



HAL
open science

Optimisation de forme numérique de problèmes multiphysiques et multiéchelles : application aux échangeurs de chaleur

Franck Mastrippolito

► **To cite this version:**

Franck Mastrippolito. Optimisation de forme numérique de problèmes multiphysiques et multiéchelles : application aux échangeurs de chaleur. Autre. Université de Lyon, 2018. Français. NNT : 2018LY-SEC043 . tel-02162420

HAL Id: tel-02162420

<https://theses.hal.science/tel-02162420v1>

Submitted on 21 Jun 2019

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.



ÉCOLE
CENTRALE LYON

Numéro d'ordre : 2018LYSEC043

THÈSE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON
opérée au sein de
l'École Centrale de Lyon

École Doctorale 162 : Mécanique, Énergétique, Génie Civil et Acoustique

Spécialité : Mécanique des fluides et Énergétique

Soutenue publiquement le 14/12/2018, par :

Franck MASTRIPPOLITO

**Optimisation de forme numérique de
problèmes multiphysiques et
multiéchelles :**
Application aux échangeurs de chaleur

Devant le jury composé de :

Christophe CORRE	Professeur, École Centrale de Lyon	<i>Président du jury</i>
Jérôme BELLETTRE	Professeur, Université de Nantes	<i>Rapporteur</i>
Régis DUVIGNEAU	Chargé de Recherche, INRIA	<i>Rapporteur</i>
Céline HELBERT	Maître de Conférences, École Centrale de Lyon	<i>Examinatrice</i>
Stéphane AUBERT	Professeur, École Centrale de Lyon	<i>Directeur de thèse</i>
Frédéric DUCROS	HDR, CEA LITEN	<i>Co-directeur de thèse</i>
Manuel HENNER	Docteur-Ingénieur, Valeo Systèmes Thermiques	<i>Invité</i>
Martin FERRAND	Ingénieur, EDF R&D	<i>Invité</i>
Jean-François FOURMIGUÉ	Ingénieur, CEA LITEN	<i>Invité</i>

*A mes grands-parents,
F., A., D. et S.*

Remerciements

Le présent manuscrit marque la fin de trois ans (et quelques mois) de travail. Toutefois, il n'aurait pas pu aboutir sans les nombreux soutiens que j'ai reçus, tant sur le plan scientifique et professionnel que personnel. Je vais donc, avec plaisir me plier, à la tradition des remerciements, ma seule hantise étant d'oublier quelqu'un ...

Je tiens tout d'abord à remercier les membres du jury d'avoir accepté d'évaluer mes travaux de thèse : Christophe Corre qui a présidé le jury ; Regis Duvigneau et Jérôme Belletre qui ont rapporté le mémoire, et dont les remarques ont permis sans aucun doute de l'améliorer ; Céline Helbert, dont les remarques ont été bénéfiques plus d'une fois au cours de cette thèse et m'ont permis d'appréhender le monde du krigeage.

J'exprime également ma plus grande gratitude à mes deux directeurs de thèse, pour leur implication tout au long de ces trois années. Tout d'abord à Frédéric Ducros, à l'initiative de ce sujet de thèse au CEA. Je te remercie pour la disponibilité dont tu as fait preuve tout au long de ces trois ans. Nos échanges, souvent constructifs, ont été parfois animés, je le reconnais. Ils m'ont toutefois appris à construire un argumentaire solide et rigoureux pour réussir à te convaincre (ou pas :)). Tes plaisanteries me manqueront (je n'oublierais pas l'histoire du lion et de la gazelle;)). Tes conseils (scientifique mais pas que) me serviront encore, j'en suis sûr.

Je souhaite ensuite exprimer toute ma gratitude à Stéphane Aubert. Sans la vision scientifique et la rigueur que tu as su m'insuffler, ces travaux ne seraient certainement pas les mêmes. Tu as su en permanence, et avec pertinence, remettre en question les résultats pour pousser toujours plus loin l'analyse. Travailler avec toi fût extrêmement enrichissant ! Je pense que je te dois le « chercheur » que je suis devenu. Merci encore à vous deux.

Cette thèse s'inscrivait dans un consortium entre le CEA, l'École Centrale de Lyon, Valeo et EDF. La partie la plus complexe de cette entente restera, je pense, la signature du contrat (Fred, tu nous dois toujours une bouteille de champagne pour avoir signé avant la fin de la thèse!). Cet environnement m'a permis de passer un peu de temps dans chacune des entités et d'y faire des rencontres toujours enrichissantes.

Je remercie Valeo Systèmes Thermiques, pour sa participation au financement de cette thèse. Plus particulièrement, je remercie Manuel Henner et Nicolas François pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux et leurs conseils sur la modélisation des échangeurs. Merci

Manuel d'avoir participé au jury en tant qu'invité.

Au début de ces trois années, j'ai passé quelques mois au sein du groupe I83 d'EDF pour m'initier à l'utilisation de *Code_Saturne*. Je remercie David Monfort, chef de groupe à cette époque de m'avoir accueilli. J'exprime ma profonde gratitude à Martin Ferrand, chef de projet *Code_Saturne*. Tu as activement participé à l'aboutissement de cette thèse de part ta disponibilité sur le debugage de mes simulations, ton intérêt pour mes travaux et tes remarques toujours pertinentes. Merci d'avoir participé au jury en tant qu'invité. Les quelques mois passés dans la grisaille de Chatou ont été agréables grâce à l'ambiance de l'équipe : merci Sofiane pour ta bonne humeur et nos discussions sur la turbulence et bien d'autres sujets plus « métalliques », merci à Erwan et Yvan pour leurs conseils quant à l'utilisation de *Code_Saturne*, merci Marie-Charlotte pour tes conseils sur Grenoble et merci à l'équipe des thésards (Pierre, Benjamin, Jean-François) pour les pauses cafés.

