbol{x}, \theta))) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) \, dx \, dP(\theta) \tag{III.84}$$

7.2 Approximation éléments finis stochastiques standard

L'espace de travail $\mathcal{W} = \mathcal{V} \otimes \mathcal{S}$ ayant une structure de produit tensoriel d'espaces, on peut alors introduire au niveau spatial et stochastique des espaces d'approximation classiques et définir ainsi

$$\mathcal{W}_{h,P} = \mathcal{V}_h \otimes \mathcal{S}_P, \quad \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}, \ \mathcal{S}_P \subset \mathcal{S}$$

On choisira pour $\mathcal{V}_h$ un espace d'approximation éléments finis : $\mathcal{V}_h = \{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x}) v_i = \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})\mathbf{v}, \ \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n\}$. L'approximation de Galerkin $\boldsymbol{u}_{h,P} \in \mathcal{W}_{h,P}$ du problème (III.80) se ramène alors à la résolution du problème : trouver $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ tel que

$$E(\mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{u}) = E(\mathbf{v}^T \mathbf{b}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P \tag{III.85}$$

où les coefficients de la matrice aléatoire $\mathbf{A}$ et du vecteur $\mathbf{b}$ sont définis par

$$(\mathbf{A}(\theta))_{ij} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_j) : (\boldsymbol{C}_1 \mathcal{H}(-\phi(\boldsymbol{x}, \theta)) + \boldsymbol{C}_2 \mathcal{H}(\phi(\boldsymbol{x}, \theta))) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_i) \, dx \tag{III.86}$$

$$(\mathbf{b}(\theta))_i = \int_{\Omega} \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{f} \, dx + \int_{\Gamma_2} \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \mathbf{F} \, ds \tag{III.87}$$

La matrice $\mathbf{A}$ et le second membre $\mathbf{b}$ possèdent exactement la même structure que pour le cas des problèmes définis sur des domaines aléatoires. La méthodologie de résolution présentée dans le paragraphe 6 s'applique donc directement à la résolution du problème (III.85).

Bien qu'une approximation éléments finis classique soit naturelle pour la résolution de ce problème, il est bien connu dans le cadre déterministe que la précision et les propriétés de convergence des approximations éléments finis sont nettement détériorées lorsque le maillage n'est pas conforme à

la géométrie de l'interface matérielle. Dans le cas d'une interface matérielle, on sait notamment que la solution possède une discontinuité dans ses dérivées (discontinuité du gradient de déplacement). Cette discontinuité est naturellement prise en compte lorsqu'on utilise une approximation éléments finis C^0 sur un maillage conforme à l'interface. Elle n'est cependant plus représentée lorsque l'interface traverse les éléments. En réalité, ce manque de régularité de la solution s'observe également au niveau stochastique, ce qui se traduit par une dépendance de $\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi})$ en fonction des variables aléatoires $\boldsymbol{\xi}$ difficile à représenter dans des espaces d'approximation stochastique standards.
Dans le cadre déterministe, la méthode X-FEM permet de résoudre cette difficulté en enrichissant l'espace d'approximation par des fonctions judicieusement choisies [161, 114]. Le procédé d'enrichissement est basé sur la méthode de la partition de l'unité [110].

7.3 Méthode de partition de l'unité

La méthode de la partition de l'unité [110] est une méthode relativement générale pour la construction d'espaces d'approximation. Après un rappel des principes introduits dans [110], on étendra la méthode au cadre stochastique.

7.3.1 Cas de l'approximation de $H^1(\Omega)$

On s'intéresse ici au cas de la construction d'un espace d'approximation de $H^1(\Omega)$. Le premier point consiste à opérer un recouvrement de Ω par un ensemble d'ouverts $\{\Omega_i\}_{i\in I}$. On introduit ensuite un ensemble de fonctions $\{\varphi_i\}_{i\in I}$ définies sur Ω et vérifiant les propriétés suivantes (partition de l'unité) :

$$supp(\varphi_i) \subset \Omega_i, \quad \sum_{i\in I} \varphi_i = 1 \quad sur \quad \Omega \tag{III.88}$$

Un espace d'approximation V de $H^1(\Omega)$ peut alors être défini par

$$V = \sum_{i\in I} \varphi_i V_i$$

où les $V_i \subset H^1(\Omega_i \cap \Omega)$ sont des espaces de fonctions à définir. Les fonctions d'interpolation φ_i associées à un maillage éléments finis $\mathcal{T}_h$ de Ω forment une partition de l'unité associée au recouvrement $\{\Omega_i\}$, constitué des supports des fonctions φ_i. Ω_i est composé de la réunion des éléments $K \in \mathcal{T}_h$ contenant le noeud $\boldsymbol{x}_i$ du maillage.

Si on choisit pour V_i l'ensemble des constantes, l'espace V coincide avec l'espace engendré par les fonctions d'interpolation φ_i. C'est l'espace éléments finis de base. Si on choisit pour V_i les fonctions polynômiales de degré q, l'espace V est un espace éléments finis de degré $q+1$. Par cette approche générale, les approximations éléments finis classiques peuvent être enrichies par l'introduction de fonctions additionnelles dans les espaces V_i. Ces fonctions additionnelles peuvent être basées sur une connaissance *a priori* de la solution ou sur des résolutions numériques ou analytiques de problèmes auxiliaires. Cette méthode de la partition de l'unité est à la base de nombreuses extensions de la méthode éléments finis : X-FEM [115, 44], GFEM [158], ...

7.3.2 Extension au cadre probabiliste

On s'intéresse à présent à la construction d'un espace d'approximation de $H^1(\Omega) \otimes L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$. En suivant le principe précédent, on commence par définir une partition de l'unité sur $L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$. On définit un recouvrement d'ouverts $\{\Xi^j\}_{j\in J}$ de Ξ. Les fonctions indicatrices $\{\chi_j\}_{j\in J}$ de ces ouverts forment une partition de l'unité :

$$supp(\chi_j) \subset \Xi^j, \quad \sum_{j\in J} \chi_j = 1 \; sur \; \Xi \tag{III.89}$$

Notons $M = \{(i,j), i \in I, j \in J\}$. On peut alors définir le recouvrement $\{\Upsilon_m\}_{m\in M}$ de $\Omega \times \Xi$, avec $\Upsilon_{(i,j)} = \Omega_i \times \Xi^j$. Les fonctions $\{\Phi_m\}_{m\in M}$, définies par $\Phi_{(i,j)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) = \varphi_i(\boldsymbol{x})\chi_j(\boldsymbol{\xi})$ forment alors une

partition de l'unité sur le recouvrement $\{\Upsilon_m\}_{m\in M}$:

$$supp(\Phi_m) \subset \Upsilon_m, \quad \sum_{m\in M} \Phi_m = 1 \; sur \; \Upsilon \tag{III.90}$$

Un espace d'approximation W de $H^1(\Omega) \otimes L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ peut alors être défini par

$$W = \sum_{m\in M} \Phi_m W_m = \sum_{i\in I, j\in J} \varphi_i \chi_j W_{(i,j)} \tag{III.91}$$

où les $W_{(i,j)} \subset H^1(\Omega_i \cap \Omega) \otimes L^2(\Xi \cap \Xi^j, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ sont des espaces à choisir. Si on choisit pour les espaces W_m les espaces de fonctions polynômiales de degré q par rapport à $\boldsymbol{x}$ et polynômiales de degré p par rapport à $\boldsymbol{\xi}$, on montre aisément que W correspond à un espace d'approximation éléments finis de degré $q+1$ au niveau spatial et éléments finis de degré p au niveau stochastique. C'est le type d'approximation introduit dans [40] (éléments finis au niveau spatial et stochastique). Le cas $q = 0$, que l'on considère par la suite, correspond à une approximation éléments finis P^1 classique au niveau spatial.
Par la suite, on se contentera d'une partition triviale $\{\Xi\}$ au niveau stochastique et on identifie donc M à I. L'espace d'approximation W correspond alors à une approximation P^1 spatiale et à une approximation par chaos polynômial généralisé de degré p au niveau stochastique. On définit les $\{W_i\}_{i\in I}$ par

$$W_i = span\{H_\alpha(\boldsymbol{\xi}); \alpha \in \mathcal{I}_P\}$$

Dans ce cas, une fonction de $u \in H^1(\Omega) \otimes L^2(\Xi, dP_{\boldsymbol{\xi}})$ s'écrira bien sous une forme classique

$$u(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{i\in I} \varphi_i(\boldsymbol{x}) u_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}), \quad u_i \in W_i \tag{III.92}$$

$$\Leftrightarrow \quad u(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{i\in I} \sum_{\alpha\in\mathcal{I}_P} \varphi_i(\boldsymbol{x}) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) u_{i,\alpha}, \quad u_{i,\alpha} \in \mathbb{R} \tag{III.93}$$

L'espace d'approximation W est alors l'espace éléments finis stochastiques spectraux classique. En utilisant une telle approximation pour chaque composante du vecteur $\boldsymbol{u} \in \mathcal{W}$, cela conduit à la définition de l'espace $\mathcal{W}_{h,P}$ introduit précédemment.

On peut à présent enrichir les espaces W_i par des fonctions additionnelles. Pour cela, on peut s'aider d'une connaissance a priori des propriétés de la solution.

7.4 Enrichissement de l'approximation dans le cas d'une interface matérielle

7.4.1 Principe de l'enrichissement

Pour notre problème d'interface matérielle aléatoire, il serait intéressant d'introduire dans certains espaces W_i des fonctions additionnelles permettant de capturer l'irrégularité de la solution au niveau spatial et stochastique. En s'inspirant des travaux dans le cadre déterministe [161, 114], on propose de choisir W_i de la manière suivante :

$$W_i = span\{H_\alpha(\boldsymbol{\xi}); \alpha \in \mathcal{I}_P\}, \quad i \in I \backslash I^+ \tag{III.94}$$

$$W_i = span\{H_\alpha(\boldsymbol{\xi}); \alpha \in \mathcal{I}_P\} \cup span\{H_\alpha(\boldsymbol{\xi})\psi(\boldsymbol{x}, \theta); \alpha \in \mathcal{I}_P\}, \quad i \in I^+ \tag{III.95}$$

où I^+ désigne un sous-ensemble de supports Ω_i enrichis et où ψ est une fonction pour laquelle on discutera de différents choix plus loin. Une approximation $u \in W$ pourra alors s'écrire

$$u = \sum_{i\in I} \varphi_i(\boldsymbol{x}) u_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}), \quad u_i \in W_i \tag{III.96}$$

ou sous la forme équivalente suivante :

$$u = \sum_{i\in I} \varphi_i(\boldsymbol{x}) a_i(\boldsymbol{\xi}) + \sum_{i\in I^+} \varphi_i(\boldsymbol{x}) \psi(\boldsymbol{x}, \theta) a_i^+(\boldsymbol{\xi}), \quad a_i, a_i^+ \in span\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{I}_P} \tag{III.97}$$

$$= \sum_{i\in I} \sum_{\alpha\in\mathcal{I}_P} \varphi_i(\boldsymbol{x}) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) a_{i,\alpha} + \sum_{i\in I^+} \sum_{\alpha\in\mathcal{I}_P} \varphi_i(\boldsymbol{x}) \psi(\boldsymbol{x}, \theta) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) a_{i,\alpha}^+, \quad a_{i,\alpha}, a_{i,\alpha}^+ \in \mathbb{R} \tag{III.98}$$

On notera que pour une réalisation $\boldsymbol{\xi}$ donnée, la forme (III.97) correspond à la forme proposée dans le cadre de la méthode X-FEM déterministe [161, 114]. En utilisant une telle expression pour chaque composante du vecteur $\boldsymbol{u} \in \mathcal{W}$, cela conduit à la définition d'un espace d'approximation enrichi, noté $\mathcal{W}^+_{h,P}$ par la suite.

7.4.2 Calcul de l'approximation de Galerkin

On peut exprimer une fonction $\boldsymbol{u} \in \mathcal{W}^+_{h,P}$ de la manière suivante :

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^{n_1} \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x}) a_i(\boldsymbol{\xi}) + \sum_{i=1}^{n_2} \boldsymbol{\varphi}_{\sigma(i)}(\boldsymbol{x}) \psi(\boldsymbol{x},\theta) a_i^+(\boldsymbol{\xi}), \quad a_i, a_i^+ \in \mathcal{S}_P \tag{III.99}$$

$$= \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_P} \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{x}) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) a_{i,\alpha} + \sum_{i=1}^{n_2} \sum_{\alpha \in \mathcal{I}_P} \boldsymbol{\varphi}_{\sigma(i)}(\boldsymbol{x}) \psi(\boldsymbol{x},\theta) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) a_{i,\alpha}^+, \quad a_{i,\alpha}, a_{i,\alpha}^+ \in \mathbb{R} \tag{III.100}$$

où $\sigma : \{1...n_2\} \to \{1...n_1\}$ et où les $\boldsymbol{\varphi}_i$ sont les fonctions d'interpolation vectorielles. On note $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{n_1} \otimes \mathcal{S}_P$ et $\mathbf{a}^+ \in \mathbb{R}^{n_2} \otimes \mathcal{S}_P$ les vecteurs aléatoires regroupant les degrés de liberté $\{a_i\}$ et $\{a_i^+\}$ définis dans l'équation (III.99). On note alors $\mathbf{u} = (\mathbf{a}^T\ \mathbf{a}^{+T})^T \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, avec $n = n_1 + n_2$. L'approximation de Galerkin $\boldsymbol{u}_{h,P} \in \mathcal{W}^+_{h,P}$ du problème (III.80) conduit alors à la recherche de $\mathbf{u}$, solution d'un problème classique de type (III.85) où la matrice $\mathbf{A}$ peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{aa} & \mathbf{A}_{aa^+} \\ \mathbf{A}_{a^+a} & \mathbf{A}_{a^+a^+} \end{pmatrix} \tag{III.101}$$

avec

$$(\mathbf{A}_{aa})_{ij} = \int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_i) : (\boldsymbol{C}_1 \mathcal{H}(-\phi) + \boldsymbol{C}_2 \mathcal{H}(\phi)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_j)\, dx \tag{III.102}$$

$$(\mathbf{A}_{aa^+})_{ij} = (\mathbf{A}_{a^+a})_{ji} = \int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_i) : (\boldsymbol{C}_1 \mathcal{H}(-\phi) + \boldsymbol{C}_2 \mathcal{H}(\phi)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_{\sigma(j)} \psi)\, dx \tag{III.103}$$

$$(\mathbf{A}_{a^+a^+})_{ij} = \int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_{\sigma(i)} \psi) : (\boldsymbol{C}_1 \mathcal{H}(-\phi) + \boldsymbol{C}_2 \mathcal{H}(\phi)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}_{\sigma(j)} \psi)\, dx \tag{III.104}$$

La résolution du système (III.85) nécessite alors les mêmes ingrédients que ceux décrits dans la section 6 : intégration stochastique adaptée pour décomposer les matrices éléments finis élémentaires sur une base stochastique et assemblage des quantités élémentaires.

Remarque III.9

> *Bien que $\mathcal{W}$ ait dans le cas traité une structure de produit tensoriel d'espaces, on notera que l'espace d'approximation $\mathcal{W}^+_{h,P}$ perd cette structure. Les degrés de liberté $\mathbf{u}$ doivent donc être manipulés avec précaution. Par exemple, l'espérance du champ de déplacement $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi})$ ne peut pas être obtenue par d'une simple espérance des degrés de liberté $\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi})$.*

7.4.3 Choix de l'enrichissement

A présent, la question est de savoir comment choisir la fonction ψ et l'ensemble des supports enrichis. Nous illustrerons ce choix sur un exemple simple d'un domaine $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ et une interface matérielle verticale définie par l'iso-zéro de la level-set $\phi(\boldsymbol{x},\xi) = x - \xi$, où $\xi \in U(0.3, 0.7)$ est une variable aléatoire uniforme (voir figure III.16). On illustrera pour chaque cas l'ensemble des éléments enrichis $\mathcal{T}_h^+ \subset \mathcal{T}_h$, ayant une contribution dans l'assemblage des termes associés aux nouveaux degrés de liberté $\mathbf{a}^+$. Ce sont les éléments contenus dans les supports enrichis et intersectant possiblement le support spatial de la fonction ψ :

$$\mathcal{T}_h^+ = \{K \in \mathcal{T}_h ; K \subset \cup_{i \in I^+} \Omega_i,\ P_{\boldsymbol{\xi}}(K \cap supp(\psi(\cdot,\boldsymbol{\xi})) \neq \emptyset) > 0\}$$

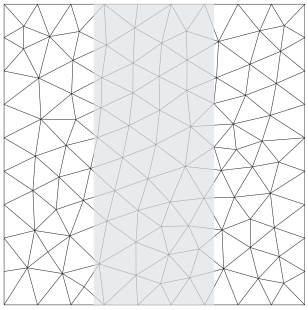


FIG. III.16 – Illustration : maillage de $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, interface matérielle verticale d'équation $\phi = x - \xi = 0$ avec $\xi \in U(0.3, 0.7)$

Choix 1

Un premier choix consiste à prendre pour la fonction ψ la valeur absolue de la level-set, soit $\psi = |\phi|$. Cette fonction possède en effet les irrégularités souhaitées au niveau spatial (discontinuité des gradients à la traversée de Γ) et également au niveau stochastique. Cette fonction peut s'écrire :

$$\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) = |\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi})| = \begin{cases} -\sum_{i \in I} \varphi_i(\boldsymbol{x}) \phi_i(\boldsymbol{\xi}) & si \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_1(\boldsymbol{\xi}) \\ \sum_{i \in I} \varphi_i(\boldsymbol{x}) \phi_i(\boldsymbol{\xi}) & si \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_2(\boldsymbol{\xi}) \end{cases}$$

où les φ_i sont les fonctions d'interpolation éléments finis scalaires. L'ensemble des supports enrichis sera choisi de la manière suivante :

$$I^+ = \{i \in I; P_{\boldsymbol{\xi}}(\Omega_i \cap \Gamma(\boldsymbol{\xi}) \neq \emptyset) > 0\} \tag{III.105}$$

ce qui équivaut à l'ensemble des noeuds du maillage dont le support a une probabilité non nulle d'être coupé par l'interface (figure III.17). La figure III.18 illustre quelques réalisations de la fonction ψ. Dans le cadre déterministe, il a été montré numériquement [114] que cette fonction d'enrichissement ne permet pas d'obtenir une convergence optimale de l'approximation éléments finis (convergence $O(h^2)$ en norme L^2).

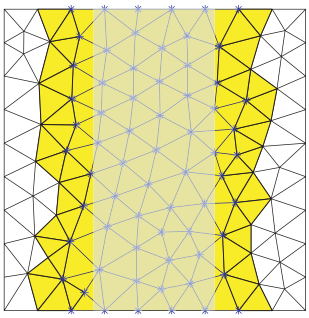


FIG. III.17 – Illustration du choix 1 : ensemble des noeuds enrichis I^+ $(*)$ et éléments finis enrichis $K \in \mathcal{T}_h^+$

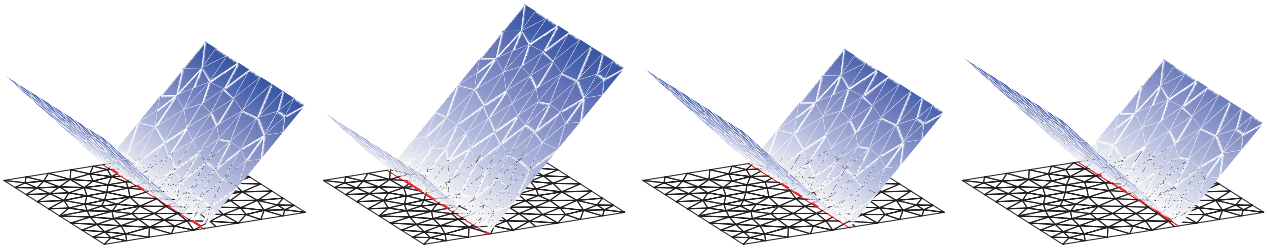


FIG. III.18 – Illustration du choix 1 : 4 réalisations de la fonction ψ

Choix 2

Un autre choix possible, inspiré de [114], consiste à prendre

$$\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i\in I} \varphi_i(\boldsymbol{x})|\phi_i(\boldsymbol{\xi})| - |\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi})| = \begin{cases} \sum_{i\in I} \varphi_i(\boldsymbol{x})(|\phi_i(\boldsymbol{\xi})| + \phi_i(\boldsymbol{\xi})) & si \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_1(\boldsymbol{\xi}) \\ \sum_{i\in I} \varphi_i(\boldsymbol{x})(|\phi_i(\boldsymbol{\xi})| - \phi_i(\boldsymbol{\xi})) & si \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_2(\boldsymbol{\xi}) \end{cases}$$

L'ensemble des supports enrichis I^+ est encore défini par (III.105). On notera une particularité de cet enrichissement : pour $\boldsymbol{\xi}$ donné, la fonction $\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi})$ est non nulle uniquement sur les éléments finis coupés par l'interface (voir l'ensemble des éléments finis enrichis $\mathcal{T}_h^+$ sur la figure III.19). Dans le cadre déterministe [114], il a été montré que cette fonction permet de retrouver la convergence optimale d'une approximation éléments finis conforme à l'interface (convergence en $O(h^2)$ en norme L^2). Cependant, dans le cadre stochastique, cet enrichissement présente des inconvénients. Pour calculer la décomposition de la matrice $\mathbf{A}$ sur une base stochastique, on procède à un assemblage de matrices élémentaires $\mathbf{A}_K$, $K \in \mathcal{T}_h$. Le calcul des coefficients de la décomposition de $\mathbf{A}_K$ sur une base stochastique nécessite alors l'intégration stochastique de $\mathbf{A}_K(\boldsymbol{\xi})H_\alpha(\boldsymbol{\xi})$. Pour $K \in \mathcal{T}_h^+$, il apparaît dans l'intégrande la restriction de $\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi})$ à l'élément K, soit $\psi_K : K \times \Xi \to \mathbb{R}$. Or cette fonction ψ_K s'avère avoir pour support un petit ensemble de $K \times \Xi$, correspondant aux réalisations $\boldsymbol{\xi} \in \Xi$ telles que $K \cap \Gamma(\boldsymbol{\xi}) \neq \emptyset$. Dans le cas où la plage de variabilité de Γ est grande ("balayage de plusieurs bandes d'éléments"), on doit donc intégrer une fonction qui au niveau stochastique a une faible probabilité d'être non nulle. Les procédures d'intégration proposées dans [123] s'appliquent encore mais nécessitent alors un haut degré de précision, ce qui engendre des coûts de calcul prohibitifs. Un autre inconvénient est que la dépendance en $\boldsymbol{\xi}$ des degrés de liberté $\mathbf{a}(\boldsymbol{\xi})$ et $\mathbf{a}^+(\boldsymbol{\xi})$ s'avère peu régulière. Les approximations spectrales stochastiques classiques possèdent alors de mauvaises propriétés de convergence.

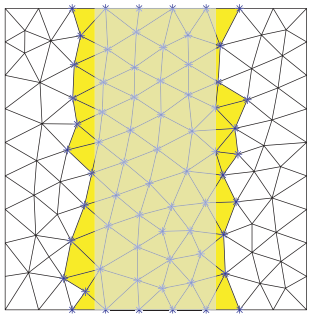


Fig. III.19 – Illustration du choix 2 : ensemble des noeuds enrichis I^+ $(*)$ et éléments finis enrichis $K \in \mathcal{T}_h^+$.

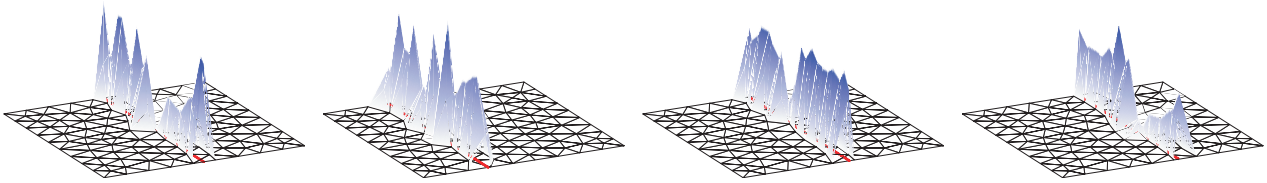


Fig. III.20 – Illustration du choix 2 : 4 réalisations de la fonction ψ

Choix 3

Un dernier choix envisagé consiste à prendre

$$\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} \sum_{i\in I_1^+} \varphi_i(\boldsymbol{x})(\beta + \phi_i(\boldsymbol{\xi})) & si \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_1(\boldsymbol{\xi}) \\ \sum_{i\in I_1^+} \varphi_i(\boldsymbol{x})(\beta - \phi_i(\boldsymbol{\xi})) & si \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_2(\boldsymbol{\xi}) \end{cases}$$

où β est une constante. L'ensemble des supports enrichis est choisi comme $I^+ = I_1^+ \cup I_2^+$, avec

$$I_1^+ = \{i \in I; P_{\boldsymbol{\xi}}(\Omega_i \cap \Gamma(\boldsymbol{\xi}) \neq \emptyset) > 0\} \tag{III.106}$$

$$I_2^+ = \{i \in I \backslash I_1^+; \exists j \in I_1^+, \boldsymbol{x}_i \in \partial\Omega_j\} \tag{III.107}$$

I_1^+ est donc l'ensemble des noeuds dont le support est possiblement coupé par l'interface (comme précédemment) et I_2^+ est un ensemble de noeuds complémentaires, connectés aux supports I_1^+ (voir figure III.21). La fonction ψ proposée est en réalité une modification de la fonction $(\beta - |\phi|)$ qui consiste, dans le développement sur la base d'interpolation $\{\varphi_i\}$, à ne considérer que les noeuds I_1^+. Cela permet d'obtenir, pour $\boldsymbol{\xi}$ fixé, un support spatial confiné à l'ensemble des supports I_1^+ possiblement coupés par l'interface (voir la figure III.22). Le paramètre β est choisi en pratique de la manière suivante :

$$\beta \approx \sup_{i \in I^+, \boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\Xi}} |\phi_i(\boldsymbol{\xi})|$$

On s'aperçoit que ce choix permet d'améliorer le conditionnement du problème discrétisé (notamment par rapport à $\beta = 0$). Des études plus poussées sur l'influence de ce paramètre restent cependant à mener. D'après les expériences numériques menées, ce choix de ψ conserve les bonnes propriétés de convergence du choix 2 dans un cadre déterministe. Dans le cadre stochastique, ce choix permet de remédier aux inconvénients du choix 2. L'intégration stochastique se trouve facilitée par le fait que le support de ψ_K, pour $K \in \mathcal{T}_h^+$, est $\boldsymbol{\Xi}$ tout entier. De plus, les degrés de liberté $\mathbf{a}$ et $\mathbf{a}^+$ retrouvent une bonne régularité au niveau stochastique, ce qui rend possible leur développement par des approches spectrales classiques (choix classique de fonctions polynômiales pour les H_α).

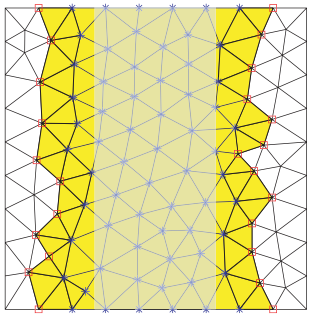


Fig. III.21 – Illustration du choix 3 : ensembles de noeuds enrichis I_1^+ $(*)$ et I_2^+ $(\square)$ et éléments finis enrichis $K \in \mathcal{T}_h^+$

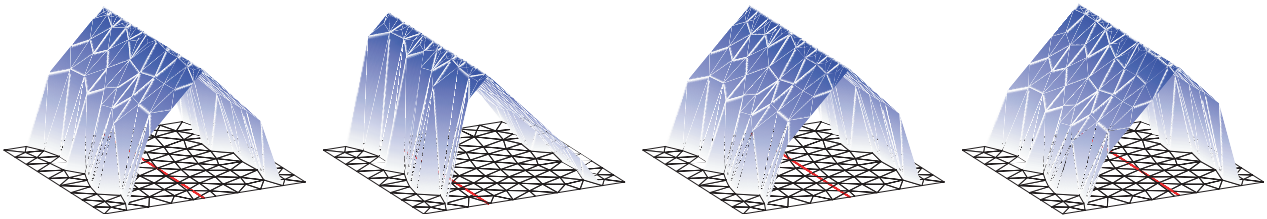


Fig. III.22 – Illustration du choix 3 : 4 réalisations de la fonction ψ

7.5 Illustrations

On trouvera un ensemble d'applications dans [37, 122]. Ces applications illustrent l'influence du choix de l'enrichissement sur la qualité de l'approximation.

8 Conclusions et perspectives

Ce chapitre a présenté une méthode de résolution d'équations aux dérivées partielles définies sur des domaines aléatoires. Un point clé de la méthode réside dans l'utilisation de la technique des level-sets dans un contexte probabiliste, permettant de représenter simplement des géométries aléatoires complexes et de reformuler le problème sur un domaine fictif déterministe qui ne tient pas compte de la géométrie. La reformulation du problème autorise une construction classique d'espaces d'approximation, conduisant à une bonne précision de la solution approchée. Cette solution est explicite en fonction des variables aléatoires de base, ce qui autorise des post-traitements probabilistes rapides. Des techniques numériques ad-hoc ont été proposés pour la résolution des problèmes discrétisés.

Cette méthode permet déjà un gain significatif en temps de calcul par rapport à des techniques d'intégration stochastique directe avec remaillages. Cependant, un enjeu à court terme concerne l'optimisation de l'étape de résolution numérique afin de diminuer encore les coûts de résolution. Les algorithmes d'intégration spatiale et stochastique proposés pour la construction des problèmes discrétisés permettent d'atteindre relativement précisément l'approximation de Galerkin idéale (en approchant de manière précise les formes bilinéaire et linéaire du problème). Cependant, ces algorithmes engendrent un coût de calcul important qui freine l'utilisation de la méthode pour des problèmes de plus grande taille. Les résultats obtenus montrent cependant une grande robustesse de l'approche de Galerkin stochastique, qui s'avère très stable vis-à-vis des erreurs d'intégration (des crimes variationnels). Cela permet d'imaginer l'utilisation de procédures d'intégration grossière réduisant considérablement les coûts de calcul. Des critères devront être proposés afin de bien maîtriser cette étape d'intégration des problèmes discrétisés. Ces développements, couplés avec l'utilisation d'un solveur GSD (voir chapitre II) devrait permettre de résoudre des problèmes de très grande taille en des temps de calcul raisonnables.

Dans sa forme actuelle, la méthode permet d'envisager le traitement de nombreux problèmes d'intérêt en calcul de structures. Des applications pratiques restent à mettre en oeuvre afin de mieux valider la méthode. Si on oublie un moment l'aspect aléatoire, la méthode peut être vue comme une méthode de construction de surface de réponse. En phase de conception, cette méthode pourrait être avantageusement utilisée dans une problématique d'optimisation de forme.

L'extension des principes de partition de l'unité au cadre stochastique permettra à court terme d'aborder le calcul de structures en présence de fissures aléatoires, pour lequel l'enrichissement des espaces d'approximation s'avère nécessaire. Le principe d'enrichissement de l'approximation stochastique pourrait également être appliqué à d'autres problématiques où les bases d'approximation stochastique classiques ne permettent pas une bonne représentation de la solution. On peut noter qu'une procédure d'enrichissement similaire a été introduite dans [60] pour la résolution de problèmes aux valeurs propres aléatoires.

Une dernière perspective concerne les problèmes d'évolution de géométrie aléatoire, ce qui demandera d'étendre au cadre stochastique les outils propres à la méthode des level-sets. En dehors du calcul de structures (*e.g.* évolution aléatoire de fissures, ...), ce point devrait permettre d'aborder d'autres applications d'intérêt nécessitant le suivi de fronts aléatoires.

Chapitre IV

Quantification des incertitudes

Dans ce chapitre, on introduit quelques points-clés de l'étape de modélisation probabiliste. Différents outils sont présentés pour la quantification des incertitudes à partir d'expériences (ou observations), permettant la construction d'un espace de probabilité de travail. On insistera plus particulièrement sur les approches de représentation fonctionnelle des incertitudes. Dans le cadre de ces approches, plusieurs contributions sont apportées : méthodes de calcul des représentations fonctionnelles, représentation adaptée pour le cas de variables aléatoires multi-modales, identification de géométrie aléatoire.

Sommaire

1 Problématique et contexte scientifique . . . 96

2 Modélisation probabiliste . . . 97

2.1 Maximum d'entropie . . . 97

2.2 Statistique inférentielle . . . 97

3 Représentation fonctionnelle des incertitudes et méthodes d'identification . . . 99

3.1 Décomposition de type chaos polynômial . . . 99

3.2 Identification par les techniques d'inférence classiques . . . 100

3.3 Résolution du problème de maximum de vraisemblance . . . 101

3.4 Méthode de projection basée sur la fonction de distribution empirique des échantillons 102

4 Identification de lois multi-modales par développement conditionnel sur la chaos polynomial . . . 105

4.1 Limite du chaos polynomial classique . . . 105

4.2 Mélange de lois de probabilité . . . 106

4.3 Définition des Θ_i par séparation des échantillons . . . 106

4.4 Représentation sur chaos généralisé . . . 107

4.5 Identification de la décomposition à partir des échantillons . . . 108

4.6 Illustrations . . . 108

5 Application à l'identification de formes aléatoires . . . 110

5.1 Reconnaissance de forme par la méthode des level-sets . . . 110

5.2 Réduction d'information par décomposition de Karhunen-Loève empirique . . . 111

5.3 Méthodologie d'identification probabiliste . . . 113

5.4 Illustration . . . 114

6 Conclusions et perspectives . . . 116

1 Problématique et contexte scientifique

Au cours d'une analyse probabiliste d'un modèle physique, les méthodes présentées dans les chapitres précédents ne constituent que l'étape dite de propagation des incertitudes à travers ce modèle. Un autre aspect essentiel de cette analyse concerne la modélisation des incertitudes sur les paramètres d'entrée du modèle (étape de quantification des incertitudes). La construction d'un modèle probabiliste s'appuie généralement sur un ensemble de données, provenant d'observations ou d'expériences. Différentes démarches classiques de modélisation probabiliste peuvent alors être envisagées. Le choix d'une démarche particulière dépend généralement du type et du nombre de données à disposition. Les mathématiques statistiques, qui peuvent être vues comme le pendant "expérimental" de la théorie des probabilités, fournissent un certain nombre d'outils pour la quantification des incertitudes à partir de données. Ces outils reposent classiquement sur une vision paramétrique des incertitudes. Cette vision consiste à présupposer une famille de lois de probabilité paramétrées pouvant refléter les données observées. L'identification d'une loi particulière passe alors par l'estimation des paramètres de la loi, l'obtention d'une telle estimation pouvant découler de l'application de différents principes : maximum de vraisemblance, approche bayésienne...

Les approches paramétriques s'appuient généralement sur des choix classiques pour les familles de lois de variables aléatoires. Cependant, ces lois classiques ne permettent pas toujours de représenter fidèlement les observations. Une alternative, qui fait l'objet de quelques travaux récents, consiste à représenter les variables aléatoires à l'aide de développements sur des bases de fonctions telles que les bases de chaos polynômial introduites dans le chapitre I [169, 63, 155]. Cette approche permet de représenter une large gamme de lois de probabilité et surtout ne suppose pas une forme de loi *a priori*. Elle peut être encore vue comme une vision paramétrique en statistique inférentielle, où les paramètres de la famille de lois sont maintenant les coefficients apparaissant dans le développement des variables aléatoires. Elle permet en particulier de représenter des variables aléatoires ayant une structure de dépendance complexe. Cette approche a notamment été appliquée à la modélisation probabiliste de processus stochastiques non gaussiens [142, 132, 42, 59]. Un autre grand intérêt de cette approche est de fournir un cadre d'identification général, conduisant à une représentation des incertitudes sous une forme adaptée à l'utilisation des méthodes de calcul stochastique présentées dans les chapitres précédents. Cependant, une première limitation de cette approche est qu'elle conduit à l'identification d'un grand nombre de paramètres. Notamment, l'utilisation d'un principe de maximum de vraisemblance [42] conduit à un problème d'optimisation de très grande taille, dont la résolution est rendue difficile par la nature de la fonctionnelle à optimiser. Ces approches par développement sur chaos polynômial s'avèrent relativement bien adaptées à la représentation d'une large classe de lois de probabilité. Cependant, les bases de représentation classiques s'avèrent inadaptées à certains types de lois, telles que les lois multi-modales.

Mes travaux de recherche apportent quelques contributions au développement et à l'application de ces méthodes de représentation sur bases fonctionnelles. Un premier point a consisté à améliorer les algorithmes d'identification des développements sur chaos polynômial utilisant un principe de maximum de vraisemblance. Le problème d'optimisation associé, formulé sur une variété de Stiefel [42], est transformé en un problème d'optimisation sans contrainte en introduisant une paramétrisation minimale de la variété. Un autre point concerne le développement d'une méthode efficace pour un calcul rapide des développements sur chaos généralisé. Cette approche est basée sur une méthode de projection utilisant la fonction de distribution empirique des échantillons. Elle s'applique en pratique au cas de l'identification d'une variable aléatoire, voire de plusieurs variables aléatoires si le nombre d'échantillons est suffisamment grand. Ces différentes contributions seront présentées dans la section 3, après avoir rappelé les principes des approches de représentation fonctionnelle des incertitudes.
Une autre contribution porte sur l'identification de lois multi-modales, pour laquelle il est proposé une représentation fonctionnelle adaptée et des algorithmes associés. La méthode proposée, détaillée dans la section 4, peut être interprétée comme une méthode de projection conditionnelle sur chaos polynômial. Enfin, la méthodologie de représentation fonctionnelle des incertitudes a été appliquée à l'identification de géométries aléatoires. L'objectif de ce travail, présenté dans la section 5, est de fournir une modélisation probabiliste adaptée au calcul par la méthode proposée dans le chapitre III.

2 Modélisation probabiliste

On rappelle ici brièvement deux grandes méthodes pour la construction de lois de probabilité de paramètres incertains : le principe du maximum d'entropie et les statistiques mathématiques. Une présentation plus détaillée des méthodes de statistique inférentielle pourra être trouvée dans de nombreux ouvrages (voir par exemple [144, 136, 53]).

2.1 Maximum d'entropie

Quand on cherche à modéliser la loi de probabilité d'une variable aléatoire X à valeurs dans $\mathcal{X}$, connaissant un certain nombre d'informations sur cette loi, on peut recourir au principe du maximum d'entropie. Ce principe repose sur une vision non-paramétrique en modélisation probabiliste, par opposition aux modélisations paramétriques qui reposent généralement sur le choix *a priori* d'une famille paramétrée de lois de probabilité.

Si on désigne par $p_X : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^+$ la fonction de densité de probabilité de X, on définit l'entropie $\mathcal{E}(p_X)$ associée à p_X par :

$$\mathcal{E}(p_X) = -\int_{\mathcal{X}} p_X(x)\, log(p_X(x))dx$$

Cette notion d'entropie, introduite dans [149], donne une mesure de l'incertitude associée à la loi de probabilité p_X. En général, des informations sur cette loi sont disponibles (observations, jugements d'experts) et fournissent des contraintes à imposer sur la loi recherchée. Le principe du maximum d'entropie [74, 76] consiste alors à choisir comme modèle p_X la loi de probabilité maximisant cette mesure d'incertitude sur l'ensemble des lois satisfaisant les contraintes souhaitées. En d'autres termes, cela revient à choisir comme modèle celui qui prend uniquement en compte l'information disponible. Par exemple, si aucune information n'est disponible, la loi maximisant l'entropie est la loi uniforme sur $\mathcal{X}$.

Une situation classique correspond au cas où l'information disponible peut se traduire par les contraintes suivantes sur la mesure de probabilité :

$$\int_{\mathcal{X}} g_i(x)p_X(x)dx := E(g_i(X)) = d_i \quad i = 0...N_C \tag{IV.1}$$

avec $g_i : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$. En prenant $g_0(x) = 1$ et $d_0 = 1$, on impose que la loi de probabilité soit bien une mesure de masse unitaire. Le choix de fonctions $g_i(x) = x^i$ permet plus généralement d'imposer les moments de la variables X, obtenus à partir d'observations ou de jugements d'experts. Le principe du maximum d'entropie consiste alors à rechercher une loi p_X maximisant $\mathcal{E}(p_X)$ sous les contraintes (IV.1). En introduisant des multiplicateurs de Lagrange $\{\lambda_i\}_{i=0}^{N_C}$, le problème se ramène à la recherche du point selle du Lagrangien

$$H(p_X, \lambda_0, ..., \lambda_{N_C}) = \mathcal{E}(p_X) - \sum_{i=0}^{N_C} \lambda_i \left(\int_{\mathcal{X}} g_i(x)p_X(x)dx - d_i \right)$$

On montre alors que la loi de probabilité prend la forme

$$p_X(x) = exp(\sum_{i=0}^{N_C} \lambda_i g_i(x))$$

où les paramètres λ_i peuvent être déterminés par les contraintes (IV.1).

2.2 Statistique inférentielle

Les méthodes de statistique inférentielle tentent de modéliser la loi de probabilité d'une variable aléatoire X en se basant sur des échantillons $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{Q}$ de cette variable. Les approches classiques se placent dans le contexte de modèles paramétriques, pour lesquels une famille de lois de probabilité

paramétrées est choisie *a priori*. L'objectif de la statistique inférentielle est alors de fournir une estimation de ces paramètres à partir des échantillons. On rappelle ici deux méthodes permettant l'obtention d'une estimation des paramètres de la loi : le principe du maximum de vraisemblance et l'approche bayésienne.

2.2.1 Maximum de vraisemblance

Notons $p_X(\cdot|a)$ une famille de lois paramétrées par un ensemble de paramètres $a \in \mathcal{A}$. Une hypothèse de base en statistique inférentielle consiste à supposer que l'échantillon $\mathsf{x} = (x^{(1)}, \ldots, x^{(Q)}) \in \mathcal{X}^Q$ est une réalisation de $\mathsf{X} = (X_1, \ldots, X_Q)$, où les variables aléatoires X_k sont supposées indépendantes et de même loi de probabilité $p_X(\cdot|a)$. La vraisemblance $L(a;\mathsf{x})$ d'un ensemble de paramètres a, connaissant la réalisation x de X, est alors définie par :

$$L(a;\mathsf{x}) = p_{\mathsf{X}}(\mathsf{x}|a) \tag{IV.2}$$

Etant donnée l'hypothèse d'indépendance des variables X_k, on obtient l'expression classique de la vraisemblance :

$$L(a;\mathsf{x}) = \prod_{k=1}^{Q} p_X(x^{(k)}|a) \tag{IV.3}$$

Le principe du maximum de vraisemblance consiste alors à choisir comme estimateur $\hat{a}$ du paramètre a celui maximisant la vraisemblance :

$$\hat{a} = \underset{a \in \mathcal{A}}{argmax}\ L(a;\mathsf{x})$$

La résolution de problème peut être analytique pour certains types de lois. De manière générale, on pourra tenter de résoudre ce problème numériquement en utilisant un algorithme d'optimisation standard.

2.2.2 Inférence bayésienne

En inférence bayésienne [136, 53], les paramètres de la loi eux-mêmes sont considérés aléatoires[1]. Notons A une variable aléatoire à valeurs dans $\mathcal{A}$ représentant les paramètres aléatoires de la loi de X. Le premier point consiste à postuler une loi *a priori* $p_A(a)$ pour ces paramètres. Le choix de cette loi *a priori* est un des points délicats de l'inférence bayésienne et nécessite le plus souvent une information préalable sur le modèle à identifier. Un jugement d'expert peut généralement aider à faire ce choix ou sinon, on optera généralement pour un choix de loi "non informative". La connaissance des données, *i.e.* $\mathsf{X} = \mathsf{x}$, permet ensuite d'améliorer le modèle probabiliste des paramètres. On introduit alors la loi *a posteriori* des paramètres, définie comme la loi conditionnelle du paramètre sachant les données :

$$p_{A|\mathsf{X}}(a|\mathsf{x})$$

Connaissant cette loi *a posteriori*, on peut alors définir un estimateur ponctuel $\hat{a}$ des paramètres (classiquement la moyenne, mode ou médiane de la loi *a posteriori*) et même obtenir directement les incertitudes liées à cette estimation : variance, intervalles de confiance...

D'après la formule de Bayes, la loi *a posteriori* s'exprime de la manière suivante :

$$p_{A|\mathsf{X}}(a|\mathsf{x}) = \frac{p_{\mathsf{X}|A}(\mathsf{x}|a)p_A(a)}{p_{\mathsf{X}}(\mathsf{x})} \tag{IV.4}$$

où $p_{\mathsf{X}|A}(\mathsf{x}|a)$ n'est autre que la vraisemblance $L(a;\mathsf{x})$ du paramètre a, définie en (IV.2). La loi marginale $p_{\mathsf{X}}(\mathsf{x})$ des données est classiquement réécrite sous la forme

$$p_{\mathsf{X}}(\mathsf{x}) = \int_{\mathcal{A}} p_{\mathsf{X}|A}(\mathsf{x}|a)p_A(a)da$$

[1] la définition de paramètres aléatoires peut être vue comme une manière de quantifier une erreur de modélisation probabiliste (*i.e.* du choix du type de loi).

L'estimation de la loi *a posteriori* nécessite donc le calcul de $\int_{\mathcal{A}} p_{\mathsf{X}|A}(\mathsf{x}|a)p_A(a)da$, qui s'avère en pratique délicat d'un point de vue analytique ou numérique. Deux approches sont classiquement utilisées pour l'estimation numérique de la loi *a posteriori* : des techniques d'intégration numérique ou des techniques de simulation de Monte-Carlo. Parmi ces dernières, on peut citer les méthodes Markov-Chain Monte-Carlo (MCMC) dont le principe consiste à simuler une chaîne de Markov dont la loi stationnaire est la loi *a posteriori* [156]. L'algorithme classique de Metropolis-Hastings [111, 72] permet notamment de simuler cette chaîne.

3 Représentation fonctionnelle des incertitudes et méthodes d'identification

On présente ici les méthodes de représentation fonctionnelle des incertitudes dans le cas où l'on cherche à identifier la loi d'un vecteur aléatoire $\mathbf{X}$, à valeur dans $\mathbb{R}^n$, en connaissant un ensemble d'échantillons $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k=1}^{Q}$ de ce vecteur.