J'ai ensuite migré plus au sud à Écully au sein du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustiques. Je remercie Isabelle Trébinjac de m'avoir accueilli au sein du groupe Turbomachines malgré le comportement plutôt immobile d'un échangeur de chaleur. Je remercie tous les membres du groupe pour l'ambiance chaleureuse : Martin pour nos échanges génétiques plus que constructifs, Pascal Ferrand tes conseils et ton recul ; Seb pour nos pauses musicales (j'attends encore les enregistrements!), Alexis pour tes conseils sur la poursuite de ma carrière, Antoine, Gilbert, Pierre, Lionel, Xavier, Benoît pour les pauses cafés. Je remercie également mes collègues doctorants : Annabelle avec qui j'ai partagé mon bureau, Quentin pour tes conseils et ta joie de vivre, Étienne pour ton sens de la nuance et ton expertise Python, Victor et ses célèbres demis au baby, Jean-François pour nos (longues) discussion sur tout et rien, Zlatko, Gherardo, Johannes, Wiebke, Saira, et les petits nouveaux : Anne-Lise, Thomas, Ludovic et Valdo . Une pensée toute particulière pour Clément le stagiaire et sa vision bien à lui des échangeurs. Je remercie également Pierre Dusquesne pour ses encouragements au long de cette dernière année, ses conseils et, de temps à autre, son rôle de messenger !

J'ai enfin fini mon périple à Grenoble, au CEA Liten. Je remercie Patrice Tochon, chef du département de m'avoir accueilli dans ses équipes. Je remercie également Olivier Lemaire, chef de service, pour sa bienveillance tout au long de ces trois ans. J'exprime ma gratitude à Jean-François Fourmigué, qui malgré ses responsabilités a toujours su trouver une heure pour répondre à mes questions sur les échangeurs. Il fut pour cela une mine d'informations. J'espère que j'aurais au moins pu te transmettre un peu de mon goût pour l'outil mathématique. Ma période au CEA a été marquée par le fameux bâtiment D4, son amiante et l'ambiance qui y régnait. Merci Quentin, mon co-bureau du bureau d'à côté pour tous ces bons moments dans et hors du bâtiment, nos pauses me manquent déjà ! Bon courage pour la suite de la thèse ! Merci Laura, ta bonne humeur et ton calme sont devenus légendaires :P Je ne te tiendrai pas rigueur d'avoir évité mon bureau à mes débuts ! Merci Amélie, presque voisine, pour les sortie rando et le reste ! Merci à toute l'équipe des techs pour nos repas du midi animés : Jérôme, continuons à promouvoir la spiruline, Lucas, je finirai de lire ta bibliothèque un jour, Gilles et Léandre. Merci Thibault pour ta gentillesse, nous avons finalement passé plus de temps à nous voir hors du CEA, à bientôt dans les Pyrénées ! Merci enfin à tout le monde pour les pauses cafés (souvent trop longues, c'est vrai) : Nadia et tes conseils pour la qualif ; Nicolas T. et tes connaissances entropiques ; Pierre C. pour tes conseils sur l'utilisation de Meshing, (à bas le $k-\omega SST$!)

Philippe pour ta bonne humeur ; Mathieu pour ton initiation aux secrets de la calligraphie féminine ; Arnaud pour ton humour délirant, Brigitte, Pham, Jérémie, Nicolas V., Sylvie, Bénédicte, Alban, Nahia, Grégoire, Clément (à bientôt à Pau), Greg, Arnaud le voyageur, Jérôme P. pour la gestion des licences, Fabrice (tu avais raison, la conclusion est que ça ne sert à rien) et Zoé. Mention spéciale à mes co-bureaux successifs : Raphaël et ses mails ... récréatifs ? (attention aux destinataires) et Alessia qui a assisté aux premières loges à la rédaction de ce mémoire et qui a pu constater en direct l'amour que je porte à Windows !

Je tiens à remercier les anciens de l'INSA : Caroline qui a toujours voulu lire mes papiers, bon courage chez COMSOL, Lisa, Amandine, Quentin, nous avons passé de bon week-ends ensemble dans les Alpes, se furent de vrai moment d'oxygène !

Merci également aux Chartreux : Julien, Yannick, Corinne et Joël, vous m'avez aidé à trouver un exutoire bienvenu pendant ma période de rédaction. Arigato Gozaimasu !

Enfin merci à ma famille ! Merci Jean-Marc et Christine pour votre soutien (et pour la relecture, il faudra écrire au Scrabble pour ajouter krigeage et effet de pépite au dictionnaire officiel !).

Je remercie mes parents, mon frère et ma belle-sœur, qui malgré la distance m'ont toujours soutenu et encouragé à continuer. Cette thèse est en partie pour vous. J'espère vous avoir rendu fiers.

Enfin je remercie Marion, sans qui cette thèse n'aurait jamais abouti (ou même commencé d'ailleurs). Tu as toujours assisté à mes présentations en avant-première, en me permettant de les épurer. Merci pour ta patience (quand je parlais de math !), tes encouragements et tes conseils, qui m'ont permis de surmonter les moments difficiles et de ne jamais perdre confiance.

Les échangeurs de chaleur sont utilisés dans de nombreux secteurs industriels. L'optimisation de leurs performances est donc de première importance pour réduire la consommation énergétique. Le comportement d'un échangeur est intrinsèquement multiéchelle : l'échelle locale de l'intensification des phénomènes de transfert thermique côtoie une échelle plus globale où interviennent des phénomènes de distribution de débit. Un échangeur de chaleur est également le siège de différents phénomènes physiques, tels que la mécanique des fluides, la thermique et l'encrassement.