3.1 Décomposition de type chaos polynômial

On considère que $\mathbf{X}$ est un vecteur aléatoire du second ordre et qu'il existe un mapping $\mathbf{g} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ tel que $\mathbf{X} = \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi})$, où $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \ldots, \xi_m)$ est un vecteur aléatoire de $\mathbb{R}^m$ de loi de probabilité connue $P_{\boldsymbol{\xi}}$, de support $\boldsymbol{\Xi} \subset \mathbb{R}^m$. On note $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$ l'espace de probabilité de dimension m défini par $\boldsymbol{\xi}$. Le vecteur $\mathbf{X}$ admet alors un développement sur le chaos (au sens généralisé) [155] qui s'écrit :

$$\mathbf{X}(\theta) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{J}^m} \mathbf{X}_{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}(\theta)) \tag{IV.5}$$

où $\{H_{\boldsymbol{\alpha}}\}_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{J}^m}$ est une base Hilbertienne de $L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})$, muni du produit scalaire usuel $< \cdot, \cdot >_{L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})}$. Les coefficients $\mathbf{X}_{\boldsymbol{\alpha}}$ de la décomposition peuvent alors être simplement définis comme la projection L^2 de $\mathbf{g}$ sur les fonctions de base $H_{\boldsymbol{\alpha}}$: $\forall \boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{J}^m$,

$$\mathbf{X}_{\boldsymbol{\alpha}} =< \mathbf{g}, H_{\boldsymbol{\alpha}} >_{L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}})} = E(\mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\boldsymbol{\Xi}} \mathbf{g}(\mathbf{y}) H_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y}) dP_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{y}) \tag{IV.6}$$

Sans perte de généralité, on supposera que les variables aléatoires ξ_i sont indépendantes et identiquement distribuées, de loi de probabilité P_ξ ayant pour support $\Xi \subset \mathbb{R}$. Dans le cas d'une représentation sur chaos polynômial, les fonctions de base sont des polynômes multi-dimensionnels. En notant $\mathcal{J}^m = \mathbb{N}^m$ l'ensemble des multi-indices de dimension m, les fonctions $H_{\boldsymbol{\alpha}}$ peuvent s'écrire :

$$H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) = h_{\alpha_1}(\xi_1) \ldots h_{\alpha_m}(\xi_m) \tag{IV.7}$$

où les $\{h_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ forment une base de polynômes orthonormés de $L^2(\Xi, dP_\xi)$. Une représentation approchée du vecteur aléatoire sera alors recherchée sous la forme d'une décomposition tronquée sur un chaos polynômial de degré p :

$$\mathbf{X}(\theta) \approx \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{J}_p^m} \mathbf{X}_{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}(\theta)) \tag{IV.8}$$

où $\mathcal{J}_p^m = \{\boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{J}^m = \mathbb{N}^m \ ; \ |\boldsymbol{\alpha}| \leqslant p\}$. On notera par la suite $\mathcal{J}_p^m = \{\boldsymbol{\alpha}_0, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_P\}$, avec $P + 1 = \frac{(m+p)!}{m!\,p!}$. Par convention, le premier multi-indice $\boldsymbol{\alpha}_0 = (0, \ldots, 0)$ est associé au polynôme constant unitaire $H_{\boldsymbol{\alpha}_0} = 1$.

Remarque IV.1

> *On notera que la dimension m du germe $\boldsymbol{\xi}$ peut a priori être prise différente de n. Dans le cas de variables X_i indépendantes, le choix $m = n$ apparaît clairement judicieux. PAr contre, dans le cas de variables dépendantes, une dimension $m < n$ peut être suffisante. Le choix de m doit être optimisé en fonction des données [42].*

Remarque IV.2

Il peut arriver en pratique que la représentation des variables aléatoires X_i nécessite des développements sur des bases polynômiales différentes. On se reportera au chapitre I pour une description détaillée des bases fonctionnelles classiques.

3.2 Identification par les techniques d'inférence classiques

Le problème d'identification de la loi du vecteur aléatoire $\mathbf{X}$ est donc ramené à l'identification des coefficients $\{\mathbf{X}_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{J}_p^m}$ de la décomposition (IV.8). Ces coefficients constituent l'ensemble des paramètres à identifier à partir des données. Les techniques de statistique inférentielle présentées dans le paragraphe 2 peuvent alors être utilisées. Dans [59], les auteurs appliquent une approche bayésienne pour l'identification des coefficients (dans le cas particulier d'une seule variable aléatoire à identifier). Cette approche permet l'obtention d'informations complémentaires sur l'estimation des coefficients : variances, intervalles de confiance... On présente ici une stratégie basée sur le principe du maximum de vraisemblance, introduite dans [42]. On discutera notamment de la résolution du problème d'optimisation associé, pour laquelle on propose une stratégie de résolution adaptée.

3.2.1 Conservation des premiers moments des échantillons - contraintes sur les coefficients

En pratique, les deux premiers moments des échantillons sont des quantités statistiques relativement bien estimées que l'on peut chercher à conserver dans le processus d'identification. Connaissant la matrice de covariance et la moyenne des échantillons, on est alors capable, par une transformation linéaire classique, de se ramener à l'identification d'un vecteur aléatoire de variables centrées, normalisées et décorrélées. Par la suite, $\mathbf{X}$ désignera ce nouveau vecteur et $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k=1}^Q$ les réalisations associées. La conservation de l'espérance des échantillons impose alors la contrainte suivante sur le premier coefficient de la décomposition : $E(\mathbf{X}) = \mathbf{X}_{\boldsymbol{\alpha}_0} = 0$. En notant $\mathbf{A} = (\mathbf{X}_{\alpha_1} \dots \mathbf{X}_{\boldsymbol{\alpha}_P})^T \in \mathbb{R}^{P\times n}$ la matrice dont les lignes sont les coefficients restant à déterminer, la conservation de la matrice de corrélation implique la contrainte suivante sur la matrice $\mathbf{A}$:

$$E(\mathbf{X}\mathbf{X}^T) = \sum_{i=1}^{P} \mathbf{X}_{\alpha_i}\mathbf{X}_{\alpha_i}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{I}_n \tag{IV.9}$$

L'identification des coefficients, sous la contrainte de préservation des deux premiers moments des échantillons, se ramène donc à l'identification d'une matrice orthogonale $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{P\times n}$. L'ensemble des matrices orthogonales dans $\mathbb{R}^{P\times n}$ est la variété de Stiefel compacte, notée $\mathbb{S}(P, n)$.

3.2.2 Principe du maximum de vraisemblance

La fonction de vraisemblance des paramètres $\mathbf{A} \in \mathbb{S}(P, n)$ est définie par

$$L(\mathbf{A}) = \prod_{k=1}^{Q} p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}^{(k)}|\mathbf{A}), \tag{IV.10}$$

où les $\mathbf{x}^{(k)}$ sont les échantillons et $p_{\mathbf{X}}(\cdot|\mathbf{A})$ est la loi de probabilité jointe du vecteur $\mathbf{X}$, représenté par sa décomposition sur le chaos. L'estimation de la densité de probabilité jointe de vecteurs aléatoires [147] est un problème délicat, en particulier dans le cas où on dispose de peu d'échantillons. Par conséquent, il a été proposé dans [42] d'utiliser une fonction de vraisemblance approchée (ou pseudo-vraisemblance) :

$$L(\mathbf{A}) = \prod_{k=1}^{Q}\prod_{i=1}^{n} p_{X_i}(x_i^{(k)}|\mathbf{A}),$$

dont l'estimation ne nécessite que l'évaluation de densités marginales. En pratique, pour des raisons numériques, on peut utiliser l'opposé du logarithme de la vraisemblance :

$$f(\mathbf{A}) = -log(L(\mathbf{A})) = -\sum_{k=1}^{Q}\sum_{i=1}^{n} log(p_{X_i}(x_i^{(k)}|\mathbf{A})).$$

Finalement, un estimateur de la matrice des coefficients $\mathbf{A}$ est défini par le problème d'optimisation sur une variété de Stiefel compacte :

$$\hat{\mathbf{A}} = \underset{\mathbf{A}\in\mathbb{S}(P,n)}{argmin}\ f(\mathbf{A}) \tag{IV.11}$$

Remarque IV.3

Les densités de probabilité marginales peuvent être estimées numériquement par une méthode à noyau ("kernel density estimation") [55]. Notons $\{\tilde{x}_i^{(s)}\}_{s=1}^{\tilde{Q}}$ un ensemble de $\tilde{Q}$ réalisations indépendantes de X_i, générées à partir d'une décomposition sur le chaos ayant pour coefficients $\mathbf{A}$. On peut alors évaluer

$$p_{X_i}(x_i^{(k)}|\mathbf{A}) \approx \frac{1}{\tilde{Q}}\sum_{s=1}^{\tilde{Q}}\frac{1}{\delta}K\left(\frac{x_i^{(k)}-\tilde{x}_i^{(s)}}{\delta}\right)$$

où K est une fonction noyau et δ une largeur de bande.

3.3 Résolution du problème de maximum de vraisemblance

Le problème (IV.11) est un problème d'optimisation dont la dimension peut être très grande. De plus, sa résolution est rendue difficile par la nature de la fonction f à optimiser. En particulier, f peut présenter des minima locaux et on peut observer en pratique que certains de ces minima conduisent à de mauvaises représentations probabilistes de $\mathbf{X}$. Une procédure d'optimisation globale est donc nécessaire. Dans [42], un algorithme simple de random search est proposé afin d'explorer globalement la variété de Stiefel.

Ici, on propose d'utiliser un algorithme de random search global afin de trouver plusieurs initialisations potentielles d'un algorithme de descente classique. Les tirages aléatoires de l'algorithme de random search peuvent être obtenus à partir d'une mesure uniforme sur la variété de Stiefel [49]. En pratique, on commence par générer un échantillon $\widetilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{P\times n}$ d'une matrice aléatoire dont les composantes sont indépendantes et identiquement distribuées selon la loi normale $N(0,1)$. On calcule ensuite l'échantillon souhaité $\mathbf{A} = \widetilde{\mathbf{A}}(\widetilde{\mathbf{A}}^T\widetilde{\mathbf{A}})^{-1/2}$.

Afin de pouvoir utiliser une plus large classe d'algorithmes de descente et également afin de réduire la taille du problème d'optimisation, le problème d'optimisation peut être reformulé comme un problème d'optimisation sans contrainte. Cela est rendu possible par une paramétrisation de la variété de Stiefel compacte $\mathbb{S}(P,n)$. Notons $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbb{R}^d$ les paramètres de cette paramétrisation, où $d = Pn - n(n+1)/2$ est la dimension de la variété, et T le mapping

$$T : \boldsymbol{\varphi} \in \mathbb{R}^d \mapsto T(\boldsymbol{\varphi}) \in \mathbb{S}(P,n),$$

Le problème d'optimisation sans contrainte peut alors être formulé de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\varphi} = \underset{\boldsymbol{\varphi}\in\mathbb{R}^d}{argmin}\ f(T(\boldsymbol{\varphi})) \tag{IV.12}$$

Une paramétrisation possible, présentée en annexe C, utilise une exponentielle de matrice. En pratique, on peut parfois observer une bonne convergence des algorithmes sans contrainte là où les algorithmes avec contraintes présentent des problèmes de convergence.

Remarque IV.4

La fonction f peut être très irrégulière dans certaines régions de $\mathbb{S}(P,n)$ et peut ainsi causer une non-convergence des algorithmes d'optimisation. En fait, ces régions correspondent à des grandes valeurs de f, les irrégularités provenant d'une mauvaise estimation numérique des faibles valeurs de vraisemblance. Cette évaluation peut être améliorée en augmentant le nombre d'échantillons $\widetilde{Q}$ dans l'estimation de la vraisemblance par les méthodes à noyau (voir remarque IV.3). En pratique, comme ces zones ne sont pas des zones d'intérêt, on préférera opérer plus d'itérations de l'algorithme de random search afin de fournir des initialisations des algorithmes de descente en dehors

de ces zones.

Remarque IV.5

On peut aisément montrer que la fonction $f(\mathbf{A})$ admet certaines symétries par rapport aux coefficients $\mathbf{A}$. Cela provient des propriétés de symétrie des décompositions sur polynômes du chaos, pour lesquelles différents jeux de coefficients peuvent conduire à une même loi de probabilité du vecteur aléatoire. Il en résulte que le problème d'optimisation (IV.11) peut admettre plusieurs solutions.

Remarque IV.6

Des algorithmes d'optimisation sur les variétés de Stiefel existent dans la littérature [47]. Notamment, il existe des algorithmes à gradients tenant compte de la géométrie spécifique (Riemannienne) de la variété. L'utilisation de tels algorithmes pourrait être envisagée dans notre cas.

3.4 Méthode de projection basée sur la fonction de distribution empirique des échantillons

Les techniques d'inférence classique (maximum de vraisemblance, approche bayésienne) s'avèrent relativement coûteuses et conduisent à des difficultés numériques. On présente ici une alternative efficace pour le calcul des décompositions sur le chaos généralisé. Cette méthode est très efficace dans le cas où on cherche à identifier une seule variable à valeur dans $\mathbb{R}$ et peut être étendue au cas de plusieurs variables.

3.4.1 Cas d'une seule variable à identifier

On s'intéresse au cas de l'identification d'une seule variable aléatoire X à valeur dans $\mathcal{X}$. Notons F_X sa fonction de distribution cumulée (CDF) et p_X sa densité de probabilité (PDF). On introduit une variable aléatoire ξ de loi de probabilité P_ξ, de PDF p_ξ et de CDF F_ξ. La variable aléatoire $F_X^{-1} \circ F_\xi(\xi)$ admet la même loi de probabilité que X. L'inverse de la CDF F_X^{-1} est définie de manière unique par

$$F_X^{-1}(y) = \inf\{x \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}; F_X(x) > y\}, \tag{IV.13}$$

où par convention on a posé $\inf\{\emptyset\} = \sup\{x \in \mathcal{X}\}$. On admettra alors que la variable aléatoire X peut être exprimée de la manière suivante :

$$X = F_X^{-1} \circ F_\xi(\xi) := g(\xi) \tag{IV.14}$$

où $g \in L^2(\Xi, dP_\xi)$ est le mapping qui avait été introduit dans le paragraphe 3.1 (avec $m = 1$ et $n = 1$). Une décomposition de X pourra donc être recherchée sous la forme

$$X = \sum_{i=0}^{p} X_i h_i(\xi) \tag{IV.15}$$

où $\{h_i\}_{i=0}^{\infty}$ forme une base de polynômes orthonormés de $L^2(\Xi, dP_\xi)$ et où les X_i sont les composantes de la fonction g sur cette base, définies par

$$X_i =< g, h_i >_{L^2(\Xi, dP_\xi)} = E(g(\xi)h_i(\xi)) = \int_\Xi F_X^{-1}(F_\xi(y))h_i(y)p_\xi(y)\, dy \tag{IV.16}$$

Bien sûr, la fonction F_X n'est pas connue puisqu'on cherche justement à l'identifier. Par contre, cette fonction peut être estimée à partir des échantillons. Par exemple, on peut utiliser une CDF empirique de Kaplan-Meier $\widetilde{F}_X \approx F_X$. Cette estimation est connue en un ensemble de points ordonnés $\{x_k\}_{k=1}^n$, tels que $0 = \widetilde{F}_X(x_1) < ... < \widetilde{F}_X(x_n) = 1$. L'inverse de F_X peut alors être estimée par

$$F_X^{-1}(y) \approx \widetilde{F}_X^{-1}(y) = \inf\{x \in \{x_k\}_{k=1}^n; \widetilde{F}_X(x) > y\} \tag{IV.17}$$

Les coefficients de la décomposition de X peuvent alors être estimés numériquement en utilisant une méthode d'intégration numérique :

$$X_i =< g, h_i >_{L^2(\Xi, dP_\xi)} = \int_\Xi F_X^{-1}(F_\xi(x))h_i(x)p_\xi(x)\,dx \approx \sum_{k=1}^{K} \omega_k \widetilde{F}_X^{-1}(F_\xi(y_k))h_i(y_k) \tag{IV.18}$$

où les ω_k sont les poids d'intégration et les y_k sont les points d'intégration. En pratique, on utilise une méthode de quadrature de Gauss associée à la mesure p_ξ (voir section 2.1 du chapitre I).

Illustration

On considère une variable aléatoire X lognormale de moyenne 1 et d'écart type 0.3. On génère Q échantillons de cette variable et on cherche à identifier une décomposition sur le chaos polynômial d'Hermite de degré p. On compare une approche par projection empirique (P) (avec une quadrature à 10 points de Gauss) avec une approche par maximum de vraisemblance (ML). L'approche ML nécessite de résoudre un problème d'optimisation sur l'hypersphère $\mathbb{S}(p, 1)$. Avec une vision paramétrée de cette variété, on se ramène à un problème d'optimisation sur $p - 1$ variables (voir annexe C). Le tableau IV.1 compare les deux approches en estimant la vraisemblance après identification. L'approche ML devrait en principe fournir une vraisemblance plus élevée, si le problème d'optimisation est résolu avec une bonne précision. Cependant, on observe ici que l'approche P donne des valeurs de vraisemblance relativement comparables et mêmes légèrement meilleures. On note que l'approche par projection se comporte relativement bien pour un plus faible nombre d'échantillons.

	Q=100		Q=1000	
	ML	P	ML	P
p=1	-20.8	-20.4	-160.5	-151.8
p=2	-21.0	-20.4	-103.2	-102.3
p=4	-20.7	-20.5	-98.2	-97.7
p=6	-20.5	-20.5	-97.8	-96.5

Tab. IV.1 – Comparaison entre approche par Maximum de vraisemblance (ML) et méthode de projection empirique (P) : comparaison des valeurs de $log(L)$ obtenues pour différents degrés de chaos et pour deux tailles d'échantillons ($Q = 100$ ou $Q = 1000$)

Sur la figure IV.1, on montre les PDF des décompositions identifiées par les deux méthodes, pour différents degrés de chaos. On observe que l'identification est très raisonnable avec l'une ou l'autre des méthodes. On notera également que pour un faible nombre d'échantillons, un degré élevé de chaos semble inutile (pas d'amélioration significative de la vraisemblance).

En pratique, avec l'approche ML, la résolution du problème d'optimisation est très coûteuse. La recherche d'un optimum global peut nécessiter plusieurs appels à un algorithme de descente avec des initialisations différentes. Pour l'approche P, l'évaluation des décompositions est quasi instantanée (temps de calcul négligeable).

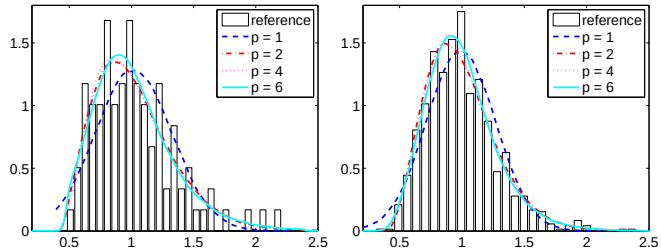
3.4.2 Extension au cas de plusieurs variables aléatoires

Une extension de la méthode ci-dessus est possible dans le cas de plusieurs variables aléatoires. Cette extension est basée sur une construction du mapping $\mathbf{g}$ (défini dans le paragraphe 3.1) utilisant la transformation de Rosenblatt [137]. Par exemple, dans le cas de deux variables aléatoires, le mapping souhaité $\mathbf{X} = \mathbf{g}(\boldsymbol{\xi})$ s'obtient par la formule suivante :

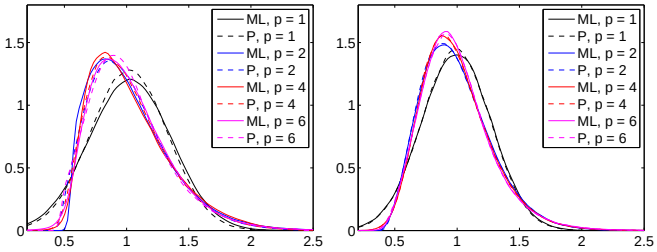
$$X_1 = F_{X_1}^{-1}(F_{\xi_1}(\xi_1)) := g_1(\xi_1) \tag{IV.19}$$

$$X_2 = F_{X_2|X_1}^{-1}(F_{\xi_2}(\xi_2)|g_1(\xi_1)) := g_2(\xi_1, \xi_2) \tag{IV.20}$$

qui fait intervenir la fonction de distribution marginale F_{X_1} ainsi que la fonction de distribution conditionnelle $F_{X_2|X_1}$. En pratique, ces fonctions de distribution sont approchées par les fonctions de distribution empiriques obtenues à partir d'échantillons. Le calcul des coefficients de la décomposition de $\mathbf{X}$ nécessite alors d'effectuer une intégration numérique classique sur un domaine 2D. La



(a) Q=100, P (b) Q=1000, P



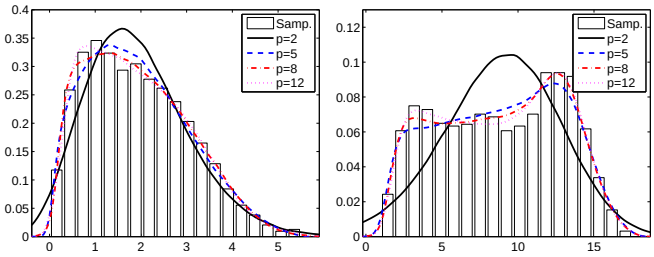
(c) Q=100, P versus ML (d) Q=1000, P versus ML

FIG. IV.1 – PDF des décompositions identifiées par projection empirique (a,b) et comparaison avec celles identifiées par maximum de vraisemblance (c,d)

difficulté se situe dans l'évaluation de la CDF conditionnelle empirique, qui nécessite en pratique un nombre important d'échantillons. Dans le cas où peu d'échantillons sont disponibles, l'application de la méthodologie au cas ND semble donc irréaliste.

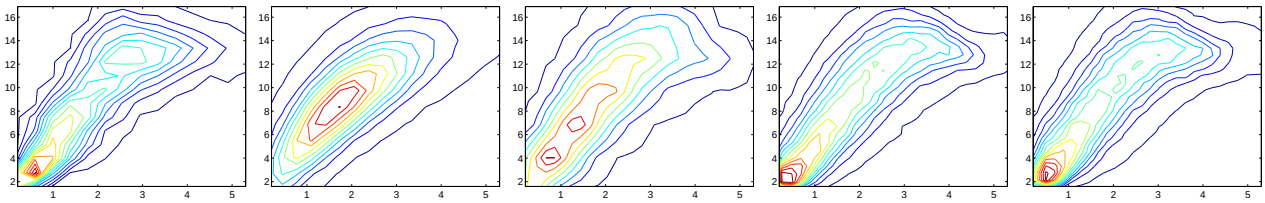
Illustration

Cette stratégie a été appliquée au cas de deux variables aléatoires pour la modélisation probabiliste d'un état de mer, caractérisé par un couple de variables aléatoires hauteur-période (H-T). Les échantillons, en grand nombre ($Q = 2183$), proviennent de données satellite. On applique ici la méthode de projection empirique sur un chaos polynômial d'Hermite de degré p en dimension 2 (avec une quadrature de Gauss 2D à 20×20 points de Gauss). Le nombre de termes à identifier dans le développement sur le chaos est 6, 21, 45 ou 91 respectivement pour $p = 2$, 5, 8 ou 12.
La figure IV.2 illustre les lois marginales de H et T obtenues pour différents degrés de chaos. La figure IV.3 illustre la loi jointe obtenue pour différents degrés de chaos. On observe ici une très bonne adéquation entre les PDF des échantillons et les PDF identifiées, avec une très bonne représentation de la structure de dépendance entre H et T. Cela nécessite cependant un haut degré de chaos (8 à 12). Avec la méthode de projection utilisée, l'identification du développement sur le chaos est très rapide. L'identification du développement à $p = 12$ avec une méthode de maximum de vraisemblance nécessiterait la résolution d'un problème d'optimisation sur une variété de Stiefel de dimension 177. Il apparaît que ce problème d'optimisation est très coûteux et très difficile à résoudre.



(a) p_H (b) p_T

FIG. IV.2 – PDF marginales de la hauteur de houle H et de la période de houle T. Méthode de projection empirique sur un chaos polynômial d'Hermite de degré $p = 2$, 5, 8 ou 12 en dimension 2.



(a) Samples (b) $p = 2$ (c) $p = 5$ (d) $p = 8$ (e) $p = 12$

FIG. IV.3 – PDF jointe de la hauteur H et de la période T de houle. Méthode de projection empirique sur un chaos polynômial d'Hermite de degré $p = 2$, 5, 8 ou 12 en dimension 2.