Les présents travaux proposent une méthode d'optimisation multiobjectif de la forme des échangeurs, robuste, pouvant traiter les aspects multiéchelles et multiphysiques et applicable dans un contexte industriel. Les performances de l'échangeur sont évaluées par des simulations de mécanique des fluides numérique (CFD) et par des méthodes globales (ε -NUT). Suite à une étude bibliographique, une méthode de métamodélisation par krigeage associée à un algorithme génétique ont été retenus. Des méthodes de visualisation adaptées (*clustering* et *Self-Organizing Maps*) sont utilisées pour analyser les résultats.

Le métamodèle permet d'approcher la réponse d'un simulateur (CFD) et d'en fournir une prédiction dont l'interrogation est peu onéreuse. Le krigeage permet de prendre en compte une discontinuité et des perturbations de la réponse du simulateur par l'ajout d'un effet de pépite. Il permet également l'utilisation de stratégies d'enrichissement construisant des approximations précises à moindre coût. Cette méthode est appliquée à différentes configurations représentatives du comportement de l'échangeur, permettant de s'assurer de sa robustesse lorsque le simulateur change, lorsque l'aspect multiéchelle est pris en compte ou lorsque une physique d'encrassement est considérée.

Il a été établi que l'étape de métamodélisation assure la robustesse de la méthode et l'intégration de l'aspect multiéchelle. Elle permet aussi de construire des corrélations à l'échelle locale qui sont ensuite utilisées pour déterminer les performances globales de l'échangeur. Dans un contexte industriel, les méthodes d'analyse permettent de mettre en évidence un nombre fini de formes réalisant un compromis des fonctions objectif antagonistes.

Mot clefs : Échangeur de chaleur, mécanique des fluides numérique - CFD, optimisation multiobjectif, krigeage, stratégie d'enrichissement, *Self-Organizing Maps*

Abstract

Heat exchangers are used in many industrial applications. Optimizing their performances is a key point to improve energy efficiency. Heat exchanger behaviour is a multi-scale issue where local scale enhancement mechanisms coexist with global scale distribution ones. It is also multi-physics such as fluid mechanics, heat transfer and fouling phenomena appear.

The present work deals with multi-objective shape optimization of heat exchanger. The proposed method is sufficiently robust to address multi-scale and multi-physics issues and allows industrial applications. Heat exchanger performances are evaluated using computational fluid dynamics (CFD) simulations and global methods (ε -NUT). The optimization tools are a genetic algorithm coupled with kriging-based metamodeling. Clustering and Self-Organizing Maps (SOM) are used to analyse the optimization results.

A metamodel builds an approximation of a simulator response (CFD) whose evaluation cost is reduced to be used with the genetic algorithm. Kriging can address discontinuities or perturbations of the response by introducing a nugget effect. Adaptive sampling is used to build cheap and precise approximation. The present optimization method is applied to different configurations which are representative of the heat exchanger behaviour for both multi-scale and multi-physics (fouling) aspects.

Results show that metamodeling is a key point of the method, ensuring the robustness and the versatility of the optimisation process. Also, it allows to build correlations of the local scale used to determine the global performances of the heat exchanger. Clustering and SOM highlight a finite number of shapes, which represent a compromise between antagonist objective functions, directly usable in an industrial context.

Keywords : Heat exchanger , computational fluid dynamics - CFD, multi-objective optimization, kriging, adaptive sampling, Self-Organizing Maps

Table des matières

Table des matières	xiii
Table des figures	xxi
Liste des tableaux	xxvii
Liste des symboles	xxix
1 Introduction	1
1.1 Contexte	1
1.2 Objectifs	2
1.3 Organisation du manuscrit	3
I État de l’art	5
2 Les échangeurs, modélisation de la physique	7
2.1 Les échangeurs de chaleur : généralités	8
2.1.1 Différentes classifications	8
2.1.2 Une classification basée sur la technologie	9
2.1.2.1 Les échangeurs tubulaires	9
2.1.2.2 Les échangeurs à plaques	10
2.1.2.3 Quelques critères de choix	12
2.1.3 Intensification des transferts thermiques	13
2.1.3.1 Différentes technologies d’intensification	13
2.1.3.2 Augmentation de la perturbation de la surface	14
2.1.3.3 Extension de surface	15
2.1.3.4 Création de tourbillons secondaires	15
2.1.3.5 Synthèse	16
2.1.4 Quelles problématiques pour l’utilisation des échangeurs ?	16
2.1.4.1 Mauvaise distribution du fluide entre les canaux	17
2.1.4.2 Des généralités de l’encrassement	17
2.1.4.3 ... à l’application aux échangeurs des circuits de recirculation des gaz d’échappement	18
2.1.5 Vers l’optimisation des échangeurs	20

2.2	Dimensionnement et modélisation des échangeurs	21
2.2.1	Une question d'échelle	21
2.2.1.1	Différentes échelles...	21
2.2.1.2	... pour différentes modélisations	22
2.2.2	Méthodes de dimensionnement globales	23
2.2.2.1	Hypothèses	23
2.2.2.2	Coefficient d'échange global	24
2.2.2.3	Différence de température moyenne logarithmique	24
2.2.2.4	Efficacité et nombre d'unité de transfert	25
2.2.2.5	Calcul des pertes de charge	26
2.2.2.6	Détermination des coefficients d'échange convectif et de frottement	27
2.2.3	Modélisation par la mécanique des fluides numérique	27
2.2.3.1	La CFD dans les échangeurs	27
2.2.3.2	Modélisation de la turbulence pour le transfert thermique	27
2.2.3.3	Utilisation de la CFD pour la prédiction des performances globales de l'échangeur	30
2.2.3.4	Modélisation de l'encrassement dans les EGR coolers	31
2.2.3.5	Notion de maillage : création et déformation	32
2.2.4	Synthèse des outils	34
2.3	Optimisation des échangeurs, revue de la littérature	35
2.3.1	Une question de performances	36
2.3.1.1	Performances à l'échelle locale	36
2.3.1.2	Performances à l'échelle globale	36
2.3.1.3	Approche thermodynamique	37
2.3.1.4	Autres critères	37
2.3.2	Optimisation thermique à l'échelle globale	37
2.3.3	Optimisation thermique à l'échelle locale ou canal	38
2.3.4	Optimisation de la distribution	38
2.3.5	Optimisation multiéchelle	41
2.4	Conclusions	41
3	Outils numériques pour l'optimisation	43
3.1	Cadre général de l'optimisation multiobjectif	44
3.1.1	Notion de dominance	47
3.1.2	Optimalité au sens de Pareto	48
3.1.3	Résolution d'un problème d'optimisation multiobjectif	50
3.1.3.1	Moteurs d'optimisation	50
3.1.3.2	Conditionneurs	51
3.1.3.3	Carburants pour l'optimisation	52
3.1.3.4	De la véracité du solveur	53
3.2	Moteur d'optimisation : Algorithmes génétiques	53
3.2.1	Principe de fonctionnement	53
3.2.2	Algorithme NSGA-II	54
3.2.2.1	Fonctionnement global	55
3.2.2.2	Utilisation et limite du NSGA-II	56
3.3	Carburant pour l'optimisation : Métamodèles	56
3.3.1	Pourquoi la métamodélisation ?	56

3.3.2	Quelles méthodes?	58
3.3.2.1	Différentes méthodes de métamodélisation	58
3.3.2.2	Différentes méthodes d'échantillonnage	58
3.3.2.3	Choix des méthodes	60
3.3.3	Krigeage, formulation	61
3.3.3.1	Construction du métamodèle de krigeage	61
3.3.3.2	Estimation des paramètres de krigeage	63
3.3.3.3	Modélisation du bruit - effet de pépite	65
3.3.3.4	Options de construction du modèle de krigeage	66
3.3.4	Validation des métamodèles	66
3.3.5	Critères d'enrichissement	68
3.3.5.1	Critères mono-objectifs mono-observations	69
3.3.5.2	Critères mono-objectifs multiobservations	71
3.3.5.3	Critères multiobjectifs	71
3.3.5.4	Choix d'un critère d'arrêt	73
3.4	Analyse des résultats	74
3.4.1	Analyse de la convergence de la solution de l'AG	74
3.4.1.1	Évaluation des fronts de Pareto : mesure de l'hypervolume	74
3.4.1.2	Évaluation des ensembles de Pareto	75
3.4.1.3	Synthèse	76
3.4.2	Classification et visualisation des résultats	76
3.4.2.1	Classification des solutions : <i>Clustering</i>	77
3.4.2.2	Visualisation des solutions : <i>Self-Organizing Maps</i>	79
3.5	Synthèse des outils	81

II Contributions 83

4	Présentation des configurations de test de l'étude	85
4.1	Introduction	86
4.2	Présentation de la configuration ONESIDE	87
4.2.1	Géométrie	87
4.2.2	Mise en données	87
4.2.2.1	Écoulement et propriétés physiques	88
4.2.2.2	Conditions aux limites	89
4.2.2.3	Modèles de turbulence	90
4.2.2.4	Paramètres numériques	90
4.2.3	Post-traitement des résultats	90
4.2.4	Maillage	92
4.2.5	Validation expérimentale	95
4.2.5.1	Dispositifs expérimentaux	96
4.2.5.2	Mise en données	96
4.2.5.3	Comparaison	97
4.2.5.4	Synthèse	100
4.3	Présentation de la configuration TWOSIDE	100
4.3.1	Géométrie	100
4.3.2	Mise en données	101
4.3.2.1	Écoulement et propriétés physiques	102

4.3.2.2	Conditions aux limites	102
4.3.2.3	Modèles de turbulence	102
4.3.2.4	Paramètres numériques	102
4.3.3	Maillage	102
4.3.4	Post-traitement	103
4.3.5	Modélisation de l'encrassement	104
4.3.5.1	Modèle d'encrassement	104
4.3.5.2	Implémentation : déformation de l'interface et couplage temporel	107
4.3.5.3	Avantages et limites	109
4.4	Présentation de la configuration ECH-0D	110
4.4.1	Caractéristiques de l'échangeur	111
4.4.2	Modélisation thermo-hydraulique	111
4.5	Présentation de la configuration ECH-3D	114
4.5.1	Géométrie de l'échangeur	114
4.5.2	Mise en données	115
4.5.2.1	Maillage	115
4.5.2.2	Conditions aux limites et de volumes	117
4.5.2.3	Écoulement et propriétés physiques	118
4.5.2.4	Modélisation de la turbulence	118
4.5.2.5	Paramètres numériques	119
4.5.2.6	Implémentation	119
4.5.3	Étude de sensibilité au maillage de la partie distribution	120
4.5.4	Post-traitement pour l'optimisation	120
5	Robustesse aux paramètres de modélisation	123
5.1	Introduction	124
5.1.1	Problème d'optimisation	124
5.1.2	Changement de variable	125
5.2	Optimisation de référence	126
5.2.1	Construction du métamodèle et optimisation	127
5.2.2	Analyse des résultats	128
5.3	Robustesse aux modèles de turbulence	130
5.3.1	Simulations numériques	130
5.3.2	Résultats de l'optimisation	130
5.3.2.1	Construction des métamodèles et optimisation	131
5.3.2.2	Analyse des résultats de l'optimisation	131
5.3.3	Analyse des surfaces de réponse	133
5.3.4	Conclusions et perspectives	136
5.4	Méthode de déformation de maillage	137
5.4.1	Avantages et inconvénients du morphing	137
5.4.2	Mise en données	138
5.4.2.1	Choix des fonctions	138
5.4.2.2	Choix d'un maillage initial	139
5.4.3	Comparaison des résultats	141
5.4.3.1	Qualité de la déformation et des maillages	141
5.4.3.2	Temps de calcul	144
5.4.3.3	Métamodélisation et optimisation	144