4 Identification de lois multi-modales par développement conditionnel sur la chaos polynomial

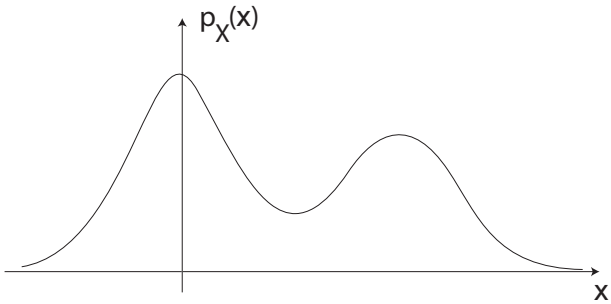


FIG. IV.4 – Densité de probabilité multi-modale

4.1 Limite du chaos polynomial classique

Une variable aléatoire X du second ordre peut *a priori* être développée sur un chaos polynomial classique. En supposant qu'il existe une fonction g telle $X = g(\xi)$, avec ξ une variable aléatoire donnée et $g \in L^2(\Xi, dP_\xi)$, ce développement tronqué au degré p s'écrit :

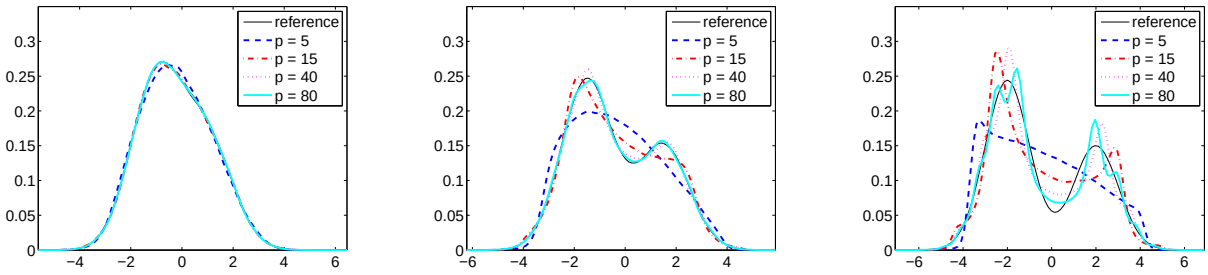
$$X = \sum_{i=0}^{p} X_i h_i(\xi), \quad X_i =< g, h_i >_{L^2(\Xi, dP_\xi)}$$

où $\{h_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ forme une base de polynômes orthonormés de $L^2(\Xi, dP_\xi)$. On observe classiquement qu'un manque de régularité de la fonction g entraîne une mauvaise convergence en p de la décomposition. C'est notamment le cas lorsqu'on cherche à décomposer une variable aléatoire X uniforme sur un chaos gaussien (ξ gaussienne). Une première solution consiste à choisir comme germe du chaos ξ une variable aléatoire plus adaptée [171], ce qui conduit à choisir une autre base de polynômes orthonormés.

Ce problème de convergence apparaît également pour le cas où l'on cherche à représenter une variable X multi-modale. Dans ce cas, les choix classiques de germes s'avèrent inappropriés. Illustrons cela sur un exemple. Prenons le cas d'une variable aléatoire X s'écrivant de la manière suivante :

$$X(\theta) = \begin{cases} a(\theta) - \delta & si \quad b(\theta) < \gamma \\ a(\theta) + \delta & si \quad b(\theta) > \gamma \end{cases} \tag{IV.21}$$

où $a, b \in N(0, 1)$ sont deux variables aléatoires gaussiennes indépendantes et où γ et δ sont des constantes. La figure IV.5 illustre la convergence par rapport à p des densités de probabilité pour différentes valeurs de δ (paramètre de séparation des modes) et pour $\gamma = 0.3$ (contrôlant la "probabilité de chaque mode"). On observe que plus les modes sont séparés et plus le taux de convergence de la décomposition se détériore. Pour le dernier cas, une bonne modélisation de la variable aléatoire X nécessitera un ordre de chaos très grand (≈ 100).



(a) $\delta = 1$ (b) $\delta = 1.5$ (c) $\delta = 2$

FIG. IV.5 – Illustration de la convergence des décompositions sur le chaos pour différentes lois multi-modales. Influence du paramètre de séparation des modes δ.

Si on utilise de telles représentations pour modéliser les variables aléatoires multi-modales en entrée d'un modèle physique, la recherche d'une représentation de la solution sur ces mêmes bases de fonction nécessitera un développement de degré équivalent. Les coûts de calcul de ces représentations seront alors prohibitifs avec une approche par projection non-intrusive (nécessité d'une quadrature précise et donc de nombreuses résolutions déterministes) ou une approche de Galerkin (dimension très grande des espaces d'approximation).

Dans la suite, on propose une méthode permettant une représentation précise des variables multi-modales sur un chaos généralisé de faible degré.

4.2 Mélange de lois de probabilité

Notons m le nombre de modes d'une variable aléatoire X (qui peut être défini par le nombre de maxima de la densité de probabilité p_X). On suppose qu'il existe un ensemble complet d'événements $\{\Theta_i\}_{i=1}^m$ sur Θ, *i.e.*

$$\bigcup_{i\in I} \Theta_i = \Theta, \quad \Theta_i \cap \Theta_j = \emptyset \ \text{ pour } \ i \neq j \tag{IV.22}$$

tel que la loi de probabilité de la variable aléatoire "X sachant Θ_i", notée $X|\Theta_i$, est une loi uni-modale. La loi de probabilité de X peut alors être définie par : $\forall B \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}}$,

$$P_X(B) = P(X^{-1}(B)) = \sum_{i=1}^{m} P(X^{-1}(B)|\Theta_i)P(\Theta_i) = \sum_{i=1}^{m} P_{X|\Theta_i}(B)P(\Theta_i), \tag{IV.23}$$

et sa fonction de densité de probabilité par :

$$p_X(x) = \sum_{i=1}^{m} p_{X|\Theta_i}(x)P(\Theta_i) \tag{IV.24}$$

La loi de probabilité de X apparaît comme un mélange des lois de probabilité des variables aléatoires $Y_i = X|\Theta_i$ (somme pondérée de lois de probabilité) (voir illustration figure IV.4 pour une variable aléatoire à 2 modes). L'identification de X est alors remplacée par l'identification des variables Y_i, qui sont supposées admettre de bonnes représentations sur chaos polynômial de faible degré. Les questions sont alors : comment définir la partition d'événements $\{\Theta_i\}_{i=1}^m$, quel type de représentation sur chaos utiliser et comment identifier ces représentations à partir d'échantillons ?

4.3 Définition des Θ_i par séparation des échantillons

On introduit une séparation artificielle des échantillons en m ensembles d'échantillons uni-modaux, ce qui permet de construire la partition abstraite désirée de Θ. Notons les échantillons $\{x^{(k)}\}_{k=1}^Q$. On suppose que la PDF empirique permet à l'utilisateur de déterminer de manière approximative un

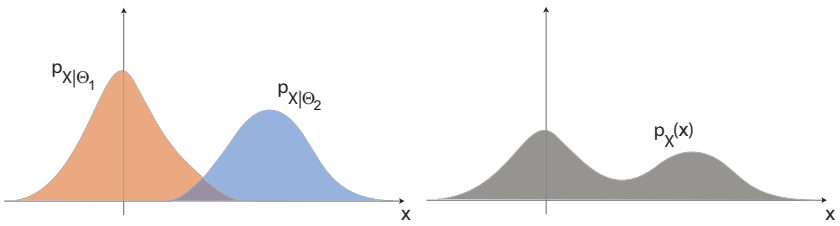


FIG. IV.6 – Mélange de fonctions de densité de probabilité

ensemble de points $\{x_i\}_{i=1}^{m-1}$ séparant les échantillons en m ensembles d'échantillons uni-modaux, définis par

$$\mathcal{X}_i = \{x^{(k)}, k \in \{1 \dots Q\}; x^{(k)} \in [x_{i-1}, x_i)\}, \quad i \in \{1 \dots m\}$$

où par convention $x_0 = -\infty$ et $x_m = +\infty$. La figure IV.7 illustre cette séparation. Θ_i est alors défini de manière abstraite comme étant l'événement conduisant aux échantillons $\mathcal{X}_i$. La probabilité de cet événement peut être estimée par

$$P(\Theta_i) = Card(\mathcal{X}_i)/Q$$

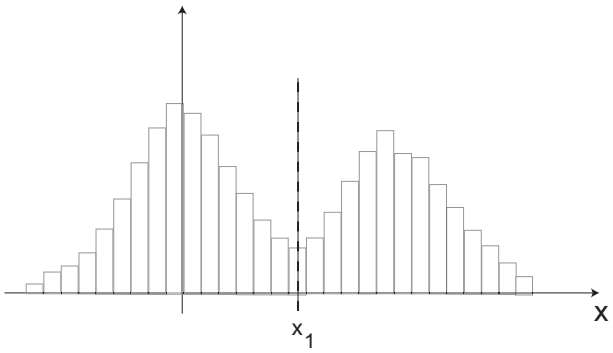


FIG. IV.7 – Séparation des échantillons en 2 ensembles d'échantillons uni-modaux

4.4 Représentation sur chaos généralisé

Pour définir Θ_i, on introduit une partition de $[0, 1)$ définie par les intervalles

$$B_i = [z_{i-1}, z_i), \quad i = 1 \dots m, \tag{IV.25}$$

où $0 = z_0 < z_1 < \dots < z_m = 1$. On introduit alors une variable aléatoire uniforme $\xi_1 \in U(0, 1)$ et on définit

$$\Theta_i = \xi_1^{-1}(B_i) := \{\xi_1 \in B_i\}, \quad i = 1 \dots m, \tag{IV.26}$$

tel que pour $i = 1 \dots m$,

$$P(\Theta_i) = P_{\xi_1}(B_i) = z_i - z_{i-1}. \tag{IV.27}$$

Notons maintenant ξ_2 une autre variable aléatoire, indépendante de ξ_1. En posant $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2)$, on définit un espace de probabilité de dimension 2 associé $(\boldsymbol{\Xi}, \mathcal{B}_{\boldsymbol{\Xi}}, P_{\boldsymbol{\xi}})$, avec $\boldsymbol{\Xi} = \Xi_1 \times \Xi_2$ et $P_{\boldsymbol{\xi}} = P_{\xi_1} \otimes P_{\xi_2}$. La variable aléatoire X est alors vue comme une fonction de $\boldsymbol{\xi}$, définie par

$$X(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^{m} Y_i(\xi_2) I_{B_i}(\xi_1)$$

où I_{B_i} est la fonction indicatrice de l'événement B_i. En supposant que $X \in L^2(\boldsymbol{\Xi}, dP_{\boldsymbol{\xi}}) = L^2(\Xi_1, dP_{\xi_1}) \otimes L^2(\Xi_2, dP_{\xi_2})$, une représentation de X peut être cherchée sur un chaos généralisé qui s'écrit :

$$X = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=0}^{\infty} X_{i,j} h_j(\xi_2) I_{B_i}(\xi_1) \tag{IV.28}$$

où les h_j forment une base de polynômes orthonormés de $L^2(\Xi_2, dP_{\xi_2})$. Pour i donné, $\sum_{j=0}^{\infty} X_{i,j} h_j(\xi_2)$ apparaît comme la décomposition sur chaos polynômial de la variable aléatoire conditionnelle $Y_i = X|\Theta_i$. Les coefficients de la décomposition de X sont définis par

$$X_{i,j} = \frac{1}{E((I_{B_i} h_j)^2)} E(X I_{B_i} h_j) = \frac{1}{P(\Theta_i)} E(X I_{B_i} h_j) \tag{IV.29}$$

$$= \frac{1}{P(\Theta_i)} \int_{\Xi_1 \times \Xi_2} X(y_1, y_2) I_{B_i}(y_1) h_j(y_2) p_{\xi_2}(y_2) dy_1 dy_2 \tag{IV.30}$$

$$= \int_{\Xi_2} Y_i(y_2) h_j(y_2) p_{\xi_2}(y_2) dy_2 \tag{IV.31}$$

4.5 Identification de la décomposition à partir des échantillons

On propose ici de développer une méthode de projection utilisant les fonctions de distribution de probabilité empiriques. La variable aléatoire conditionnelle $X|\Theta_i = Y_i$ peut être exprimée en fonction de ξ_2 de la manière suivante :

$$Y_i(\xi_2) = F^{-1}_{X|\Theta_i} \circ F_{\xi_2}(\xi_2)$$

La fonction de distribution de probabilité $F_{X|\Theta_i}$ (ou CDF) peut être simplement obtenue à partir de échantillons $\mathcal{X}_i$. Notons $\widetilde{F}_{X|\Theta_i}$ la CDF empirique obtenue à partir de $\mathcal{X}_i$ et $\widetilde{F}^{-1}_{X|\Theta_i}$ son inverse. Les coefficients de la décomposition de X peuvent alors être estimés à partir d'une quadrature numérique classique :

$$\begin{aligned} X_{i,j} &= \int_{\Xi_2} Y_i(y_2) h_j(y_2) p_{\xi_2}(y_2) dy_2 \\ &\approx \int_{\Xi_2} \widetilde{F}^{-1}_{X|\Theta_i}(F_{\xi_2}(y_2)) h_j(y_2) p_{\xi_2}(y_2) dy_2 \\ &\approx \sum_{k=1}^{N} \omega_k \widetilde{F}^{-1}_{X|\Theta_i}(F_{\xi_2}(y_{2,k})) h_j(y_{2,k}) \end{aligned} \tag{IV.32}$$

où les ω_k sont les poids d'intégration et les $y_{2,k}$ sont les points d'intégration. En pratique, on pourra utiliser une quadrature de Gauss associée à la mesure p_{ξ_2}.

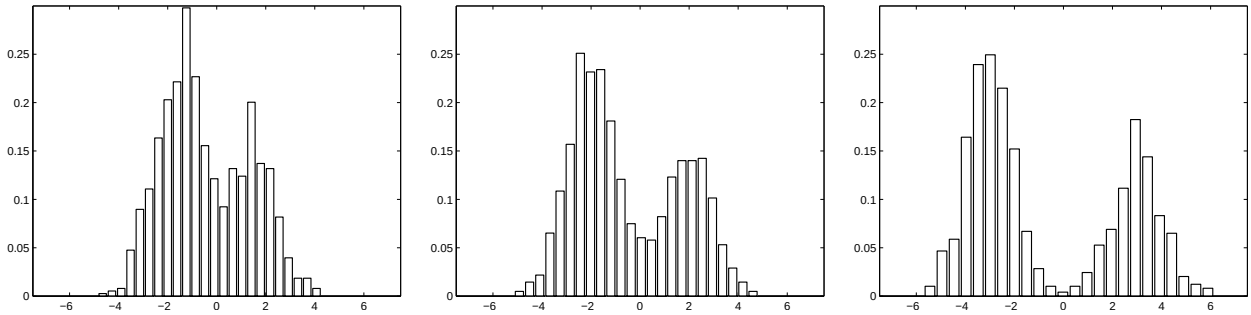
Remarque IV.7 (*Autres méthodes d'estimation*)

> *Pour l'identification des coefficients* $\mathbf{a} = \{X_{i,j}; i = 1 \dots m, j = 0 \dots p\} \in \mathbb{R}^{m(p+1)}$ *de la décomposition, l'utilisation d'une autre méthode est également possible : maximum de vraisemblance, méthode d'inférence bayésienne. Ces méthodes, comparées à l'approche par projection conditionnelle proposée, conduisent cependant à un très grand coût de calcul.*

4.6 Illustrations

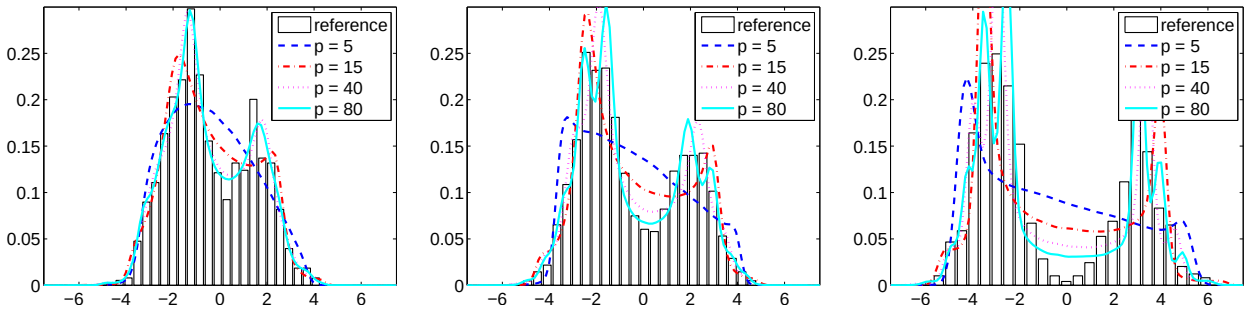
Exemple 1

On reprend l'exemple de la section 4.1 correspondant à une variable aléatoire bi-modale. On teste 3 cas, correspondant à $\gamma = 0.3$ et respectivement $\beta = 1.5$, 2 et 3. Pour chaque cas, on génère $Q = 1,000$ échantillons. Les PDF empiriques sont illustrées sur la figure IV.8. Sur la figure IV.9, on présente les PDF obtenues par identification sur un chaos polynômial gaussien classique. On observe la mauvaise convergence du chaos quel que soit le cas étudié. Cette mauvaise convergence est d'autant plus marquée que les modes sont séparés. On teste alors la décomposition conditionnelle avec différents degrés de chaos. Une séparation artificielle des échantillons est opérée en repérant visuellement le minimum local de la PDF empirique (figure IV.8). Pour les trois cas, on choisit respectivement $x_1 = 0$, 0.2 et 0 pour valeur de séparation. On observe sur la figure IV.10 que la représentation proposée est très bonne, même pour des faibles degrés de développement.



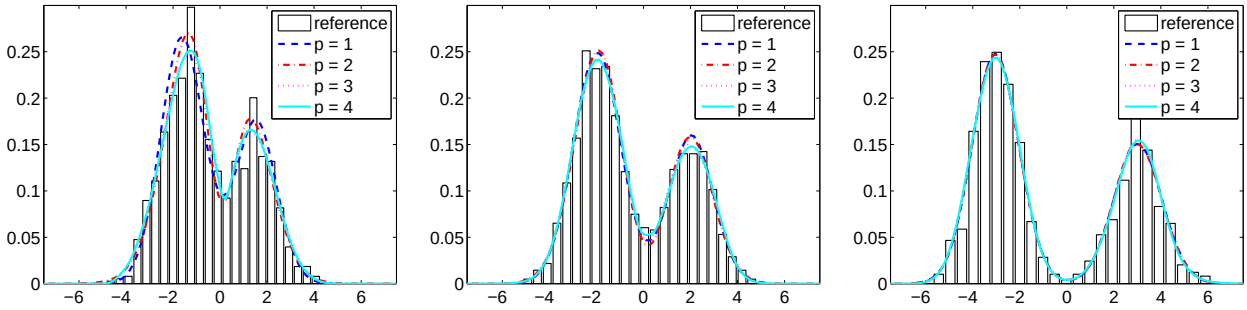
(a) $\delta = 1.5$ (b) $\delta = 2$ (c) $\delta = 3$

FIG. IV.8 – Exemple 1 : PDF empiriques obtenues à partir de $1,000$ échantillons.



(a) $\delta = 1.5$ (b) $\delta = 2$ (c) $\delta = 3$

FIG. IV.9 – Exemple 1 : projection empirique sur un chaos polynomial gaussien classique



(a) $\delta = 1.5$ (b) $\delta = 2$ (c) $\delta = 3$

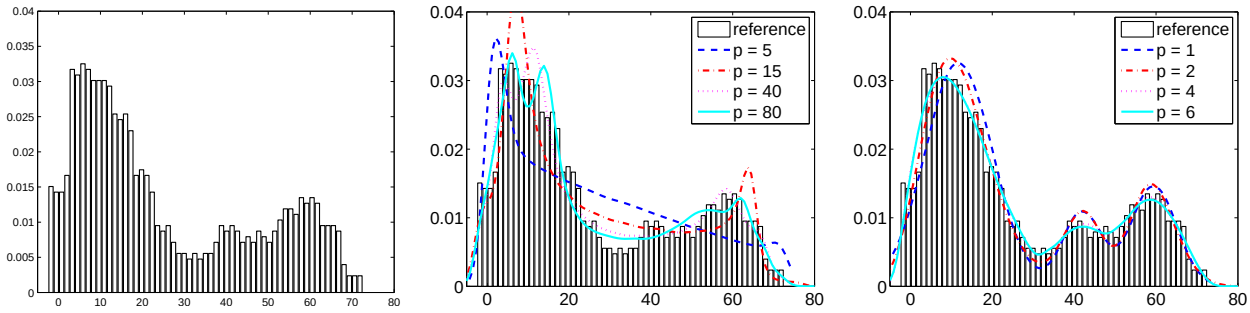
FIG. IV.10 – Exemple 1 : projection conditionnelle empirique sur un chaos polynomial gaussien classique

Exemple 2

Dans le cadre d'une étude menée avec un partenaire industriel, il était question d'étudier la fiabilité d'une structure off-shore. L'étude devait prendre en compte les conditions de mer, pour lesquelles des données statistiques étaient disponibles. Après une modélisation probabiliste de ces données d'entrée, la méthodologie consistait à utiliser une approche non-intrusive par projection sur bases de chaos généralisé afin d'obtenir une représentation explicite de la réponse de la structure en fonction des variables d'entrée (voir section 2.4.2 du chapitre I). Les aléas sur les conditions de mer portaient sur les hauteurs et périodes de houle et également sur la vitesse du courant. La hauteur et la période de houle ont pu être bien modélisées par un développement sur un chaos polynômial classique (voir paragraphe 3.4.2). Par contre, la vitesse de courant présentait une distribution de probabilité à 3 modes. La distribution empirique, obtenue à partir de $Q = 993$ échantillons est montrée sur la figure IV.11(a). Sur la figure IV.11(b), on illustre la mauvaise convergence d'une représentation sur un chaos gaussien classique, obtenue par une méthode de projection empirique. Sur la figure IV.11(c), on observe

les projections conditionnelles pour différents degrés de chaos. La séparation des 3 modes a été effectuée visuellement à partir de la figure IV.11(a). On a choisi $x_1 = 33$ et $x_2 = 50$. On observe avec la technique proposée une très bonne représentation de la loi à 3 modes avec un chaos de faible degré.

Dans l'application visée, cette modélisation a permis de mettre en oeuvre une méthode par projection non-intrusive pour calculer le développement de la réponse du système sur un chaos généralisé. La modélisation proposée permettait en effet de se limiter à un faible degré de chaos et ainsi de réduire le nombre de points de quadrature stochastique à utiliser pour calculer la projection (équivalent au nombre de résolutions déterministes).



(a) Echantillons (b) Chaos gaussien classique (c) Chaos généralisé "conditionnel"

FIG. IV.11 – Exemple 2 : Distribution de probabilité de la vitesse du courant. PDF des échantillons (a), projection sur chaos gaussien classique (b), projection conditionnelle (c).

5 Application à l'identification de formes aléatoires

On propose ici une méthodologie d'identification de formes aléatoires à partir d'observations. L'objectif est de fournir une modélisation probabiliste des incertitudes géométriques pouvant ensuite être exploitée dans une simulation numérique par la méthode X-SFEM, présentée dans le chapitre III. On considère que les observations prennent la forme d'une collection d'images, chaque image étant associée à une réalisation de la géométrie.

5.1 Reconnaissance de forme par la méthode des level-sets

Le problème de reconnaissance de forme à partir d'une image est un problème connu et bien maîtrisé dans le cadre des techniques level-sets [148]. On rappelle ici les bases de cette technique. On suppose que l'on dispose d'une image contrastée, définie par un mapping $I : \boldsymbol{x} \in D \to \mathbb{R}$, dont les valeurs $I(\boldsymbol{x})$ représentent par exemple une intensité de gris à la position $\boldsymbol{x} \in D$ (où $D \subset \mathbb{R}^2$ voire $D \subset \mathbb{R}^3$). Le but est alors de détecter les frontières d'une forme sous-jacente. Cette frontière s'avère être située dans la région où l'intensité I possède de forts gradients. Le principe de la reconnaissance de forme est alors de construire une fonction level-set $\phi : D \to \mathbb{R}$ dont l'iso-zéro est situé dans cette zone à forts gradients. L'idée de base consiste à propager un front, représenté par l'iso-zéro d'une level-set $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ dépendant d'un temps fictif, et de faire converger ce front vers la frontière à identifier. L'équation du mouvement de la level-set $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ s'écrit :

$$\begin{aligned} &\partial_t \phi(\boldsymbol{x}, t) + F(\boldsymbol{x}, t)\|\nabla\phi(\boldsymbol{x}, t)\| = 0 \\ &\phi(\boldsymbol{x}, 0) = \phi_0(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{IV.33}$$

où F est la vitesse du front dans la direction normale sortante (dirigée des valeurs négatives de ϕ vers les valeurs positives). Afin de faire propager le front vers la frontière désirée, on souhaite une vitesse non nulle dans les zones à faibles gradients et une vitesse tendant vers zéro dans les zones à forts gradients. Un choix possible pour F [148] consiste à prendre :

$$F = (1 - \epsilon\kappa)\frac{1}{1 + c\|\nabla(G_\sigma * I)\|} \tag{IV.34}$$

où κ est la courbure du front ($\kappa = \nabla \cdot (\frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|})$), $\epsilon > 0$ est un paramètre petit et G_σ est un filtre gaussien avec une longueur caractéristique σ. $\nabla(G_\sigma * I)$ représente le gradient de l'image filtrée. Le terme de courbure est un terme classique, conduisant à une régularisation du front. Le paramètre c permet d'imposer une valeur arbitrairement petite de la vitesse dans les zones à forts gradients.
Un choix classique pour la level-set initiale ϕ_0 consiste à prendre un petit contour circulaire situé à l'intérieur de la frontière à identifier. De nombreux algorithmes ont été proposés pour la résolution de l'équation (IV.33) (voir [148]). Après discrétisation et résolution, cela conduit à une level-set discrétisée $\boldsymbol{\phi} \in \mathbb{R}^N$.

Remarque IV.8

> *Il est également possible de choisir comme front initial l'union de petits fronts circulaires centrés en des points arbitrairement choisis. La représentation par level-set autorisant des changements de topologie du front, les fronts initiaux pourront naturellement coalescer pour former un front plus simple, éventuellement connexe. Cela permet en général d'accéder plus rapidement à une solution stationnaire de* (IV.33).

Illustration

On considère le cas de la figure IV.12, qui représente une image filtrée et son gradient. On utilise ici la "Matlab Toolbox for Level-set Methods" [112] pour la résolution de l'équation (IV.33). L'équation de mouvement est résolue par un schéma de type différences finies sur une grille spatiale uniforme de taille 60×60.

(a) $G_\sigma * I$ (b) $\|\nabla(G_\sigma * I)\|$

Fig. IV.12 – Image I en niveau de gris convoluée par un filtre gaussien G_σ (a) et gradient de l'image filtrée (b)

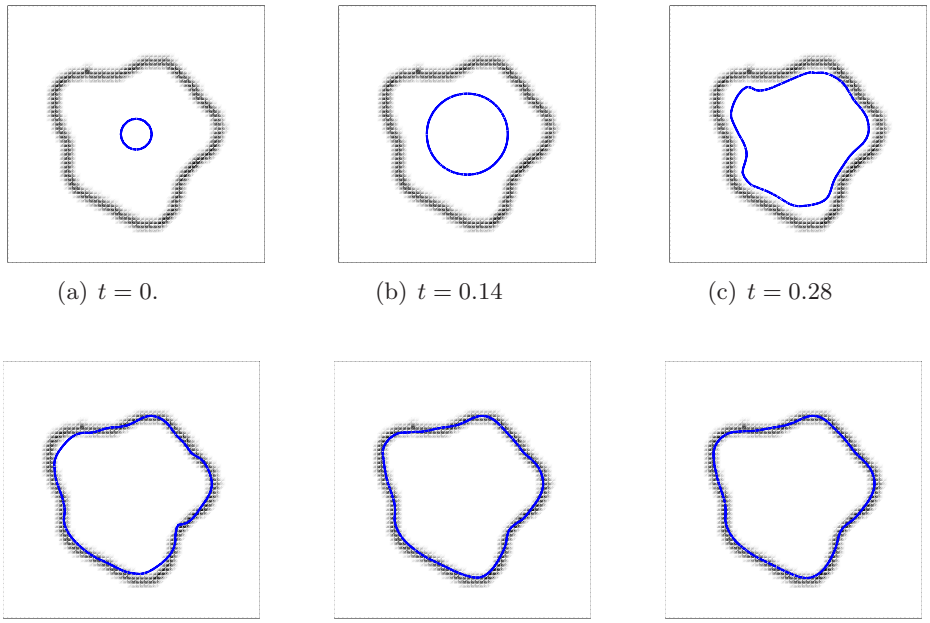
La figure IV.13 montre l'iso-zéro de la level-set $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ à différents instants de résolution, et on observe bien que le front associé se "fige" sur la zone à forts gradients.

5.2 Réduction d'information par décomposition de Karhunen-Loève empirique

Pour notre problématique, la forme aléatoire peut être caractérisée par une level-set aléatoire discrétisée, représentée par un vecteur aléatoire $\boldsymbol{\phi} : \Theta \to \mathbb{R}^N$. Si l'on dispose de Q images $\{I^{(k)}\}_{k=1}^Q$ représentant Q réalisations de la forme, on appliquera la procédure ci-dessus Q fois afin d'obtenir les réalisations correspondantes de la level-set discrétisée $\{\boldsymbol{\phi}^{(k)}\}_{k=1}^Q$, avec $\boldsymbol{\phi}^{(k)} \in \mathbb{R}^N$.

L'identification probabiliste du vecteur aléatoire $\boldsymbol{\phi}$ à partir des échantillons $\{\boldsymbol{\phi}^k\}$ est cependant irréalisable en pratique en raison du grand nombre de variables aléatoires et donc de la dimension du problème d'identification associé. Une réduction d'information est donc nécessaire. Cette réduction consiste à représenter la level-set aléatoire en fonction d'un petit nombre de variables aléatoires $(X_1, \ldots, X_m) := \mathbf{X}$. Le problème de l'identification de la level-set aléatoire se ramènera alors à l'identification du petit vecteur aléatoire $\mathbf{X}(\theta)$ à partir d'une collection d'échantillons $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k=1}^Q$. On pourra alors utiliser l'une des techniques introduites dans le paragraphe 3.

On propose ici d'effectuer une décomposition de Karhunen-Loève empirique [99] des échantillons (version discrète de la décomposition de Karhunen-Loève introduite dans l'annexe A). Ce type de décomposition est aussi connu sous le nom de Principal Component Analysis [75] ou décomposition



(a) $t = 0.$ (b) $t = 0.14$ (c) $t = 0.28$

(d) $t = 0.42$ (e) $t = 0.71$ (f) $t = 1$

FIG. IV.13 – Iso-zéro de la level-set $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ à différents instants t

en valeurs singulières et a été utilisé dans de nombreux domaines d'application tels que l'analyse de données [51, 151], l'analyse d'image [95], la réduction de modèle dynamique [83, 20], etc. Par cette décomposition, on tente d'extraire des échantillons quelques modes spatiaux représentatifs sur lesquels les échantillons de level-sets peuvent être décomposés. Les composantes des échantillons sur cette base réduite de modes sont alors les échantillons des variables $\mathbf{X}$ à identifier.

Remarque IV.9

Dans le cas où on présuppose une forme de level-set $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{X})$ paramétrée par un petit nombre de variables aléatoires $\mathbf{X}$ (cercle à position aléatoire, ellipse à demi-axes aléatoires, ...), aucune réduction d'information ne sera généralement nécessaire. Les échantillons $\mathbf{x}^{(k)}$ de $\mathbf{X}$ pourront être identifiées en résolvant Q problèmes inverses classiques du type :

$$\mathbf{x}^{(k)} = \underset{\mathbf{x}}{argmin}\ \|\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\phi}^{(k)}\|^2$$

5.2.1 Décomposition de Karhunen-Loève empirique

Notons $\boldsymbol{\mu}_\phi$ la moyenne empirique des échantillons $\boldsymbol{\phi}^{(k)}$ et $\widetilde{\boldsymbol{\phi}}^{(k)} = \boldsymbol{\phi}^{(k)} - \boldsymbol{\mu}_\phi$ les échantillons centrés. La matrice de covariance empirique (non biaisée) des échantillons s'écrit

$$\mathbf{C}_\phi = (Q-1)^{-1} \sum_{k=1}^{Q} \widetilde{\boldsymbol{\phi}}^{(k)} \widetilde{\boldsymbol{\phi}}^{(k)T}$$

On note $(s_i, \mathbf{U}_i)$, $i = 1...N$, les couples (valeurs propres, vecteurs propres) de $\mathbf{C}_\phi$. Les vecteurs $\mathbf{U}_i$ formant une base orthonormée de $\mathbb{R}^N$, on peut alors décomposer les échantillons de level-set sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\phi}^{(k)} = \boldsymbol{\mu}_\phi + \sum_{i=1}^{N} \sqrt{s_i} \mathbf{U}_i x_i^{(k)}, \quad x_i^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{s_i}} \mathbf{U}_i^T \boldsymbol{\phi}^{(k)} \tag{IV.35}$$

où les $\{x_i^{(k)}\}_{i=1}^N$ apparaissent comme les composantes de $\widetilde{\boldsymbol{\phi}}^{(k)}$ sur la base des modes $(\sqrt{s_i} U_i)$.

5.2.2 Réduction d'information par troncature

On suppose que les modes sont triés de la manière suivante : $s_1 \geqslant ... \geqslant s_N$. On peut alors tronquer la décomposition (IV.35) en ne retenant que les m premiers modes :

$$\boldsymbol{\phi}^{(k)} \approx \hat{\boldsymbol{\phi}}^{(k)} = \mu_{\boldsymbol{\phi}} + \sum_{i=1}^{m} \sqrt{s_i}\mathbf{U}_i x_i^{(k)} \tag{IV.36}$$

On montre classiquement que l'erreur d'approximation vérifie :

$$\frac{1}{Q-1}\sum_{k=1}^{Q} \|\boldsymbol{\phi}^{(k)} - \hat{\boldsymbol{\phi}}^{(k)}\|^2 = \sum_{i=m+1}^{N} s_i \tag{IV.37}$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme 2 vectorielle classique. Le nombre de modes m à garder peut alors être choisi comme le plus petit entier m tel que

$$\sum_{i=m+1}^{N} s_i \leqslant \epsilon_{KL}^2 \sum_{i=1}^{N} s_i, \tag{IV.38}$$

où ϵ_{KL} est une tolérance fixée *a priori* qui permet de controller l'erreur de troncature. Finalement, les échantillons de la level-set peuvent être approchés par la formule suivante :

$$\boldsymbol{\phi}^{(k)} \approx \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\phi}} + \sum_{i=1}^{m} \widetilde{\mathbf{U}}_i x_i^{(k)}, \quad \widetilde{\mathbf{U}}_i = \sqrt{s_i}\mathbf{U}_i \tag{IV.39}$$

Les $\{x_i^{(k)}\}_{k=1}^{Q}$ apparaissent comme les échantillons d'une variable aléatoire $X_i(\theta)$ représentant la composante de la level-set aléatoire sur le mode $\widetilde{\mathbf{U}}_i$. On doit alors identifier le vecteur aléatoire $\mathbf{X} = (X_1(\theta) \ldots X_n(\theta))^T$, connaissant Q échantillons $\mathbf{x}^{(k)} = (x_1^{(k)} \ldots x_m^{(k)})^T$. Avec la définition choisie pour les $\mathbf{x}^{(k)}$, la moyenne empirique et la matrice de covariance empirique (non biaisée) des échantillons satisfont :

$$Q^{-1}\sum_{k=1}^{Q} \mathbf{x}^{(k)} = 0, \quad (Q-1)^{-1}\sum_{k=1}^{Q} \mathbf{x}^{(k)}\mathbf{x}^{(k)^T} = \mathbf{I}_n.$$

Les X_i à identifier sont donc considérées comme des variables aléatoires centrées, normalisées et décorrélées.

5.3 Méthodologie d'identification probabiliste

On est donc ramener à l'identification d'un vecteur aléatoire $\mathbf{X}$ de taille m, connaissant Q échantillons $\mathbf{x}^{(k)}$. On peut alors utiliser les méthodes de représentation fonctionnelle introduites dans le paragraphe 3.

Selon la nature des formes aléatoires, on peut être amené à garder un grand nombre de modes m. L'identification d'un grand vecteur aléatoire $\mathbf{X}$ peut alors s'avérer difficile sans hypothèse supplémentaire. Les variables aléatoires X_i sont par définition décorrélées. En pratique, comme peu d'échantillons sont généralement disponibles, une hypothèse raisonnable consiste à considérer les variables aléatoires X_i comme indépendantes. Le bien-fondé de cette hypothèse a été vérifié en pratique sur des exemples numériques.

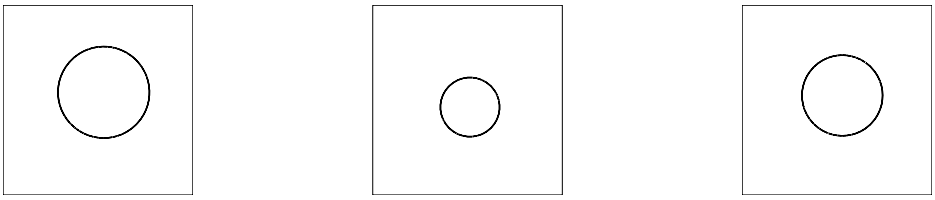
Les méthodes d'identification basées sur des représentations fonctionnelles peuvent alors être appliquées séparément pour chaque variable aléatoire. Les variables aléatoires seront décomposées sous la forme

$$X_i = \sum_{j=0}^{p} X_{i,j} h_j(\xi_i), \quad i = 1 \ldots m$$

où les ξ_i sont des variables aléatoires indépendantes. Pour une variable X_i donnée, on pourra mettre en oeuvre une méthode d'inférence classique pour l'identification des paramètres $(X_{i,0} \ldots X_{i,p}) \in \mathbb{R}^{p+1}$. On pourra également utiliser une technique plus efficace de projection empirique, présentée dans le paragraphe 3.4.

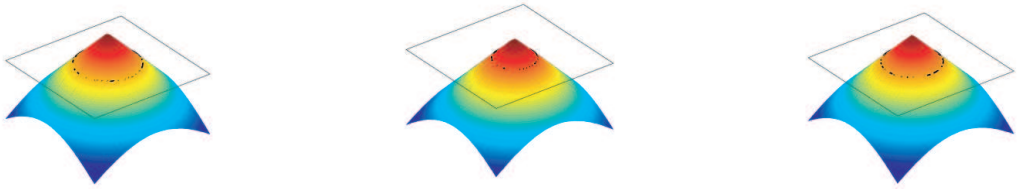
5.4 Illustration

On considère ici un domaine circulaire inclus dans un domaine $D = (0,1) \times (0,1)$. Le centre du cercle est situé en (a, b) et son rayon est r. On choisit pour a, b et r trois variables aléatoires indépendantes uniformes : $a \in U(0.45, 0.55)$, $b \in U(0.45, 0.55)$, $r \in U(0.15, 0.25)$. La level-set dont l'iso-zéro correspond à ce front est $\phi(\boldsymbol{x}, \theta) = r(\theta) - \|\boldsymbol{x} - (a(\theta), b(\theta))\|$. Afin de valider la procédure d'identification (décomposition de Karhunen-Loève tronquée et développement sur le chaos), on génère $Q = 100$ échantillons $\boldsymbol{\phi}^{(k)}$ de cette level-set aléatoire. Les figures IV.14 et IV.15 montrent trois réalisations du contour circulaire aléatoire et les réalisations de la level-set associée.



(a) (b) (c)

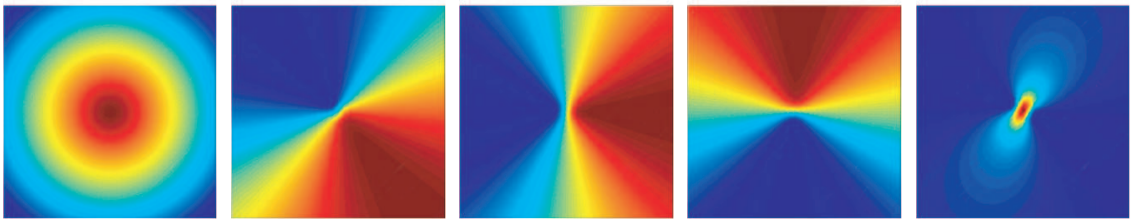
Fig. IV.14 – Cercle à position et rayon aléatoire : 3 réalisations de la frontière



(a) (b) (c)

Fig. IV.15 – Cercle à position et rayon aléatoire : 3 échantillons de la level-set aléatoire

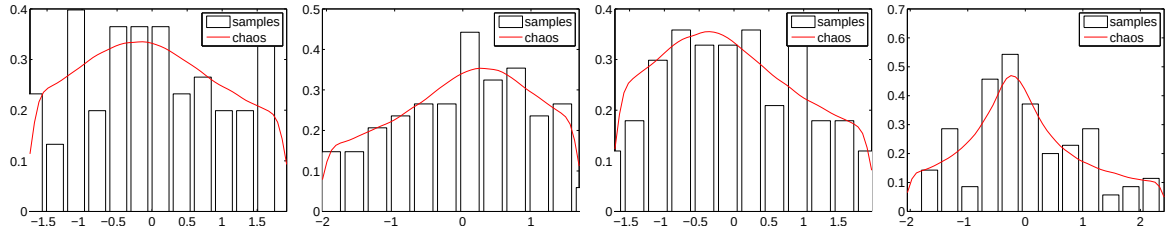
La décomposition de Karhunen-Loève tronquée, pour une précision $\epsilon_{KL} = 5.10^{-2}$ nécessite ici $m = 4$ modes. Ces modes sont illustrés sur la figure IV.16. Les variables aléatoires X_i sont considérées indépendantes. On utilise la méthode de projection empirique sur un chaos polynômial de Legendre de degré $p = 3$ (voir section 3.4). La figure IV.18 montre les PDF des échantillons $\{x_i^{(k)}\}_{k=1}^{Q}$ et les PDF des variables X_i identifiées.



(a) $\boldsymbol{\mu}_\phi$ (b) $\mathbf{U}_1$ (c) $\mathbf{U}_2$ (d) $\mathbf{U}_3$ (e) $\mathbf{U}_4$

Fig. IV.16 – Moyenne de la level-set (a) et premiers modes de la décomposition de Karhunen-Loève (b-e)

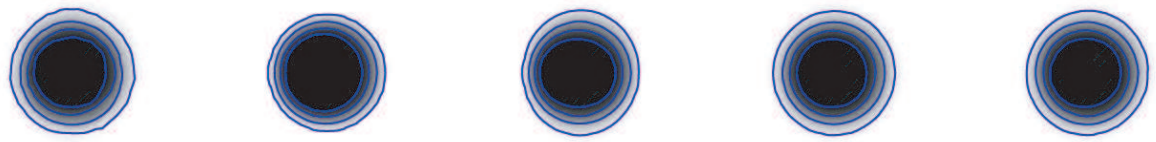
Enfin, afin de vérifier la qualité de la procédure d'identification et pour vérifier que la forme aléatoire est bien représentée, on calcule la fonction $\boldsymbol{x} \mapsto P_{in}(\boldsymbol{x})$ où la valeur $P_{in}(\boldsymbol{x})$ désigne la probabilité que le point $\boldsymbol{x}$ soit dans le domaine. Cette fonction s'exprime en fonction de la level-set par $P_{in}(\boldsymbol{x}) = P(\phi(\boldsymbol{x}, \theta) < 0)$. On calcule une fonction P_{in} de référence à partir des échantillons $\phi^{(k)}$ et on la compare avec la fonction obtenue à partir de la level-set identifiée sur le chaos. En pratique, on génère



(a) X_1 (b) X_2 (c) X_3 (d) X_4

FIG. IV.17 – PDF des échantillons $\{x_i^{(k)}\}_{k=1}^{Q}$ et des variables aléatoires X_i identifiées (projection sur un chaos polynômial de Legendre de degré 3)

1,000 réalisations de la level-set identifiée et on estime P_{in} à partir de ces réalisations. La figure IV.18 compare les distributions de la fonction P_{in} de référence et de la fonction P_{in} obtenue pour différents ordres de troncature m de la décomposition KL. On observe qu'un nombre de modes peu elévé $m = 4$ permet une très bonne représentation de la forme aléatoire. On remarque au passage que l'hypothèse d'indépendance sur les variables aléatoires est justifiée sur cet exemple. Une identification des variables supposées dépendantes est possible par une méthode de maximum de vraisemblance. Sur cet exemple, on peut montrer que cela n'améliore pas de manière significative la qualité de l'identification.



(a) Référence (b) $m = 1$ (c) $m = 2$ (d) $m = 3$ (e) $m = 4$

FIG. IV.18 – Fonction P_{in} obtenue à partir des échantillons initiaux (a) et à partir des level-sets identifiées sur le chaos (b-e) pour différents ordres de troncature m. Contours d'iso-valeurs $(0.1, 0.3, 0.6, 0.9)$

6 Conclusions et perspectives

Les développements exposés dans ce chapitre constituent une partie essentielle d'une analyse probabiliste, qui consiste à construire une modélisation pertinente des incertitudes en entrée d'un modèle physique. L'essentiel des contributions portent sur les méthodes de quantification des incertitudes par des approches spectrales, qui sont aujourd'hui développées et exploitées dans de nombreux travaux. Ces approches très génériques permettent une représentation aisée de lois de probabilité non usuelles. Elles fournissent de plus une représentation adaptée à l'utilisation des méthodes spectrales stochastiques. L'utilisation de ces techniques permet donc de réunir sous un même formalisme les aspects quantification et propagation des incertitudes à travers les modèles physiques.

Dans le cas de l'identification des représentations par un principe de maximum de vraisemblance, les algorithmes d'optimisation proposés apportent une amélioration de la robustesse et de la précision de l'estimation. Cependant, pour des représentations fonctionnelles de haut degré et pour de nombreuses variables aléatoires à identifier, la dimension des problèmes d'optimisation et la nature même de la fonctionnelle rendent difficile l'application de ce type d'approches. Les outils de projection empirique (ou projection empirique conditionnelle) proposés dans ce chapitre apportent une première réponse à cette problématique. Ces outils, relativement robustes, permettent une obtention rapide de représentations spectrales très précises à partir de simples échantillons de paramètres aléatoires. Une première perspective concerne l'extension de ces méthodologies au cas de plusieurs variables aléatoires (notamment pour les techniques de projection conditionnelle). Un autre point concerne le développement d'outils de quantification de la qualité de la représentation ainsi obtenue (variance des coefficients, intervalles de confiance, ...).

La technique d'identification de formes aléatoires à partir d'images exploite des techniques de réduction d'information classiques ainsi que les méthodes de représentation spectrales mentionnées plus haut. Elle conduit à une représentation des incertitudes sous une forme directement exploitable dans la méthode proposée dans le chapitre III. Néanmoins, d'autres domaines d'application de cette méthodologie pourraient être envisagés : analyse de structures cohérentes dans des écoulements, analyse statistique d'images médicales, analyse morphologique de micro-structures de matériaux hétérogènes... Ces différentes applications pourraient susciter des collaborations inter-disciplinaires.

Conclusion

La quantification des incertitudes apparaît aujourd'hui comme un point crucial dans de nombreuses branches de la science et de l'ingénierie. En améliorant la prédictibilité des modèles ou la robustesse des designs, elle répond à des enjeux aussi bien technologiques, économiques que sociétaux.

Ces deux dernières décennies ont vu naître une nouvelle famille de méthodes, baptisées approches spectrales stochastiques, qui reposent sur un mariage fructueux de la théorie des probabilités et de l'analyse fonctionnelle. Ce mariage a permis de transposer au cadre stochastique un ensemble d'outils mathématiques et numériques bien maîtrisés dans le cadre de la simulation des modèles déterministes. Comme on a pu le voir tout au long de ce mémoire, ces méthodes offrent une vision unifiée de la quantification et de la propagation des incertitudes dans un contexte probabiliste. En d'autres termes, elles permettent de traiter dans un même formalisme toute la chaîne de validation-vérification des modèles physiques, depuis l'identification des modèles à partir d'observations jusqu'à la prédiction numérique de la réponse de ces modèles.