5.4.4	Conclusions et perspectives	150
5.5	Utilisation d'un autre solveur CFD	151
5.5.1	Mise en données	151
5.5.2	Comparaison des plans d'expériences et des métamodèles	152
5.5.3	Analyse des résultats de l'optimisation	152
5.5.4	Comparaison des formes et conclusion	155
5.6	Conclusions du chapitre	156
6	Robustesse à la complexité physique	159
6.1	Introduction	160
6.2	Obtention de corrélations pour l'intensificateur	160
6.2.1	Construction des métamodèles	161
6.2.1.1	Stratégie d'enrichissement	161
6.2.1.2	Options de construction	162
6.2.2	Analyse des métamodèles	163
6.2.2.1	Convergence des métamodèles	163
6.2.2.2	Qualité de la prédiction et sensibilité	165
6.2.3	Analyse des corrélations	165
6.2.4	Optimisation de l'intensificateur	165
6.3	Passage à l'échelle par une méthode globale	168
6.3.1	Présentation du problème d'optimisation	169
6.3.2	Analyse des résultats de l'optimisation	171
6.3.2.1	Résultats de l'optimisation	171
6.3.2.2	Analyse des relations entre performances locales et globales	171
6.3.3	Étude de sensibilité des performances thermiques	172
6.3.4	Conclusions	173
6.4	Passage à l'échelle via la simulation numérique	174
6.4.1	Problème d'optimisation	175
6.4.2	Construction des métamodèles	175
6.4.2.1	Stratégie d'enrichissement	176
6.4.2.2	Options de construction	177
6.4.3	Analyse des résultats	177
6.4.3.1	Convergence et qualité des métamodèles	177
6.4.3.2	Métamodélisation de la distribution pour l'analyse	179
6.4.3.3	Résultats de l'optimisation	180
6.4.4	Conclusions	184
6.5	Encrassement	184
6.5.1	Temps courts	185
6.5.1.1	Métamodélisation	185
6.5.1.2	Résultats de l'optimisation	187
6.5.2	Temps longs	188
6.5.2.1	Métamodélisation	189
6.5.2.2	Optimisation	191
6.5.3	Conclusions	194
6.6	Conclusions du chapitre	194
7	Conclusions et perspectives	197

Annexes	203
A Mécanique des fluides numérique et <i>Code_Saturne</i>	203
A.1 Équations de Navier-Stokes	203
A.2 Modélisation de la turbulence	204
A.2.1 Équations moyennées	204
A.2.2 Modèles de turbulence - tenseur de Reynolds	205
A.2.2.1 Modèle $k - \epsilon$	206
A.2.2.2 Modèle $k - \omega$	206
A.2.2.3 Modèle $k - \omega$ SST	207
A.2.2.4 Modèle $Bl - \overline{v^2}/k$	208
A.2.3 Modélisation des flux de chaleur turbulents	209
A.3 Présentation de <i>Code_Saturne</i>	209
A.3.1 Fonctionnalités générales	209
A.3.1.1 Intégration temporelle	209
A.3.1.2 Discrétisation spatiale	210
A.3.2 Couplage monolithique	212
A.3.3 Surcharge du coefficient d'échange	213
A.3.4 Communication entre <i>Code_Saturne</i> et les métamodèles	213
A.4 Mise en données de la périodicité	214
A.4.1 Champ de vitesse	214
A.4.2 Champ de pression	214
A.4.3 Champ de température	215
A.4.4 Application dans <i>Code_Saturne</i>	216
B Morphing par fonctions à base radiale	217
B.1 Formulation	218
B.1.1 Interpolation du champ de déplacement	218
B.1.2 Condition d'interpolation	219
B.1.3 Condition pour le traitement de plans de glissement	219
B.1.3.1 Annuler le déplacement normal	219
B.1.3.2 Annuler la contribution tangentielle des points glissants	220
B.1.3.3 Plans de glissement mobiles	220
B.1.4 Calcul des poids	222
B.2 Procédure de déformation	222
B.3 Choix des fonctions	224
B.3.1 Fonctions à base radiale	224
B.3.2 Fonctions de distance	225
B.4 Algorithme glouton et amélioration des performances	225
B.4.1 Revue de la littérature	226
B.4.2 Proposition d'un algorithme amélioré	227
B.4.2.1 Formulation mémoire	227
B.4.2.2 Résolution itérative	227
B.4.3 Restriction de l'espace déformé	230
B.5 Qualité de la déformation	231
B.6 Valorisation	233
B.7 Liste des symboles	233

C Performances des échangeurs de chaleur et des transferts thermiques	235
C.1 Approches thermodynamiques	235
C.1.1 Production d'entropie d'un échangeur	236
C.1.2 Irréversibilités des transferts thermiques	237
C.1.3 Irréversibilités des frottements	239
C.1.4 Distinction des contributions - approche multiobjectif	239
C.1.5 Conclusions	239
C.1.6 Ouverture vers la notion d'irréversibilités locales en CFD	239
C.2 Synergie	240
D Outils pour l'optimisation	241
D.1 Moteurs d'optimisation	241
D.1.1 Méthodes classiques.	242
D.1.2 Méthodes méta-heuristiques.	243
D.1.3 Méthodes hybrides.	244
D.1.4 Quelques algorithmes génétiques	244
D.1.5 Opérateurs génétiques du NSGA-II	245
D.1.5.1 Sélection par tournois	246
D.1.5.2 Croisement par <i>Simulated Binary Crossover</i>	246
D.1.5.3 Mutation polynomiale	247
D.1.5.4 Évaluation de la diversité par <i>Crowding distance</i>	247
D.2 Conditionneurs	248
D.2.1 Méthodes d'agrégation.	248
D.2.2 Méthodes basées sur les normales.	248
D.2.3 Autres conditionneurs.	249
D.3 Formulation du krigeage	249
D.3.1 Définitions et rappels de statistique	249
D.3.2 Expression des termes du krigeage	253
D.3.3 Critères d'enrichissement	253
D.3.3.1 Critères mono-observations mono-objectifs	253
D.3.3.2 Critères mono-objectifs multiobservations	258
D.3.3.3 Critères multiobjectifs	261
Bibliographie	269