Bien que ces méthodes soient aujourd'hui relativement matures pour certaines classes de problèmes, de nombreuses difficultés théoriques, méthodologiques et techniques restent encore à surmonter pour assurer leur transfert pérenne vers un vaste champ d'applications. Tout d'abord, ces méthodes nécessitent de revisiter en profondeur des champs d'applications aujourd'hui bien maîtrisés dans un contexte déterministe. Par exemple, dans le domaine de la dynamique des structures, les méthodes déterministes actuelles permettent d'aborder des simulations de grande échelle en prenant en compte des comportements non-linéaires complexes (visco-plasticité, contact, endommagement, ...). Le traitement de ces problèmes dans un contexte incertain reste encore un enjeu à moyen ou long terme. Un défi consiste à proposer des méthodes génériques, applicables à une large classe de problèmes et exploitant au mieux les savoir-faire et les logiciels existants. Le transfert de ces méthodes vers des applications industrielles complexes sera rendu possible si des efforts conséquents sont menés sur le développement de méthodes de résolution robustes, permettant l'obtention de prédictions en des temps raisonnables.

Une autre question clé concerne la maîtrise et la réduction des erreurs introduites aux différentes étapes de la chaîne de validation et de vérification des modèles : erreur de mesure (ou d'observation), erreur de modèle, erreur d'approximation, erreur de résolution. Maîtriser ces différentes erreurs permettrait en effet d'obtenir des prédictions plus fiables de la réponse des modèles. Dans un contexte incertain, la réduction des erreurs de mesure nécessite généralement d'augmenter le nombre des observations (si possible) ainsi que la qualité de leur traitement statistique. Les erreurs de modèle peuvent quant à elles être réduites par une meilleur compréhension des phénomènes physiques et des sources d'incertitudes, et le développement de procédures de recalage robustes dans un contexte probabiliste. Le contrôle de l'erreur d'approximation nécessite le développement d'outils d'estimation d'erreur *a posteriori* et la mise en place de démarches d'approximation adaptative, visant à améliorer la qualité du modèle numérique. Enfin, la réduction des erreurs de résolution passe par une meilleure maîtrise des solveurs, de leur précision et de leur robustesse. Cette question de la maîtrise des erreurs est certainement un axe de développement important pour les approches spectrales. Ces approches, qui offrent une vision unifiée de la chaîne validation-verification, ont l'avantage de pouvoir hériter d'un savoir-faire existant dans le domaine de la simulation déterministe ou dans d'autres branches de l'analyse probabiliste.

Une autre difficulté, qui n'est pas propre aux approches spectrales mais aux méthodes de quantification des incertitudes en général, concerne la modélisation pertinente des incertitudes. Dans les modèles physiques, les sources d'incertitudes apparaissent à différentes échelles, mettant en jeu des phénomènes physiques distincts. Les incertitudes sont souvent bien comprises et modélisées à certaines échelles qui ne correspondent pas aux échelles étudiées. Des méthodologies de simulation pleinement multi-échelles, permettant de transférer les incertitudes à travers les échelles, pourraient conduire à la construction de modèles plus pertinents, à des prédictions plus fiables, ainsi qu'à une meilleure compréhension des phénomènes physiques. Au delà de ces enjeux, ces stratégies multi-échelles permettront d'augmenter l'efficacité des approches spectrales et ainsi de résoudre des problèmes inabordables avec les moyens de calcul actuels. Dans ce contexte, les stratégies de réduction de modèle, déjà très "en vogue" dans le domaine déterministe, semblent constituer une voie incontournable lorsqu'une dimension probabiliste est rajoutée au problème.

Toutes ces questions constituent autant de défis scientifiques et techniques restant à relever pour conduire à une meilleure maîtrise des modèles et des calculs dans un contexte incertain. Il reste donc à espérer que des développements futurs, rendus possible par l'intérêt croissant porté par les financeurs privés et publics, permettront d'atteindre une pleine maturité de ces méthodes et leur utilisation massive pour la résolution de problèmes d'intérêt.

Annexe A

Représentation et discrétisation des processus ou champs stochastiques

Dans cette partie, on introduit brièvement des techniques de représentation classiques des processus (ou champs) stochastiques. Pour une introduction aux processus (ou champs) stochastiques, on pourra consulter [45, 86, 2, 98, 99] pour un point de vue mathématique ou encore [129, 70, 71, 164, 35] pour des aspects plus techniques.

Sommaire

1 Définition et caractérisation des processus stochastiques 119
2 Décomposition de Karhunen-Loève 120
3 Décomposition de Hilbert-Karhunen-Loève 121
4 Décomposition sur le chaos polynômial 122

1 Définition et caractérisation des processus stochastiques

Un processus stochastique à valeurs dans $\mathcal{E}$ est défini formellement comme étant un ensemble indexé de variables aléatoires $\{w_x(\theta))\}_{x\in\Omega}$, où les $w_x(\theta)$ sont des variables aléatoires, à valeurs dans $\mathcal{E}$, définies sur un espace de probabilité $(\Theta, \mathcal{B}, P)$. Ω peut être un ensemble discret fini ou dénombrable, auquel cas on parlera de processus stochastique discret, ou un ensemble non dénombrable tel qu'un intervalle $\Omega \subset \mathbb{R}$ ou encore un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Dans le cas où Ω est un domaine spatial, on parlera de champ stochastique plutôt que de processus stochastique. Un processus stochastique peut être vu de manière équivalente comme une fonction mesurable

$$w : (x, \theta) \in \Omega \times \Theta \mapsto w(x, \theta) \in \mathcal{E},$$

ou encore comme une variable aléatoire à valeurs dans un espace de fonctions de Ω dans $\mathcal{E}$. L'équivalence entre ces différentes interprétations est sujette à des considérations techniques [86, 98, 80]. Par la suite, on considérera des processus stochastiques scalaires, *i.e.* $\mathcal{E} = \mathbb{R}$.

La caractérisation probabiliste d'un processus stochastique se ramène donc *a priori* à la caractérisation probabiliste d'un ensemble, éventuellement non dénombrable, de variables aléatoires. Un processus est en fait totalement caractérisé par la donnée de ses lois de probabilité de dimension finie [2, 86], qui sont les lois de probabilité jointes de tout ensemble fini de variables aléatoires $\{w_{x_1}, ..., w_{x_n}\}$, $n \in \mathbb{N}$, $x_i \in \Omega$.

On s'intéresse par la suite à la représentation et la discrétisation des processus du second ordre. On pourra consulter [52, 86, 35, 73] pour une introduction aux processus stochastiques généralisés. De nombreuses techniques de discrétisation des processus stochastiques sont disponibles dans la littérature (cf. [145, 150, 107, 160, 79]). On présente par la suite deux techniques classiquement utilisées dans le cadre des approches spectrales stochastiques : la décomposition de Karhunen-Loève et la décomposition sur le chaos polynômial.

2 Décomposition de Karhunen-Loève

La décomposition de Karhunen-Loève [97, 77] s'applique à des processus du second ordre $w \in L^2(\Omega) \otimes L^2(\Theta, dP)$. Elle consiste à décomposer le processus w sous la forme

$$w(x,\theta) = \mu_w(x) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\sigma_i} v_i(x) \zeta_i(\theta) \tag{A.1}$$

où μ_w est la moyenne de w, où les fonctions $v_i(x)$ forment une base hilbertienne particulière de $L^2(\Omega)$, où les $\zeta_i \in L^2(\Theta, dP)$ sont des variables aléatoires centrées décorrélées de variance unitaire et où les σ_i sont des constantes positives. Les couples $(v_i, \sigma_i) \in L^2(\Omega) \times \mathbb{R}^+$ sont les solutions du problème aux valeurs propres intégral[1]

$$\int_\Omega C_w(x,y) v_i(y)\, dy = \sigma_i v_i(x) \tag{A.2}$$

où C_w est la fonction de covariance de w, définie par :

$$C_w(x,y) = E\Big((w(x,\theta) - \mu_w(x))(w(y,\theta) - \mu_w(y))\Big) \tag{A.3}$$

Les couples (v_i, σ_i) sont donc les couples propres de l'opérateur

$$T_w : v \in L^2(\Omega) \mapsto T_w(v) = \int_\Omega C_w(\cdot, y) v(y)\, dy := < C_w, v >_{L^2(\Omega)}$$

Sous réserve de régularité de C_w, on montre que T_w est un opérateur autoadjoint continu compact de $L^2(\Omega)$ dans $L^2(\Omega)$, si bien que la théorie spectrale classique s'applique [26]. L'ensemble de ses fonctions propres forme bien une base hilbertienne de $L^2(\Omega)$. Son spectre est borné et possède comme seul point d'accumulation 0. Le processus w peut alors être décomposé sous la forme (A.1), où les variables aléatoires ζ_i sont définies par

$$\zeta_i(\theta) = \frac{1}{\sqrt{\sigma_i}} < w - \mu_w, v_i >_{L^2(\Omega)} = \frac{1}{\sqrt{\sigma_i}} \int_\Omega (w(x,\theta) - \mu_w(x)) v_i(x)\, dx$$

La série (A.1) est convergente dans $L^2(\Omega) \otimes L^2(\Theta, dP)$:

$$\|w - \mu_w - \sum_{i=1}^{m} \sqrt{\sigma_i} v_i \zeta_i\|^2_{L^2(\Omega)\otimes L^2(\Theta,dP)} = \|w - \mu_w\|^2_{L^2(\Omega)\otimes L^2(\Theta,dP)} - \sum_{i=1}^{m} \sigma_i \underset{m\to\infty}{\longrightarrow} 0 \tag{A.4}$$

Dans le cas d'un processus gaussien, les variables aléatoires ζ_i sont des variables gaussiennes décorrélées et donc indépendantes. La décomposition de Karhunen-Loève est donc dans ce cas très intéressante puisqu'elle permet de représenter le processus en fonction d'un ensemble de variables aléatoires dont la loi de probabilité est totalement déterminée. Dans le cas d'un processus non gaussien, cette décomposition est bien sûr encore valable. Cependant, la caractérisation probabiliste de l'ensemble des variables aléatoires devient plus délicate.

Remarque A.1

> *Dans des cas très particuliers, le problème aux valeurs propres intégral (A.2) admet des solutions analytiques. Dans le cas général, on aura recours à une résolution numérique [6].*

Discrétisation du processus

Une discrétisation stochastique du processus consiste alors à tronquer la décomposition de Karhunen-Loève à un ordre m, en prenant soin de ne conserver que les plus grandes valeurs propres :

$$w(x,\theta) \approx w^{(m)}(x,\theta) = \mu_w(x) + \sum_{i=1}^{m} \sqrt{\sigma_i} v_i(x) \zeta_i(\theta) \tag{A.5}$$

On montre la propriété d'optimalité suivante :

[1] Le problème aux valeurs propres intégral (A.2) est une équation de Fredholm de seconde espèce homogène [38, 135].

Propriété A.2

La décomposition de Karhunen-Loève tronquée (A.5) est la décomposition optimale du processus au sens de $L^2(\Omega) \otimes L^2(\Theta, dP)$ sur l'ensemble des décompositions du type $\mu_w(x) + \sum_{i=1}^m v_i(x)\nu_i(\theta)$, avec $v_i \in L^2(\Omega)$ et $\nu_i \in L^2(\Theta, dP)$:

$$\|w - w^{(m)}\|^2_{L^2(\Omega)\otimes L^2(\Theta,dP)} = \min_{\substack{v_i \in L^2(\Omega) \\ \nu_i \in L^2(\Theta,dP)}} \|w - \mu_w - \sum_{i=1}^m v_i\nu_i\|^2_{L^2(\Omega)\otimes L^2(\Theta,dP)}$$

3 Décomposition de Hilbert-Karhunen-Loève

Une extension de la décomposition de Karhunen-Loève, appelée décomposition de Hilbert-Karhunen-Loève [95, 46], consiste à chercher une décomposition optimale d'un processus $w \in \mathcal{H} \otimes L^2(\Theta, dP)$, où $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert de fonctions définies sur Ω. On munit $\mathcal{H} \otimes L^2(\Theta, dP)$ du produit scalaire

$$< \cdot, \cdot >_{\mathcal{H}\otimes L^2(\Theta,dP)} = E(< \cdot, \cdot >_{\mathcal{H}})$$

où $< \cdot, \cdot >_{\mathcal{H}}$ est un produit scalaire sur $\mathcal{H}$. On introduit alors l'opérateur linéaire T_w de $\mathcal{H}$ dans $\mathcal{H}$ défini par

$$T_w(v) = < C_w, v >_{\mathcal{H}} := E((w - \mu_w) < (w - \mu_w), v >_{\mathcal{H}}) \tag{A.6}$$

où $C_w \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ est la fonction de covariance du processus w, définie par l'équation (A.3). Sous réserve de régularité de C_w, T_w est un opérateur autoadjoint compact de $\mathcal{H}$ dans $\mathcal{H}$ et la théorie spectrale classique s'applique. Les fonctions propres v_i de T_w forment une base hilbertienne de $\mathcal{H}$. En notant (v_i, σ_i) les couples propres de T_w, on obtient alors la décomposition suivante du processus

$$w(x, \theta) = \mu_w(x) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\sigma_i} v_i(x)\zeta_i(\theta) \tag{A.7}$$

où les $\zeta_i \in L^2(\Theta, dP)$ sont encore des variables aléatoires centrées décorrélées de variance unitaire. Cette décomposition est convergente dans $\mathcal{H} \otimes L^2(\Theta, dP)$:

$$\|\widetilde{w} - \sum_{i=1}^m \sqrt{\sigma_i} v_i \zeta_i\|^2_{\mathcal{H}\otimes L^2(\Theta,dP)} = \|\widetilde{w}\|^2_{\mathcal{H}\otimes L^2(\Theta,dP)} - \sum_{i=1}^m \sigma_i \underset{m\to\infty}{\longrightarrow} 0 \tag{A.8}$$

On peut alors obtenir une discrétisation du processus en tronquant la décomposition :

$$w(x, \theta) \approx w^{(m)}(x, \theta) = \mu_w(x) + \sum_{i=1}^m \sqrt{\sigma_i} v_i(x)\zeta_i(\theta) \tag{A.9}$$

Cette décomposition possède la propriété d'optimalité suivante :

Propriété A.3

La décomposition de Hilbert-Karhunen-Loève tronquée (A.9) est la décomposition optimale du processus au sens de $\mathcal{H}\otimes L^2(\Theta, dP)$ sur l'ensemble des décompositions du type $\mu_w(x) + \sum_{i=1}^m v_i(x)\nu_i(\theta)$, avec $v_i \in \mathcal{H}$ et $\nu_i \in L^2(\Theta, dP)$:

$$\|w - w^{(m)}\|^2_{\mathcal{H}\otimes L^2(\Theta,dP)} = \min_{\substack{v_i \in \mathcal{H} \\ \nu_i \in L^2(\Theta,dP)}} \|w - \mu_w - \sum_{i=1}^m v_i\nu_i\|^2_{\mathcal{H}\otimes L^2(\Theta,dP)}$$

4 Décomposition sur le chaos polynômial

Un autre type de représentation des processus stochastiques du second ordre consiste à utiliser un développement sur le chaos polynômial de Wiener [169, 29]. Toute variable aléatoire $v \in L^2(\Theta, dP)$ peut être décomposée sur une base de polynômes orthogonaux de variables gaussiennes centrées réduites indépendantes.

Chaos polynômial

Notons $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_i\}_{i\in\mathbb{N}^*}$ un ensemble dénombrable de variables aléatoires gaussiennes centrées réduites indépendantes. Les polynômes orthogonaux de $\boldsymbol{\xi}$ sont les polynômes d'Hermite multidimensionnels. En introduisant l'ensemble des multi-indices de longueur finie

$$\mathcal{I} = \{\alpha = (\alpha_i)_{i\in\mathbb{N}^*} \in \mathbb{N}^{\mathbb{N}^*}; |\alpha| = \sum_{i\in\mathbb{N}^*} \alpha_i < \infty\},$$

les polynômes d'Hermite multidimensionnels peuvent être exprimés sous la forme

$$H_\alpha(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{i=1}^{\infty} h_{\alpha_i}(\xi_i)$$

où les $h_n(x)$ sont les polynômes d'Hermite unidimensionnels, polynômes orthonormés pour la mesure gaussienne $\varphi(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp(-\frac{x^2}{2})dx$. On appelle chaos homogène de degré p l'espace $\mathcal{H}_p$ défini par :

$$\mathcal{H}_p = span\{H_\alpha; \alpha \in \mathcal{I}, |\alpha| = p\}$$

On appelle chaos polynômial de degré p l'espace

$$\bigoplus_{k=0}^{p} \mathcal{H}_k$$

On a alors la décomposition orthogonale suivante de l'espace des variables aléatoires du second ordre :

$$L^2(\Theta, dP) = \overline{\bigoplus_{k=1}^{\infty} \mathcal{H}_k}$$

En d'autres termes, l'ensemble de polynômes $\{H_\alpha\}_{\alpha\in\mathcal{I}}$ forme une base hilbertienne de $L^2(\Theta, dP)$.

Décomposition d'un processus

Un processus stochastique $w(x, \theta)$ pourra alors être décomposé sous la forme suivante

$$w(x, \theta) = \sum_{\alpha\in\mathcal{I}} w_\alpha(x) H_\alpha(\boldsymbol{\xi}(\theta)),$$

cette décomposition étant convergente dans $L^2(\Theta, dP)$. Cette représentation peut être utilisée en complément d'une décomposition de Karhunen-Loève (A.1) ou (A.7). Elle permet en effet d'obtenir une représentation des variables aléatoires apparaissant dans ces décompositions : $\zeta_i(\theta) = \sum_{\alpha\in\mathcal{I}} \zeta_{i,\alpha} H_\alpha(\boldsymbol{\xi}(\theta))$. Une approximation du processus sera obtenue en tronquant la décomposition sur un chaos polynômial de degré fini, avec un nombre fini de variables aléatoires.

Annexe B

Aspects techniques de la méthode GSD

On présente ici les aspects techniques liés à la résolution d'un problème stochastique par la méthode GSD. Le problème initial à résoudre est le suivant : trouver $u \in \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$ tel que

$$A(u,v) = B(v) \quad \forall v \in \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P \tag{B.1}$$

où A est une forme bilinéaire (ou semi-linéaire) sur $\mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$ et où B est une forme linéaire sur $\mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$.

Sommaire

1 Notations préliminaires . . . 123
1.1 Développement des formes linéaires et semi-linéaires . . . 123
1.2 Notations matricielles équivalentes . . . 124
1.3 Algorithmes GSD : différents types de problèmes à résoudre . . . 124
1.4 Dans quels cas rencontre-t-on chaque type de problème ? . . . 125
2 Problèmes linéaires . . . 125
3 Problèmes non-linéaires . . . 127

1 Notations préliminaires

1.1 Développement des formes linéaires et semi-linéaires

On considère que les formes A et B peuvent s'écrire sous la forme :

$$A(u,v) = \int_\Theta a(u(\theta), v(\theta); \theta) dP(\theta) := E\Big(a(u(\cdot), v(\cdot); \cdot)\Big), \tag{B.2}$$

$$B(v) = \int_\Theta b(v(\theta); \theta) dP(\theta) := E\Big(b(v(\cdot); \cdot)\Big). \tag{B.3}$$

où $a(\cdot,\cdot;\theta)$ est une forme bilinéaire (voire semi-linéaire) sur $\mathcal{V}_n$ et où $b(\cdot;\theta)$ est une forme linéaire sur $\mathcal{V}_n$. On considère que les formes a et b peuvent être décomposées de la manière suivante

$$a(u,v;\theta) = \sum_{k=1}^{m_A} A_k(\theta) a_k(u,v), \qquad b(v;\theta) = \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta) b_k(v) \tag{B.4}$$

où les A_k et B_k sont des variables aléatoires et où les a_k (resp. b_k) sont des formes semi-linéaires (resp. linéaires) déterministes sur $\mathcal{V}_n$.

1.2 Notations matricielles équivalentes

En assimilant $u \in \mathcal{V}_n \otimes \mathcal{S}_P$ à un vecteur aléatoire $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$, on utilisera de manière équivalente une notation matricielle :

$$A(u,v) \equiv A(\mathbf{u},\mathbf{v}) = E(\mathbf{v}^T\mathbf{A}(\mathbf{u})), \qquad B(v) \equiv B(\mathbf{v}) = E(\mathbf{v}^T\mathbf{b}) \tag{B.5}$$

où $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ est un vecteur aléatoire et où $\mathbf{A}$ est un opérateur (éventuellement non-linéaire) de $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$ dans $\mathbb{R}^n \otimes \mathcal{S}_P$. Dans le cas linéaire, $\mathbf{A}$ est assimilé à une matrice aléatoire. Les expressions (B.4), en notations matricielles, pourront s'écrire :

$$\mathbf{A} = \sum_{k=1}^{m_A} A_k(\theta)\mathbf{A}_k, \qquad \mathbf{b} = \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta)\mathbf{b}_k \tag{B.6}$$

où les $\mathbf{A}_k$ sont des opérateurs de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^n$ (assimilés à des matrices dans le cas linéaire) et les $\mathbf{b}_k \in \mathbb{R}^n$.

1.3 Algorithmes GSD : différents types de problèmes à résoudre

On note $u^{(M)} = \sum_{i=1}^M U_i\lambda_i$, avec $U_i \in \mathcal{V}_n$ et $\lambda_i \in \mathcal{S}_P$, une décomposition spectrale d'ordre M. On notera $W = (U_1,\dots,U_M) \in (\mathcal{V}_n)^M$ et $\Lambda = (\lambda_1,\dots,\lambda_M) \in (\mathcal{S}_P)^M$ et on notera de manière condensée $u^{(M)} = W \cdot \Lambda$.

En notations matricielles, on note $\mathbf{u}^{(M)} = \sum_{i=1}^M \mathbf{U}_i\lambda_i$, avec $\mathbf{U}_i \in \mathbb{R}^n$. On note également $\mathbf{W} = (U_1,\dots,U_M) \in \mathbb{R}^{n\times M}$ et $\mathbf{\Lambda} = (\lambda_1,\dots,\lambda_M)^T \in \mathbb{R}^M \otimes \mathcal{S}_P$.

Problème de type I

Connaissant $U \in \mathcal{V}_n$ et $u^{(M)}$, calcul de $\lambda = f(U;u^{(M)})$:

$$\lambda \in \mathcal{S}_P, \qquad A(u^{(M)} + \lambda U, \lambda^* U) = B(\lambda^* U) \quad \forall \lambda^* \in \mathcal{S}_P$$

Problème de type II

Connaissant $\lambda \in \mathcal{S}_P$ et $u^{(M)}$, calcul de $U = F(\lambda;u^{(M)})$:

$$U \in \mathcal{V}_n, \quad A(u^{(M)} + \lambda U, \lambda V) = B(\lambda V) \quad \forall V \in \mathcal{V}_n$$

Problème de type III

Connaissant $W \in (\mathcal{V}_n)^M$, calcul de $\Lambda = f(W)$:

$$\Lambda \in (\mathcal{S}_P)^M, \quad A(\Lambda \cdot W, \Lambda^* \cdot W) = B(\Lambda^* \cdot W) \quad \forall \Lambda^* \in (\mathcal{S}_P)^M \tag{B.7}$$

Problème de type IV

Connaissant $\Lambda \in (\mathcal{S}_P)^M$, calcul de $W = F(\Lambda)$:

$$W \in (\mathcal{V}_n)^M, \quad A(\Lambda \cdot W, \Lambda \cdot W^*) = B(\Lambda \cdot W^*) \quad \forall W^* \in (\mathcal{V}_n)^M \tag{B.8}$$

Problème de type V

Connaissant $W \in (\mathcal{V}_n)^{M'}$ et $u^{(M)}$, calcul de $\Lambda = f(W;u^{(M)})$:

$$\Lambda \in (\mathcal{S}_P)^{M'}, \quad A(u^{(M)} + \Lambda \cdot W, \Lambda^* \cdot W) = B(\Lambda^* \cdot W) \quad \forall \Lambda^* \in (\mathcal{S}_P)^{M'} \tag{B.9}$$

Problème de type VI

Connaissant $\Lambda \in (\mathcal{S}_P)^{M'}$ et $u^{(M)}$, calcul de $W = F(\Lambda;u^{(M)})$:

$$W \in (\mathcal{V}_n)^{M'}, \quad A(u^{(M)} + \Lambda \cdot W, \Lambda \cdot W^*) = B(\Lambda \cdot W^*) \quad \forall W^* \in (\mathcal{V}_n)^{M'} \tag{B.10}$$

1.4 Dans quels cas rencontre-t-on chaque type de problème ?

Dans le tableau ci-dessous sont listés les différents types d'algorithmes GSD et la nature des problèmes à résoudre pour chacun de ces algorithmes. Les questions suivantes conditionnent le choix d'un algorithme GSD : quels types de problèmes sont les plus faciles à implémenter ? pour un type de problème donné, existe-t-il un solveur robuste, éventuellement déjà implémenté dans des codes classiques ? pour un type de problème donné, les capacités mémoire ne risquent-elles pas d'être dépassées ?

	Type of problems					
Algorithmes	I	II	III	IV	V	VI
P-GSD	•	•	•			
P'-GSD	•	•				
A-GSD	•	•	•			
A'-GSD	•	•			•	
SI'-GSD					•	•
SI-GSD			•		•	•
P-GSD*	•	•		•		
A-GSD*	•	•		•		
A'-GSD*	•	•				•
SI-GSD*				•	•	•

Les sigles d'algorithmes avec * indiquent qu'on prend le point de vue du problème aux valeurs propres en Λ. Les autres algorithmes correspondent au point de vue du problème aux valeurs propres en W. Tous les algorithmes sont indiqués dans leur version avec déflation. Les sigles avec $'$ indiquent qu'on réalise seulement une actualisation partielle des variables aléatoires ou fonctions déterministes après résolution d'un problème aux VP sur l'opérateur déflaté. Dans le cas sans $'$, on réalise une actualisation complète. On notera que les algorithmes P'-GSD et SI'-GSD sont les mêmes quel que soit le point de vue, *i.e.* problème aux VP en Λ ou W. Leur analogue en * n'ont donc pas été indiqués.

2 Problèmes linéaires

On précise ici les différents problèmes énoncés plus haut dans le cas linéaire. Pour chaque problème, on indique les versions continues et discrètes.

Problème de type I

Trouver $\lambda \in \mathcal{S}_P$ tel que

$$E(\lambda^* \overline{A} \lambda) = E(\lambda^* \overline{B}) \quad \forall \lambda^* \in \mathcal{S}_P \tag{B.11}$$

avec

$$\overline{A}(\theta) = \sum_{k=1}^{m_A} A_k(\theta) a_k(U,U) \equiv \sum_{k=1}^{m_A} A_k(\theta)(\mathbf{U}^T \mathbf{A}_k \mathbf{U}) \tag{B.12}$$

$$\overline{B}(\theta) = \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta) b_k(U) - \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=1}^{m_A} \lambda_i(\theta) A_k(\theta) a_k(U_i, U) \tag{B.13}$$

$$\equiv \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta)(\mathbf{U}^T \mathbf{b}_k) - \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=1}^{m_A} \lambda_i(\theta) A_k(\theta)(\mathbf{U}^T \mathbf{A}_k \mathbf{U}_i) \tag{B.14}$$

$$\tag{B.15}$$

Problème de type II

Trouver $U \in \mathcal{V}_n$ tel que

$$A(\lambda U, \lambda V) = B(\lambda V) - A(u^{(M)}, \lambda V) \quad \forall V \in \mathcal{V}_n \tag{B.16}$$

ce qui s'écrit encore sous la forme d'un simple problème déterministe :

$$\widetilde{a}(U,V) = \widetilde{b}(V) \quad \forall V \in \mathcal{V}_n \tag{B.17}$$

avec

$$\widetilde{a}(U,V) = \sum_{k=1}^{m_A} E(A_k\lambda^2)a_k(U,V), \quad \widetilde{b}(V) = \sum_{k=1}^{m_B} E(B_k\lambda)b_k(V) - \sum_{k=1}^{m_A} a_k(\widetilde{U}_k, V) \tag{B.18}$$

avec $\widetilde{U}_k = \sum_{i=1}^{M} E(A_k\lambda\lambda_i)U_i$. En notations matricielles, ce problème est équivalent à trouver $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$\widetilde{\mathbf{A}}\mathbf{U} = \widetilde{\mathbf{b}} \tag{B.19}$$

$$avec \quad \widetilde{\mathbf{A}} = \sum_{k=1}^{m_A} E(A_k\lambda^2)\mathbf{A}_k, \quad \widetilde{\mathbf{b}} = \sum_{k=1}^{m_B} E(B_k\lambda)\mathbf{b}_k - \sum_{k=1}^{m_A} \mathbf{A}_k\widetilde{\mathbf{U}}_k \tag{B.20}$$

Problème de type III

Trouver $\{\lambda_i\}_{i=1}^M \in (\mathcal{S}_P)^M$ tel que $\forall i \in \{1...M\}$, $\forall \lambda_i^* \in \mathcal{S}_P$,

$$A(\sum_{j=1}^{M} \lambda_j U_j, \lambda_i^* U_i) = B(\lambda_i^* U_i) \tag{B.21}$$

ce qui s'écrit encore

$$E(\lambda_i^* \sum_{j=1}^{M} \overline{A}_{ij}\lambda_j) = E(\lambda_i^* \overline{B}_i) \quad \forall \lambda_i^* \in \mathcal{S}_P \tag{B.22}$$

avec

$$\overline{A}_{ij}(\theta) = \sum_{k=1}^{m_A} A_k(\theta)a_k(U_j, U_i) \equiv \sum_{k=1}^{m_A} A_k(\theta)(\mathbf{U}_i\mathbf{A}_k\mathbf{U}_j) \tag{B.23}$$

$$\overline{B}_i(\theta) = \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta)b_k(U_i) \equiv \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta)(\mathbf{U}_i^T\mathbf{b}_k) \tag{B.24}$$

Problème de type IV

Trouver $\{U_i\}_{i=1}^M \in (\mathcal{V}_n)^M$ tel que $\forall i \in \{1...M\}$, $\forall V_i \in \mathcal{V}_n$,

$$A(\sum_{j=1}^{M} \lambda_j U_j, \lambda_i V_i) = B(\lambda_i V_i) \tag{B.25}$$

ce qui s'écrit encore

$$\sum_{j=1}^{M} \widetilde{a}_{ij}(U_j, V_i) = \widetilde{b}_i(V_i) \tag{B.26}$$

avec

$$\widetilde{a}_{ij}(U_j, V_i) = \sum_{k=1}^{m_A} E(A_k\lambda_i\lambda_j)a_k(U_j, V_i), \quad \widetilde{b}_i(V_i) = \sum_{k=1}^{m_B} E(B_k\lambda_i)b_k(V_i) \tag{B.27}$$

En notations matricielles, ce problème est équivalent à résoudre le système couplé d'équations déterministes suivant : trouver $\{\mathbf{U}_i\}_{i=1}^M \in (\mathbb{R}^n)^M$ tel que $\forall i \in \{1...M\}$,

$$\sum_{j=1}^{M} \widetilde{\mathbf{A}}_{ij}\mathbf{U}_j = \widetilde{\mathbf{b}}_i \tag{B.28}$$

avec

$$\widetilde{\mathbf{A}}_{ij} = \sum_{k=1}^{m_A} E(A_k\lambda_i\lambda_j)\mathbf{A}_k, \quad \widetilde{\mathbf{b}}_i = \sum_{k=1}^{m_B} E(B_k\lambda_i)\mathbf{b}_k \tag{B.29}$$

Problèmes de type V et VI

Ces problèmes s'écrivent comme les problèmes de type III et IV, en prenant en compte une modification du second membre due au terme $u^{(M)}$.

3 Problèmes non-linéaires

Pour illustrer l'application aux problèmes non-linéaires, on choisit le cas particulier suivant :

$$a(u, v; \theta) = A_1(\theta)a_1(u, v) + A_2(\theta)a_2(u, v)$$

avec $a_1(u, v)$ une forme bilinéaire déterministe et $a_2(u, v)$ une forme déterministe linéaire en v et quadratique en u. On notera

$$a_2(u, v) = n_2(u, u, v)$$

avec n_2 une forme trilinéaire. Ce type d'équation correspond aux problèmes traités dans [125, 104] : résolution d'une équation de Burgers (avec approximation spectrale au niveau spatial) et résolution d'un problème de Navier-Stokes incompressible stationnaire (discrétisation différences finies au niveau spatial).

On ne détaille ici que la résolution des problèmes de type I, II et III, qui correspondent aux problèmes intervenant dans les algorithmes P-GSD et A-GSD. Les autres types de problèmes s'écrivent également simplement.

Problème de type I

Trouver $\lambda \in \mathcal{S}_P$ tel que

$$E(\lambda^*(\overline{A}_1\lambda + \overline{A}_2\lambda^2)) = E(\lambda^*\overline{B}) \quad \forall \lambda^* \in \mathcal{S}_P \tag{B.30}$$

avec

$$\overline{A}_1(\theta) = A_1(\theta)a_1(U, U) \tag{B.31}$$

$$\overline{A}_2(\theta) = A_2(\theta)n_2(U, U, U) \tag{B.32}$$

$$\overline{B}(\theta) = \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta)b_k(U) - \sum_{i=1}^{M} \lambda_i(\theta)A_1(\theta)a_1(U_i, U) - \sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M} \lambda_i(\theta)\lambda_j(\theta)A_2(\theta)n_2(U_i, U_j, U) \tag{B.33}$$

C'est une équation stochastique non-linéaire algébrique. Sa résolution peut être menée par des algorithmes non-linéaires classiques. La non-linéarité étant quadratique, on peut par exemple utiliser sans difficulté une méthode de Newton classique.

Problème de type II

Trouver $U \in \mathcal{V}_n$ tel que :

$$E(A_1\lambda^2)a_1(U, V) + E(A_2\lambda^3)n_2(U, U, V) = \widetilde{b}(V) \quad \forall V \in \mathcal{V}_n \tag{B.34}$$

avec

$$\widetilde{b}(V) = \sum_{k=1}^{m_B} E(B_k\lambda)b_k(V) - a_1(\widetilde{U}, V) - \sum_{i=1}^{M} n_2(U_i, \widehat{U}_i, U) \tag{B.35}$$

$$\widetilde{U} = \sum_{i=1}^{M} E(\lambda\lambda_i A_1)U_i, \quad \widehat{U}_i = \sum_{j=1}^{M} E(\lambda\lambda_i\lambda_j A_2)U_j \tag{B.36}$$

On observe que le problème (B.34) est un problème déterministe ayant une structure mathématique classique d'un problème déterministe avec non-linéarité quadratique. La résolution de ce problème peut donc être menée avec des solveurs déterministes classiques. En ce sens, la méthode GSD peut être vue comme une méthode non-intrusive, permettant l'utilisation de codes déterministes classiques et robustes.

Problème de type III

Trouver $\{\lambda_i\}_{i=1}^{M} \in (\mathcal{S}_P)^M$ tel que $\forall i \in \{1...M\}$, $\forall \lambda_i^* \in \mathcal{S}_P$,

$$E(\lambda_i^*(\sum_{j=1}^{M} \overline{A}_{ij}\lambda_j + \sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{M} \overline{N}_{ijk}\lambda_j\lambda_k)) = E(\lambda_i^*\overline{B}_i) \quad \forall \lambda_i^* \in \mathcal{S}_P \tag{B.37}$$

avec

$$\overline{A}_{ij}(\theta) = A_1(\theta)a_1(U_j, U_i) \tag{B.38}$$

$$\overline{N}_{ijk}(\theta) = A_2(\theta)n_2(U_j, U_k, U_i) \tag{B.39}$$

$$\overline{B}_i(\theta) = \sum_{k=1}^{m_B} B_k(\theta)b_k(U_i) \tag{B.40}$$

C'est un système d'équations stochastiques non-linéaires algébriques. Sa résolution peut être menée par des algorithmes non-linéaires classiques. La non-linéarité étant quadratique, on peut par exemple utiliser sans difficulté une méthode de Newton classique.

Annexe C

Paramétrisation de la variété de Stiefel compacte

On présente ici une paramétrisation possible de la variété de Stiefel compacte $\mathbb{S}(n,m)$, avec $m \leqslant n$, qui est l'ensemble des matrices orthogonales $n \times m$.

Sommaire

1 Le cas général $m \leqslant n$ 129
2 Le cas particulier $m = n$ 130
3 Le cas particulier $m = 1$ 130

1 Le cas général $m \leqslant n$

La dimension de la variété de Stiefel compacte $\mathbb{S}(n,m)$, avec $m \leqslant n$, est $d = nm - m(m+1)/2$. Notons $\mathbb{O}(n)$ le groupe des matrices orthogonales de $\mathbb{R}^{n\times n}$. Une paramétrisation classique de $\mathbb{S}(n,m)$ autour d'une matrice $\mathbf{B} \in \mathbb{S}(n,m)$ s'écrit comme suit :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{B}\ \mathbf{B}_\perp)\exp(\mathbf{S})\begin{pmatrix}\mathbf{I}_m \\ 0\end{pmatrix}, \tag{C.1}$$

où $\mathbf{B}_\perp \in \mathbb{S}(n, n-m)$ est le complément orthogonal de $\mathbf{B}$, *i.e.* tel que $(\mathbf{B}\ \mathbf{B}_\perp) \in \mathbb{O}(n)$, et où $\mathbf{S} \in \mathbb{M}^{skew}(m)$ est une matrice $m \times m$ anti-symétrique s'écrivant :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix}\mathbf{S}_{11} & -\mathbf{S}_{21}^T \\ \mathbf{S}_{21} & 0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_{11} \in \mathbb{M}^{skew}(m),\ \mathbf{S}_{21} \in \mathbb{R}^{(n-m)\times m}. \tag{C.2}$$

On vérifie aisément que les matrices anti-symétriques de la forme (C.2) dépendent bien de d paramètres indépendants. On introduit alors le mapping Z défini sur $\mathbb{R}^d$ et tel que $\mathbf{S} = Z(\boldsymbol{\varphi})$ est une matrice de la forme (C.2). On notera par convention

$$Z(\boldsymbol{\varphi}) = \left(\begin{array}{ccc|cc} 0 & -\varphi_1 & \dots & -\varphi_{d'+1} & \dots \\ \varphi_1 & \ddots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & 0 & \dots & -\varphi_d \\ \hline \varphi_{d'+1} & \vdots & \vdots & 0 & \\ \vdots & \vdots & \varphi_d & & \end{array}\right)$$

où l'ordre des paramètres est choisi de manière arbitraire. La paramétrisation souhaitée de la variété $\mathbb{S}(n,m)$ autour de $\mathbf{B}$ peut alors s'écrire :

$$\mathbf{A} = T(\boldsymbol{\varphi}) = (\mathbf{B}\ \mathbf{B}_\perp)\exp(Z(\boldsymbol{\varphi}))\begin{pmatrix}\mathbf{I}_m \\ 0\end{pmatrix} \tag{C.3}$$

Pour $m < n$, $\mathbb{S}(n,m)$ est une variété connexe et peut être "balayée" par la paramétrisation proposée. On montre dans des cas particuliers où $n < m$ qu'en choisissant un domaine borné $[-\pi,\pi]^d$ pour les paramètres, on est capable de "balayer" complètement la variété, *i.e.* $T([-\pi,\pi]^d) = \mathbb{S}(n,m)$. Ce résultat, qui a un intérêt pratique quand on formule un problème d'optimisation sur $\mathbb{S}(n,m)$, reste à vérifier dans le cas général.

2 Le cas particulier $m = n$

Pour $m = n$, $\mathbb{S}(n,m) = \mathbb{O}(n)$ est le groupe orthogonal des matrices $\mathbb{R}^{n\times n}$, qui n'est pas un ensemble connexe. Cependant, $\mathbb{O}(n)$ est l'union de deux sous-ensembles connexes $\mathbb{O}^+(n)$ et $\mathbb{O}^-(n)$, correspondant aux ensembles de matrices orthogonales ayant respectivement pour déterminant 1 et -1. La paramétrisation proposée autour d'une matrice $\mathbf{B}$ permet donc uniquement de balayer le sous-ensemble auquel $\mathbf{B}$ appartient, *i.e.* $\mathbb{O}^+(n)$ ou $\mathbb{O}^-(n)$. Théoriquement, un problème d'optimisation sur $\mathbb{O}(n)$ doit être séparé en deux problèmes d'optimisation, utilisant une paramétrisation autour d'une matrice $\mathbf{B}$ dans $\mathbb{O}^+(n)$ et $\mathbb{O}^-(n)$ respectivement.

Remarque C.1

Lorsque cette paramétrisation est utilisée pour la reformulation du problème de maximum de vraisemblance décrit dans la section 3 du chapitre IV, le cas $m = n$ apparaît pour un développement sur chaos polynômial de degré 1 en dimension m. Dans le cas où une décomposition sur chaos polynômial d'Hermite est utilisé, on montre aisément que la fonction de vraisemblance $L(\mathbf{A})$ est invariante par toute transformation orthogonale de l'argument, i.e. $L(\mathbf{A}) = L(\mathbf{OA})$, $\forall \mathbf{O} \in \mathbb{O}(n)$. Cela provient de la propriété d'invariance de la densité de probabilité du germe $\boldsymbol{\xi}$. Dans ce cas, la fonction L est donc constante sur $\mathbb{O}(n)$, c'est-à-dire que toute décomposition de ce type conduit à la même vraisemblance.
Dans le cas où on utilise un chaos de Legendre, L n'a plus cette propriété d'invariance. Cependant, on montre que les problèmes d'optimisation sur $\mathbb{O}^+(n)$ et $\mathbb{O}^-(n)$ sont complètement équivalents. En effet, pour une matrice de coefficients $\mathbf{A} \in \mathbb{O}^+(n)$ (resp. $\mathbb{O}^-(n)$), il existe $\mathbf{O} \in \mathbb{O}^-(n)$ tel que $\mathbf{OA} \in \mathbb{O}^-(n)$ (resp. $\mathbb{O}^+(n)$) et $L(\mathbf{A}) = L(\mathbf{OA})$. Cela vient de propriétés d'invariance de la densité de probabilité du germe $\boldsymbol{\xi}$, dont les composantes sont des variables aléatoires uniformes indépendantes. Un seul problème d'optimisation doit donc être résolu sur l'un des sous-ensembles connexes de $\mathbb{O}(n)$. Pour d'autres bases de chaos, ces invariances doivent être analysées afin de déterminer si un ou deux problèmes d'optimisation doivent être résolus.

3 Le cas particulier $m = 1$

Dans le cas $m = 1$, $\mathbb{S}(n,1)$ est la sphère unité de $\mathbb{R}^n$. Pour la paramétrisation (C.2), cela correspond à $\mathbf{S}_{11} = 0$ et $\mathbf{S}_{21} = (\varphi_1,\ldots,\varphi_{n-1})^T \in \mathbb{R}^{n-1}$. On peut alors montrer que

$$T(\boldsymbol{\varphi}) = (\mathbf{B}\ \mathbf{B}_\perp)\begin{pmatrix}\cos(\widetilde{\varphi}_1) \\ \sin(\widetilde{\varphi}_1)\varphi_1/\widetilde{\varphi}_1 \\ \cdots \\ \sin(\widetilde{\varphi}_1)\varphi_{n-1}/\widetilde{\varphi}_1\end{pmatrix} \tag{C.4}$$

où $\widetilde{\varphi}_1 = (\varphi_1^2 + \ldots + \varphi_{n-1}^2)^{1/2}$. En introduisant le changement de variable suivant :

$$\begin{aligned}
\varphi_1 &= \widetilde{\varphi}_1 \cos(\widetilde{\varphi}_2) \\
&\ldots \\
\varphi_{n-2} &= \widetilde{\varphi}_1 \sin(\widetilde{\varphi}_2) \ldots \sin(\widetilde{\varphi}_{n-2}) \cos(\widetilde{\varphi}_{n-1}) \\
\varphi_{n-1} &= \widetilde{\varphi}_1 \sin(\widetilde{\varphi}_2) \ldots \sin(\widetilde{\varphi}_{n-2}) \sin(\widetilde{\varphi}_{n-1}),
\end{aligned}$$

la paramétrisation (C.4) est donc équivalente à

$$T(\widetilde{\boldsymbol{\varphi}}) = (\mathbf{B}\ \mathbf{B}_\perp) \begin{pmatrix} \cos(\widetilde{\varphi}_1) \\ \sin(\widetilde{\varphi}_1)\cos(\widetilde{\varphi}_2) \\ \ldots \\ \sin(\widetilde{\varphi}_1) \ldots \sin(\widetilde{\varphi}_{n-1}) \end{pmatrix}$$

qui correspond à la paramétrisation classique de l'hyper-sphère unité de $\mathbb{R}^n$ avec $n-1$ paramètres angulaires $\widetilde{\boldsymbol{\varphi}} \in \mathbb{R}^{n-1}$. On peut noter que pour les paramètres $\widetilde{\boldsymbol{\varphi}}$, le choix du domaine borné $[0, \pi]^{n-2} \times [-\pi, \pi] \subset \mathbb{R}^{n-1}$ permet de représenter complètement l'hyper-sphère. Cela correspond à un domaine borné $[-\pi, \pi]^{n-1}$ pour les paramètres $\boldsymbol{\varphi}$.

Bibliographie

[1] P.-A. Absil, R. Mahony, and R. Sepulchre. Riemannian geometry of Grassmann manifolds with a view on algorithmic computation. *Acta Appl. Math.*, 80 :199–220, 2004.

[2] R. J. Adler. *The Geometry of Random Fields.* John Wiley & Sons, Chichester, 1981.

[3] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, and R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modelling of complex fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139(3) :153–176, 2006.

[4] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, and R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modelling of complex fluids part II : Transient simulation using space-time separated representations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144(2–3) :98–121, 2007.

[5] A.C. Antoulas and D.C. Sorensen. Approximation of large-scale dynamical systems : an overview. Technical report, University of Rice, 2001.

[6] K. E. Atkinson. *The Numerical Solution of Integral Equations of the Second Kind.* Cambridge University Press, Cambridge, 1997.

[7] N. Aubry, P. Holmes, J.L. Lumley, and E. Stone. The dynamics of coherent structures in the wall region of a turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 192 :115–173, 1988.

[8] I. Babuška. The finite element method with lagrangian multipliers. *Numerische Math.*, 20 :179–192, 1973.

[9] I. Babuška. The finite element method with penalty. *Mathematics of Computation*, 27(122) :221–228, 1973.

[10] I. Babuška and P. Chatzipantelidis. On solving elliptic stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191 :4093–4122, 2002.

[11] I. Babuška and J. Chleboun. Effects of uncertainties in the domain on the solution of neumann boundary value problems in two spatial dimensions. *Mathematics of Computation*, 71(240) :1339–1370, 2002.

[12] I. Babuška and J. Chleboun. Effects of uncertainties in the domain on the solution of dirichlet boundary value problems. *Numer. Math.*, 93(4) :583–610, 2003.

[13] I. Babuška, K.-M. Liu, and R. Tempone. Solving stochastic partial differential equations based on the experimental data. *TICAM Report*, 02-18, 2002.

[14] I. Babuška, F. Nobile, and R. Tempone. A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data. *SIAM J. Num. Anal.*, 45(3) :1005–1034, 2007.

[15] I. Babuška, R. Tempone, and G. E. Zouraris. Solving elliptic boundary value problems with uncertain coefficients by the finite element method : the stochastic formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194 :1251–1294, 2005.