Table des figures

(2.1)	Vue schématique d'un échangeur tubes et calandre.	10
(2.2)	Différentes configurations de tubes et ailettes transversales continues.	10
(2.3)	Schématisme d'un échangeur à plaques à surface primaire.	11
(2.4)	Différents motifs de plaques.	11
(2.5)	Échangeur à plaque et ailettes : principe et différents types d'ailettes.	12
(2.6)	Augmentation de la rugosité dans les tubes.	15
(2.7)	Exemple de création de tourbillons secondaires.	16
(2.8)	Illustration du comportement asymptotique de l'encrassement.	19
(2.9)	Représentation schématique d'un échangeur de chaleur à plaques avec distributeur.	21
(2.10)	Exemples de la différenciation des trois échelles.	23
(2.11)	Représentation schématique des différentes approche de modélisation de la turbulence.	29
(2.12)	Représentation schématique des différents outils intervenant dans la modélisation des échangeurs de chaleur.	35
(3.1)	Classification des grands domaines de l'optimisation.	45
(3.2)	Représentation de l'espace faisable des paramètres et de l'espace atteignable des objectifs	46
(3.3)	Illustration du concept de dominance.	47
(3.4)	Représentation du rang de Goldberg et de de Fonseca et Fleming pour un problème à deux objectifs.	48
(3.5)	Illustration de l'ensemble de Pareto et du front de Pareto	49
(3.6)	Schéma de la communication entre le conditionneur, le moteur d'optimisation et le carburant pour l'optimisation.	51
(3.7)	Principe de fonctionnement des algorithmes génétiques.	54
(3.8)	Schématisme des trois phases de l'algorithme NSGA-II.	55
(3.9)	Exemple de trois LHS pour $N_d = 2$ et $N_o = 10$	60
(3.10)	Illustration de l'approximation par krigeage.	64
(3.11)	Mesure d'hypervolume pour un cas bi-objectif.	75
(3.12)	Évolution de la distribution des individus, répartis en 5 classes, au cours des générations.	76
(3.13)	Processus de création des groupes par la méthode des <i>K-means</i>	78
(3.14)	Exemple de <i>Self-Organizing Maps</i>	80

(3.15)	Représentation schématique de l'articulation des différents outils de la chaîne d'optimisation.	81
(4.1)	Représentation schématique de la configuration ONESIDE.	88
(4.2)	Représentation schématique des informations extraites de la simulation pour le calcul du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge.	91
(4.3)	Exemple de maillage de la configuration ONESIDE.	92
(4.4)	Étude de sensibilité au maillage pour les simulations utilisant le modèle de turbulence $k - \omega$ SST.	93
(4.5)	Étude de sensibilité au maillage pour les simulations utilisant le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$	94
(4.6)	Lignes de courant obtenues avec le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$	96
(4.7)	Comparaison des profils de vitesse moyenne axiale pour différentes positions x/h_{rib}	97
(4.8)	Comparaison des profils de la composante de cisaillement du tenseur des contraintes de Reynolds pour différentes positions x/h_{rib}	98
(4.9)	Comparaison des profils de vitesse moyenne verticale pour $y/h_{rib} = 1.1$ et des profils du coefficient de frottement à la paroi.	99
(4.10)	Comparaison des profils du nombre de Nusselt local.	99
(4.11)	Représentation schématique de la configuration TWOSIDE.	101
(4.12)	Représentation schématique des informations extraites de la simulation pour le calcul du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge.	103
(4.13)	Représentation schématique des deux étapes de lissage.	108
(4.14)	Illustration de la déformation du maillage suite à l'encrassement	108
(4.15)	Illustration du processus d'encrassement avec l'avancée en temps et les étapes de déformation du maillage et d'ajout de la résistance thermique.	109
(4.16)	Représentation des champs de vitesse (a) et de différence de température (b) dans le fluide avant et après encrassement	110
(4.17)	Représentation schématique (non à l'échelle) de la configuration ECH-0D.	111
(4.18)	Représentation schématique (non à l'échelle) de la simplification utilisée dans le modèle pour le calcul du coefficient d'échange global U	112
(4.19)	Représentation schématique (non à l'échelle) de la configuration ECH-3D et des dimensions associées.	115
(4.20)	Représentation du maillage de la configuration ECH-3D.	116
(4.21)	Représentation schématique de la mise en données pour la déformation de la configuration ECH-3D.	116
(4.22)	Représentation schématique des conditions aux limites de la configuration ECH-3D.	117
(4.23)	Étude de sensibilité au maillage pour la configuration ECH-3D	121
(4.24)	Variations des lignes de courant au centre du diffuseur et proche d'une paroi latérale pour trois instants.	122
(5.1)	Répartition des observations dans l'espace des paramètres.	126
(5.2)	Évolution de la distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans les différentes classes en fonction du nombre de générations.	127
(5.3)	Résultats de l'optimisation de référence.	129
(5.4)	Comparaison des deux optimisations reposant sur les métamodèles $k - \omega$ SST et $Bl - \overline{v^2}/k$	132