[16] I. Babuška, R. Tempone, and G.E. Zouraris. Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic differential equations. *TICAM Report*, 02-38, 2002.

[17] M. Barrault, Y. Maday, N. C. Nguyen, and A. T. Patera. An empirical interpolation method : application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations. *Comptes Rendus Mathematique*, 339(9) :667–672, 2002.

[18] T. Belytschko, C. Parimi, N. Moës, N. Sukumar, and S. Usui. Structured extended finite element methods for solids defined by implicit surfaces. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 56 :609–635, 2003.

[19] F. E. Benth and J. Gjerde. Convergence rates for finite element approximations of stochastic partial differential equations. *Stochastics and Stochastics Rep.*, 63(3-4) :313–326, 1998.

[20] G. Berkooz, P. Holmes, and J. L. Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annual review of fluid mechanics*, 25 :539–575, 1993.

[21] M. Berveiller. *Stochastic finite elements : intrusive and non-intrusive methods for reliability analysis.* PhD thesis, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, 2005.

[22] M. Berveiller, B. Sudret, and M. Lemaire. Stochastic finite element : a non intrusive approach by regression. *European Journal of Computational Mechanics*, 15 :81–92, 2006.

[23] P. Besold. *Solutions to Stochastic Partial Differential Equations as Elements of Tensor Product Spaces.* PhD thesis, Georg-August-Universität, Göttingen, 2000.

[24] G. Blatman and B. Sudret. Sparse polynomial chaos expansions and adaptive stochastic finite elements using a regression approach. *Comptes Rendus Mécanique*, 336(6) :518–523, 2007.

[25] G. Blatman, B. Sudret, and M. Berveiller. Quasi random numbers in stochastic finite element analysis. *Mécanique & Industries*, 8 :289–297, 2007.

[26] H. Brézis. *Analyse fonctionnelle : théorie et applications.* Masson, Paris, 1983.

[27] F. Brezzi. On the existence, uniqueness and approximation of saddlepoint problems arising from lagrange multipliers. *RAIRO Anal. Numér.*, R-2 :129–151, 1974.

[28] R. E. Caflisch. Monte carlo and quasi-monte carlo methods. *Acta. Numer.*, 7 :1–49, 1998.

[29] R.H. Cameron and W.T. Martin. The orthogonal development of non-linear functionals in series of fourier-hermite functionals. *The Annals of Mathematics, Second Series*, 48(2) :385–392, 1947.

[30] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quateroni, and T.A. Zang. *Spectral methods in fluid dynamics.* Springer-Verlag, 1988.

[31] C. Canuto and T. Kozubek. A fictitious domain approach to the numerical solution of pdes in stochastic domains. *Numerische Mathematik*, 107(2) :257–293, 2007.

[32] F. Chinesta, A. Ammar, F. Lemarchand, P. Beauchene, and F. Boust. Alleviating mesh constraints : Model reduction, parallel time integration and high resolution homogenization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(5) :400–413, 2008.

[33] S. Choi, R.V. Grandhi, and R. A. Canfield. Structural reliability under non-gaussian stochastic behavior. *Computers and Structures*, 82 :1113–1121, 2004.

[34] S. Choi, R.V. Grandhi, R. A. Canfield, and C.L. Pettit. Polynomial chaos expansion with latin hypercube sampling for estimating response variability. *AIAA Journal*, 42(6) :1191–1198, 2004.

[35] G. Christakos. *Random Field Models in Earth Sciences.* Academic Press, San Diego, CA, 1992.

[36] P. G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems.* North-Holland, Amsterdam, 1978.

[37] A. Clément. *Méthode éléments finis stochastiques étendus pour le calcul de stuctures à géométrie aléatoire.* PhD thesis, University of Nantes, 2008.

[38] R. Courant and D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics.* John Wiley & Sons, Chichester, 1989.

[39] C. Daux, N. Moës, J. Dolbow, N. Sukumar, and T. Belytschko. Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element method. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 48 :1741–1760, 2000.

[40] M. Deb, I. Babuška, and J. T. Oden. Solution of stochastic partial differential equations using galerkin finite element techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 :6359–6372, 2001.

[41] J. E. Dennis and R. B. Schnabel. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations.* SIAM, 1996.

[42] C. Desceliers, R. Ghanem, and C. Soize. Maximum likelihood estimation of stochastic chaos representations from experimental data. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 66(6) :978–1001, 2006.

[43] O. Ditlevsen and H. Madsen. *Strutural Reliability Methods.* J. Wiley and Sons, Chichester, 1996.

[44] J. Dolbow, N. Moës, and T. Belytschko. Discontinuous enrichment in finite elements with a partition of unity method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 36(3-4) :235–260, 2000.

[45] J. L. Doob. *Stochastic Processes.* John Wiley & Sons, Chichester, 1953.

[46] A. Doostan, R. Ghanem, and J. Red-Horse. Stochastic model reductions for chaos representations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(37-40) :3951–3966, 2007.

[47] A. Edelman, T. A. Arias, and S. T. Smith. The geometry of algorithms with orthogonality constraints. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20(2) :303–353, 1998.

[48] C.G. Webster F. Nobile, R. Tempone. A sparse grid stochastic collocation method for partial differential equations with random input data. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 46(5) :2309–2345, 2007.

[49] Kai-Tai Fang and Run-Ze Li. Some methods for generating both an nt-net and the uniform distribution on a stiefel manifold and their applications. *Computational Statistics & Data Analysis*, 24 :29–46, 1997.

[50] P. Frauenfelder, C. Schwab, and R. A. Todor. Finite elements for elliptic problems with stochastic coefficients. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(2-5) :205–228, 2005.

[51] K. Fukunaga. *Introduction to Statistical Pattern Recognition.* Elsevier, 1990.

[52] I. M. Gel'fand and N. Y. Vilenkin. *Generalized Functions - Volume 4 : Applications of harmonic analysis.* Academic Press, New York, NY, 1964.

[53] A. Gelman, J.B. Carlin, H.S. Stern, and D.B. Rubin. *Bayesian Data Analysis.* Chapman and Hall, Boca Raton, FL, 2003.

[54] S. Géniaut, P. Massin, and N. Moës. A stable 3d contact formulation using x-fem. *European Journal of Computational Mechanics*, 16(2) :259–275, 2007.

[55] J.E. Gentle. *Elements of Computational Statistics.* Springer, New York, 2002.

[56] R. Ghanem. Ingredients for a general purpose stochastic finite elements implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 168 :19–34, 1999.

[57] R. Ghanem. Stochastic finite elements for heterogeneous media with multiple random non-gaussian properties. *ASCE J. Engrg. Mech.*, 125 :24–40, 1999.

[58] R. Ghanem and W. Brzakala. Stochastic finite-element analysis of soil layers with random interface. *Journal of Engineering Mechanics*, 122(4) :361–369, 1996.

[59] R. Ghanem and A. Doostan. On the construction and analysis of stochastic models : characterization and propagation of the errors associated with limited data. *Journal of Computational Physics*, 217(1) :63–81, 2006.

[60] R. Ghanem and D. Ghosh. Efficient characterization of the random eigenvalue problem in a polynomial chaos decomposition. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 72 :486–504, 2007.

[61] R. Ghanem and R. M. Kruger. Numerical solution of spectral stochastic finite element systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 129 :289–303, 1996.

[62] R. Ghanem, G. Saad, and A. Doostan. Efficient solution of stochastic systems : application to the embankment dam problem. *Structural Safety*, 29(3) :238–251, 2007.

[63] R. Ghanem and P. Spanos. *Stochastic finite elements : a spectral approach.* Springer, Berlin, 1991.

[64] D. Ghiocel and R. Ghanem. Stochastic finite-element analysis of seismic soil-structure interaction. *ASCE Journal Engrg. Mech.*, 128(1) :66–77, 2002.

[65] V. Girault and R. Glowinski. Error analysis of a fictitious domain method applied to a dirichlet problem. *Japan J. Indust. Appl. Math.*, 12 :487–514, 1995.

[66] R. Glowinski and Y. Kuznetsov. On the solution of the dirichlet problem for linear elliptic operators by a distributed lagrange multiplier method. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série I*, 327 :693–698, 1998.

[67] R. Glowinski, T. Pan, and J. Périaux. A fictitious domain method for dirichlet problems and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 111 :283–303, 1994.

[68] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations, 3rd ed.* Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 1996.

[69] P. Gosselet and C. Rey. On a selective reuse of Krylov subspaces in Newton-Krylov approaches for nonlinear elasticity. In *Domain decomposition methods in science and engineering*, pages 419–426, 2002.

[70] M. Grigoriu. *Applied non-Gaussian Processes.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1995.

[71] M. Grigoriu. *Stochastic Calculus - Applications in Science and Engineering.* Birkhäuser Verlag, Basel, 2002.

[72] W.K. Hastings. Monte carlo sampling methods using markov chains and their applications. *Biometrika*, 57 :97–109, 1970.

[73] H. Holden, B. Øksendal, J. Ubøe, and T. Zhang. *Stochastic Partial Differential Equations.* Birkhäuser, 1996.

[74] E.T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics. *Physical Review*, 106(4) :620–630, 2003.

[75] I.T. Jolliffe. *Principal Component Analysis.* Springer, New York, 2nd edition, 2002.

[76] J. Kapur and H. Kesavan. *Entropy optimization principles withe applications.* Academic Press, New York, 1992.

[77] K. Karhunen. Zur spektraltheorie stochastischer prozesse. *Ann. Acad. Sci. Fenn.*, 34, 1946.

[78] A. Keese. *Numerical Solution of Systems with Stochastic Uncertainties - A General Purpose Framework for Stochastic Finite Elements.* PhD thesis, Technische Universität Braunschweig, Brunswick, 2003.

[79] A. Keese. A review of recent developments in the numerical solution of stochastic pdes (stochastic finite elements). Technical Report 2003-6, Technical report, Institute of Scientific Computing, Tech. Univ. Braunschweig, Germany, 2003. http ://opus.tu-bs.de/opus/volltexte/2003/504/.

[80] A. Keese and H. G. Mathhies. Numerical methods and Smolyak quadrature for nonlinear stochastic partial differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 83, 2003.

[81] A. Keese and H. G. Mathhies. Hierarchical parallelisation for the solution of stochastic finite element equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 83 :1033–1047, 2005.

[82] A. Khuri and J. Cornell. *Response Surfaces : Designs and Analyses.* Marcel Dekker, New York, NY, 1987.

[83] M. Kirby. Minimal dynamical systems from pdes using sobolev eigenfunctions. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 57(3-4) :466–475, 1992.

[84] M. Kleiber and T.D. Hien. *The Stochastic Finite Element Method. Basic Perturbation Technique and Computer Implementation.* John Wiley & sons, Chichester, 1992.

[85] P. E. Kloeden and E. Platen. *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations.* Springer, Berlin, 1995.

[86] P. Krée and C. Soize. *Mathematics of Random Phenomena.* D. Reidel, Dordrecht, 1986.

[87] P. Ladevèze. *Nonlinear Computational Structural Mechanics - New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation*. Springer Verlag, 1999.

[88] P. Ladevèze and E. Florentin. Verification of stochastic models in uncertain environments using the constitutive relation error method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(1-3) :225–234, 2006.

[89] P. Ladevèze and A. Nouy. On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192 :3061–3087, 2003.

[90] O. P. Le Maître, O. M. Knio, H. N. Najm, and R. G. Ghanem. Uncertainty propagation using Wiener-Haar expansions. *Journal of Computational Physics*, 197(1) :28–57, 2004.

[91] O. P. Le Maître, H. N. Najm, R. G. Ghanem, and O. M. Knio. Multi-resolution analysis of wiener-type uncertainty propagation schemes. *Journal of Computational Physics*, 197(2) :502–531, 2004.

[92] O.P. Le Maître, O.M. Knio, H.N. Najm, and R. Ghanem. A stochastic projection method for fluid flow. i. basic formulation. *J. Comput. Physics*, 173 :481–511, 2001.

[93] O.P. Le Maître, M.T. Reagan, H.N. Najm, R.G. Ghanem, and O.M. Knio. A stochastic projection method for fluid flow. ii. random process. *J. Comput. Physics*, 181 :9–44, 2002.

[94] M. Lemaire. *Fiabilité des structures - Couplage mécano-fiabiliste statique*. Hermès, 2005.

[95] A. Levy and J. Rubinstein. Some properties of smoothed principal component analysis for functional data. *Journal of The Optical Society of America*, 16(1) :28–35, 1999.

[96] T. Lieu, C. Farhat, and M. Lesoinne. Reduced-order fluid/structure modeling of a complete aircraft configuration. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 :5730–5742, 2006.

[97] M. Loève. Fonctions aléatoires du second ordre. *CR Acad. Sci. Paris*, 220, 1945.

[98] M. Loève. *Probability Theory. I, fourth edition, in : Graduate Texts in Mathematics, vol. 45*. Springer-Verlag, New York, 1977.

[99] M. Loève. *Probability Theory. II, fourth edition, in : Graduate Texts in Mathematics, vol. 46*. Springer-Verlag, New York, 1978.

[100] L. Machiels, Y. Maday, and A. T. Patera. Output bounds for reduced-order approximations of elliptic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(26-27) :3413–3426, 2001.

[101] Y. Maday, A. T. Patera, and G. Turinici. Global a priori convergence theory for reduced-basis approximation of single-parameter symmetric coercive elliptic partial differential equations. *Comptes Rendus Mathematique*, 335(3) :289–294, 2002.

[102] O. Le Maître. A Newton method for the resolution of steady stochastic Navier-Stokes equations. *Computers and Fluids*, 2007. submitted.

[103] O. Le Maître and A. Nouy. Generalized spectral decomposition method for stochastic Navier-Stokes equations. *In preparation*, 2008.

[104] O. Le Maître and A. Nouy. Generalized spectral decomposition method for stochastic Navier-Stokes equations. *In preparation*, 2008.

[105] P. Malliavin. *Stochastic Analysis*. Springer-Verlag, Berlin, 1997.

[106] L. Mathelin and O. Le Maître. Dual-based a posteriori error estimate for stochastic finite element methods. *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*, 2 :83–116, 2007.

[107] H. G. Matthies, C. E. Brenner, C. G. Bucher, and C. G. Soares. Uncertainties in probabilistic numerical analysis of structures and solids - stochastic finite elements. *Structural Safety*, 19(3) :283–336, 1997.

[108] H. G. Matthies and A. Keese. Galerkin methods for linear and nonlinear elliptic stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(12-16) :1295–1331, 2005.

[109] R.-E. Melchers. *Structural reliability analysis and prediction.* John Wiley and Sons, 1999.

[110] J. M. Melenk and I. Babuška. The partition of unity method : basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 39 :289–314, 1996.

[111] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculation by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, 21(6) :1087–1092, 1953.

[112] Ian M. Mitchell. The flexible, extensible and efficient toolbox of level set methods. *Journal of Scientific Computing*, 25(2-3) :300–329, 2007.

[113] N. Moës, E. Béchet, and M. Tourbier. Imposing dirichlet boundary conditions in the extended finite element method. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 67(12) :1641–1669, 2006.

[114] N. Moës, M. Cloirec, P. Cartraud, and J.F. Remacle. A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Comp. Meth. App. Mech. Eng.*, 192 :3163–3177, 2003.

[115] N. Moës, J. Dolbow, and T. Belytschko. A finite element method for crack growth without remeshing. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 46 :131–150, 1999.

[116] P. B. Nair and A. J. Keane. Stochastic reduced basis methods. *AIAA Journal*, 40(8) :1653–1664, 2002.

[117] H. Niederreiter. *Random Number Generation and quasi-Monte Carlo Methods.* SIAM, Philadelphia, PA, 1992.

[118] J. A. Nitsche. Uber ein variationsprinzip zur Lösung dirichlet-problemen bei verwendung von Teilräumen, die keinen randbedingungen unteworfen sind. *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg*, 36 :9–15, 1971.

[119] A. Nouy. A generalized spectral decomposition technique to solve a class of linear stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(45-48) :4521–4537, 2007.

[120] A. Nouy. Méthode de construction de bases spectrales généralisées pour l'approximation de problèmes stochastiques. *Mécanique & Industries*, 8(3) :283–288, 2007.

[121] A. Nouy. Generalized spectral decomposition method for solving stochastic finite element equations : invariant subspace problem and dedicated algorithms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197 :4718–4736, 2008.

[122] A. Nouy and A. Clément. An extended stochastic finite element method for the numerical simulation of random multi-phased materials. *In preparation*, 2009.

[123] A. Nouy, A. Clément, F. Schoefs, and N. Moës. An extended stochastic finite element method for solving stochastic partial differential equations on random domains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197 :4663–4682, 2008.

[124] A. Nouy and P. Ladevèze. Multiscale computational strategy with time and space homogenization : a radial-type approximation technique for solving micro problems. *International Journal for Multiscale Coputational Engineering*, 170(2) :557–574, 2004.

[125] A. Nouy and O. Le Maître. Generalized spectral decomposition method for stochastic non linear problems. *Journal of Computational Physics*, 228(1) :202–235, 2009.

[126] A. Nouy, F. Schoefs, and N. Moës. X-SFEM, a computational technique based on X-FEM to deal with random shapes. *European Journal of Computational Mechanics*, 16(2) :277–293, 2007.

[127] B. Øksendal. *Stochastic Differential Equations. An Introduction with Applications, fifth ed.* Springer-Verlag, 1998.

[128] S.J. Osher and J. A. Sethian. *Fronts propagating with curvature dependent speed : algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations*, volume 79. 1988.

[129] A. Papoulis. *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes.* McGraw-Hill, New York, NY, 1984.

[130] C.E. Powell and H.C. Elman. Block-diagonal precondioning for the spectral stochastic finite elements systems. Technical Report TR-4879, University of Maryland, Dept. of Computer Science, 2007.

[131] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C - The Art of Scientific Computing.* Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition, 1997.

[132] B. Puig, F. Poirion, and C. Soize. Non-gaussian simulation using hermite polynomial expansion : convergences. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 17 :253–264, 2002.

[133] S.S. Ravindran. Reduced-order adaptive controllers for fluid flows using pod. *J. of Scientific Computing*, 15(4) :457–478, 2000.

[134] M.T. Reagan, H.N. Najm, R.G. Ghanem, and O.M. Knio. Uncertainty quantification in reacting flow simulations through non-intrusive spectral projection. *Combustion and Flames*, 132 :545–555, 2003.

[135] F. Riesz and B. Sz.-Nagy. *Functional Analysis.* Dover Publications, New York, NY, 1990.

[136] C.P. Robert. *The Bayesian Choice.* Springer Verlag, New York, 1994.

[137] M. Rosenblatt. Remarks on a multivariate transformation. *Ann. Math. Stat.*, 23 :470–472, 1952.

[138] Y. A. Rozanov. *Random Fields and Stochastic Partial Differential Equations.* Kluwer, Dordrecht, 1998.

[139] Y. Maday N. C. Nguyen A. T. Patera S. Boyaval, C. Le Bris. A reduced basis approach for variational problems with stochastic parameters : Application to heat conduction with variable robin coefficient. Technical Report Rapport de recherche RR-6617 (2008), INRIA, 2008.

[140] Y. Saad. *Numerical methods for large eigenvalue problems.* Halstead Press, New York, 1992.

[141] S. K. Sachdeva, P. B. Nair, and A. J. Keane. Hybridization of stochastic reduced basis methods with polynomial chaos expansions. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 21(2) :182–192, 2006.

[142] S. Sakamoto and R. Ghanem. Polynomial chaos decomposition for the simulation of non-gaussian non-stationary stochastic processes. *ASCE J. Eng. Mech.*, 128(2) :190–201, 2002.

[143] A. Sameh and Z. Tong. The trace minimization method for the symmetric generalized eigenvalue problem. *J. Comput. Appl. Math.*, 123 :155–175, 2000.

[144] G. Saporta. *Probabilitś, Analyse des donnés et Statistique.* 2nd ed., Editions Technip, Paris., 1990.

[145] G. I. Schüeller. A state-of-the-art report on computational stochastic mechanics. *Prob. Engrg. Mech.*, 14 :197–321, 1997.

[146] G. I. Schüeller and P. D. Spanos (eds). *Monte Carlo Simulation.* Balkema, Rotterdam, 2001.

[147] D.W. Scott. *Multivariate Density Estimation : Theory, Practice, and Visualization.* Wiley, New York, 1992.

[148] J.A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science.* Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999.

[149] C. E. Shannon. A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal*, 27 :379–423 ;623–656, 1948.

[150] M. Shinozuka and G. Deodatis. Simulation of stochastic processes and fields. *Prob. Engrg. Mech.*, 14 :203–207, 1997.

[151] B. W. Silverman. Smoothed functional principal components analysis by choice of norm. *Ann. Statist.*, 24(1) :1–24, 1996.

[152] L. Sirovich. Turbulence and the dynamics of coherent structures, part 1 : Coherent structures. *Quarterly of Applied Mathematics*, 45(3) :561–571, 1987.

[153] S. A. Smolyak. Quadrature and interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions. *Sov. Math. Dokl*, 3 :240–243, 1963.

[154] C. Soize. Non-gaussian positive-definite matrix-valued random fields for elliptic stochastic partial differential operators. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(1-3) :26–64, 2006.

[155] C. Soize and R. Ghanem. Physical systems with random uncertainties : chaos representations with arbitrary probability measure. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26(2) :395–410, 2004.

[156] J. Spall. *Introduction to Stochastic Search and Optimization.* Wiley, New York, 2003.

[157] G. Strang and G. J. Fix. *An Analysis of the Finite Element Method.* Wellesley-Cambridge Press, Wellesley, MA, 1986.

[158] T. Strouboulis, I. Babuška, and K. Copps. The design and analysis of the Generalized Finite Element Method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 182 :43–71, 2000.

[159] B. Sudret. Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansions. *Reliability Engineering & System Safety*, 93(7) :964–979, 2008.

[160] B. Sudret and A. Der Kiureghian. Stochastic finite element methods and reliability. a state-of-the-art report. Technical Report UCB/SEMM-2000/08, Technical Report, Department of Civil & Environmental Engineering, University of California, Berkeley, CA, 2000.

[161] N. Sukumar, D.L. Chopp, N. Moës, and T. Belytschko. Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 :6183–6200, 2001.

[162] D. M. Tartakovsky and D. B. Xiu. Stochastic analysis of transport in tubes with rough walls. *Journal of Computational Physics*, 217 :248–259, 2006.

[163] J. Thompson, Z. Warsi, and C. Mastin. *Numerical Grid Generation.* Elsevier Science, Amsterdam, 1985.

[164] E. Vanmarcke. *Random Fields : Analysis and Synthesis.* The MIT Press, Cambridge, MA, 1988.

[165] J. B. Walsh. *An introduction to stochastic partial differential equations.* In Ecole dŠété de Probabilités de Saint Flour XIV. Springer, Berlin, 1984.

[166] R.W. Walters. Towards stochastic fluid mechanics via polynomial chaos. *AIAA Paper*, 0413, 2003.

[167] X. Wan and G.E. Karniadakis. An adaptive multi-element generalized polynomial chaos method for stochastic diffential equations. *J. Comp. Phys.*, 209 :617–642, 2005.

[168] X. Wan and G.E. Karniadakis. Multi-element generalized polynomial chaos for arbitrary propability measures. *SIAM J. Sci. Comp.*, 28(3) :901–928, 2006.

[169] N. Wiener. The homogeneous chaos. *Am. J. Math.*, 60 :897–936, 1938.

[170] K. Willcox and J. Peraire. Balanced model reduction via the proper orthogonal decomposition. *AIAA Journal*, 40(11) :2323–2330, 2002.

[171] D. B. Xiu and G. E. Karniadakis. The Wiener-Askey polynomial chaos for stochastic differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24(2) :619–644, 2002.

[172] D. B. Xiu and D. M. Tartakovsky. Numerical methods for differential equations in random domains. *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(3) :1167–1185, 2006.