(5.5)	<i>Self-Organizing Maps</i> des individus de l'ensemble et du front de Pareto issu de l'optimisation depuis les métamodèles $Bl - \overline{v^2}/k$	133
(5.6)	Visualisation en perspective des surfaces de réponses du nombre de Nusselt (a) et du coefficient de perte de charge (b).	134
(5.7)	Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $\psi = 90$ deg.	135
(5.8)	Courbes de niveaux des surfaces de réponse du nombre de Nusselt lorsque $h_{rib}/H = 0.05$	136
(5.9)	Mise en données du morphing pour la configuration ONESIDE.	139
(5.10)	Projection des observations du plan d'expériences sur deux plans de l'espace des paramètres.	140
(5.11)	Illustration de la comparaison réalisée entre la stratégie de remaillage et la stratégie de <i>morphing</i>	140
(5.12)	Histogramme du pourcentage de cellules décentrées en fonction du nombre de simulations.	141
(5.13)	Comparaison de l'impact du remaillage et du <i>morphings</i> sur le maillage et la valeur du critère de décentrement.	142
(5.14)	Critères de qualité de la déformation.	143
(5.15)	Courbes de niveaux de la prédiction par la moyenne de krigeage de $-Nu/Nu_0$, dans le plan $(e/2H, \tilde{E})$ pour $h_{rib}/H = 0.3$	145
(5.16)	Représentation des résultats de l'optimisation avec les deux stratégies de maillage.	146
(5.17)	Comparaison des résultats des optimisations avec une stratégie de remaillage (a) et de <i>morphing</i> (b) dans l'espace des paramètres.	147
(5.18)	Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $h_{rib}/H = 0.3$	148
(5.19)	Représentation de l'influence des paramètres de portée du métamodèle de krigeage.	149
(5.20)	Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $h_{rib}/H = 0.3$ et après modification des paramètres de portée.	150
(5.21)	Comparaison des 441 observations évaluées grâce à ANSYS® Fluent en fonction des évaluations de référence pour Nu/Nu_0 (a) et C_f/C_{f0} (b). Les variations à $\pm 5\%$ sont indiquées par les lignes pointillées.	152
(5.22)	Résultats de l'optimisation de ANSYS® Fluent.	153
(5.23)	Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $h_{rib}/H = 0.3$	154
(5.24)	Évolution des valeurs des objectifs pour $h_{rib}/H = 0.15$ et $e/2H = 0.5$ en fonction de ψ pour la référence et ANSYS® Fluent.	155
(5.25)	Lignes de courant en aval du <i>rib</i> défini par $h_{rib}/H = 0.15$, $e/2H = 0.5$ et $\psi = 84$ deg.	156
(5.26)	Comparaison des formes de <i>ribs</i> obtenues suite à l'optimisation de référence (noir) et à partir des simulations ANSYS® Fluent (rouge).	156
(6.1)	Représentation schématique de l'algorithme d'enrichissement.	161
(6.2)	Évolution du nombre d'observations et des critères donnés par la MMSE et le q-EI en fonction des itérations de l'algorithme d'enrichissement.	163
(6.3)	Courbes de niveaux des surfaces de réponse pour $Re_{DH} = 8\ 000$ et deux valeurs de \tilde{E}	164
(6.4)	Variation du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge en fonction du nombre de Reynolds pour deux hauteurs de <i>rib</i>	166

(6.5)	Évolution de la distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans les différentes classes en fonction du nombre de générations.	167
(6.6)	Résultats de l'optimisation de référence TWOSIDE.	169
(6.7)	Représentation schématique de la procédure de résolution du problème d'optimisation ECH-0D.	170
(6.8)	Résultats de l'optimisation de la configuration ECH-0D.	172
(6.9)	Courbes représentant l'évolution des performances globales de l'échangeur en fonction des performances locales du <i>rib</i>	173
(6.10)	Variation des performances thermiques en fonction de la variation des paramètres	174
(6.11)	Représentation schématique de la procédure de résolution du problème d'optimisation ECH-3D.	176
(6.12)	Évolution des indicateurs de convergence de l'enrichissement en fonction du nombre d'itérations (l'itération 0 correspond au plan LHS). . .	178
(6.13)	Résultats de l'enrichissement.	179
(6.14)	Visualisation en perspective de la surface de réponse de l'écart-type de la distribution.	180
(6.15)	Résultats de l'optimisation de la configuration ECH-3D.	181
(6.16)	Illustration des cinq formes optimales de la configuration ECH-3D. . .	181
(6.17)	SOM des résultats de l'optimisation de la configuration ECH-3D. . . .	182
(6.18)	Courbes de niveaux de la vitesse d'encrassement pour deux valeurs de \bar{E} , avec et sans ajout d'un effet de pépite.	186
(6.19)	Front de Pareto pour l'optimisation du problème d'encrassement aux temps courts	187
(6.20)	<i>Self-Organizing Maps</i> des individus optimaux du problème d'optimisation de l'encrassement aux temps courts.	187
(6.21)	Comparaison de la prédiction des individus du front de Pareto entre les métamodèles sans prise en compte de l'encrassement et avec	190
(6.22)	Évolution de la distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans les différentes classes en fonction des générations pour $e/2H$	190
(6.23)	Front de Pareto de l'optimisation avec encrassement.	193
(6.24)	Visualisation des formes des centres de groupes	193
(A.1)	Schéma des informations géométriques (adapté de EDF R&D (2018b)).	210
(A.2)	Pile d'appel des fonctions lors de la résolution par <code>cs_solver</code>	213
(A.3)	Les conditions de périodicité sont en vert.	214
(B.1)	Illustration du plan de glissement mobile. L'état initial est en noir et l'état final en rouge	221
(C.1)	Illustration de l'évolution du nombre de production d'entropie (N_S) en fonction de l'efficacité (ε) pour différents rapports de température fluide 1/fluide 2.	238
(D.1)	Comparaison des différents critères d'enrichissement	256
(D.2)	Mesure d'hypervolume pour un cas bi-objectif.	263
(D.3)	Contour de la valeur des deux fonctions d'amélioration dans l'espace des objectifs pour un cas biobjectif.	265

(D.4)	Mesure de l'hypervolume ajouté par l'intervalle inférieur de la prédiction par moyenne de krigeage \mathcal{S} et illustration de l' ϵ -dominance.	266
-------	---	-----

Liste des tableaux

(2.1)	Exemples de relations ε -NUT.	26
(2.2)	Tableau de synthèse des méthodes d'optimisation utilisées à l'échelle globale.	39
(2.3)	Tableau de synthèse des méthodes d'optimisation utilisées à l'échelle locale ou du canal.	40
(4.1)	Propriétés physiques pour la configuration ONESIDE.	89
(4.2)	Dimensions normalisées des cinq cas utilisés dans l'étude de sensibilité au maillage et nombre de cellules du maillage de la stratégie 9.	92
(4.3)	Propriétés de l'écoulement pour la configuration TWOSIDE.	102
(4.4)	Propriétés des écoulements dans l'échangeur ECH-0D.	111
(4.5)	Propriétés physiques pour la configuration ECH-3D.	119
(5.1)	Valeurs prises par chaque paramètre pour la construction du plan d'expériences.	125
(5.2)	Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage. . .	127
(5.3)	Paramètres, performances issues de la simulation et écarts relatifs en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les six centres de groupe.	128
(5.4)	Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD pour le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$	134
(6.1)	Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage. . .	163
(6.2)	Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les sept centres de groupes.	168
(6.3)	Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les sept centres de groupes.	172
(6.4)	Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage. . .	177
(6.5)	Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les cinq centres de groupes.	180
(6.6)	Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage. . .	185

(7.1)	Récapitulatifs des configurations, de leurs modélisations et des différentes études réalisées.	198
(B.1)	Exemples de fonctions à base radiale.	225
(D.1)	Récapitulatif des méthodes d'optimisation classiques.	242
(D.2)	Fonctions mono-dimensionnelles stationnaires et isotropes les plus couramment utilisées pour construire les fonctions de corrélations.	252
(D.3)	Expression de la moyenne et de la variance de krigeage dans le cas du krigeage simple et ordinaire	252
(D.4)	Expression des estimateurs dans le cas du krigeage simple et ordinaire.	252

Liste des symboles

Acronymes

CFD	Computational Fluid Dynamics
EEV	Expected Excursion Volume
EGO	Efficient Global Optimization
EHI	Expected Hypervolume Improvement
EI	Expected Improvement
EMI	Expected Maximin Improvement
IMSE	Integrated Mean Square Error
LCB	Lower Confidence Bound
LHS	Latin Hypercube Sampling
MAE	Mean Absolute Error
MMSE	Maximum Mean Square Error
MSE	Mean Square Error
NSGA	Non-dominated Sorted Genetic Algorithm
PI	Probability of Improvement
q-EI	Multi-points Expected Improvement
RMA	Relative Maximum Error
RMSE	Root Mean Squared Error
SMS	\mathcal{S} -Metric Selection
SOM	Self-Organizing Maps
SUR	Stepwise Uncertainty Reduction
V.a.r.	vecteur aléatoire réel
v.a.r.	variable aléatoire réelle

Lettres grecques

$\hat{\beta}$	vecteur des estimations des coefficients de la tendance	$\in \mathbb{R}^{N_o \times N_b}$
---------------	---	-----------------------------------

β		vecteur des coefficients de la tendance	$\in \mathbb{R}^{N_o \times N_b}$
β_i^*		coefficient de croisement du <i>Simulated Binary Crossover</i>	$\in \mathbb{R}$
Δe_f	[m]	accroissement de l'épaisseur du dépôt au bout d'un temps Δt	$\in \mathbb{R}$
δ_{EI}		tolérance pour l'arrêt de l'enrichissement basé sur l'EI	$\in \mathbb{R}$
δ_i^*		coefficient de mutation polynomiale	$\in \mathbb{R}$
ΔP_{ech}	[Pa]	perte de charge de l'échangeur utilisée comme objectif	$\in \mathbb{R}$
δ_{q-EI}		tolérance pour l'arrêt de l'enrichissement basé sur la q-EI	$\in \mathbb{R}$
δ_{MMSE}		tolérance pour l'arrêt de l'enrichissement basé sur la MMSE	$\in \mathbb{R}$
ϵ		bruit modélisé par le krigeage	$\mathcal{N}(0, \tau_i^2)$
ϵ	[-]	efficacité de l'échangeur	$\in \mathbb{R}$
ϵ	[m ² .s ⁻³]	taux de dissipation turbulente (CFD)	$\in \mathbb{R}$
λ	[W.m ⁻¹ .K]	conductivité thermique	$\in \mathbb{R}$
μ	[kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]	viscosité dynamique	$\in \mathbb{R}$
ω	[s ⁻¹]	fréquence caractéristiques des tourbillons (CFD)	$\in \mathbb{R}$
Φ	[W]	puissance thermique	$\in \mathbb{R}$
φ	[W.m ⁻²]	densité de flux	$\in \mathbb{R}$
ϕ		fonction à base radiale	$\in \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$
ψ	[deg]	angle du <i>rib</i>	$\in \mathbb{R}$
ρ	[kg.m ⁻³]	masse volumique	$\in \mathbb{R}$
σ		variance du processus gaussien	$\in \mathbb{R}$
σ_τ		variance totale avec effet de pépite	$\in \mathbb{R}$
$\hat{\sigma}$		estimateur de la variance du processus gaussien	$\in \mathbb{R}$
τ		variance du bruit modélisé par le krigeage	$\in \mathbb{R}$
θ		paramètres de portées de la fonction de corrélation	$\in \mathbb{R}^{N_d}$
τ_w	[Pa]	cisaillement à la paroi (CFD)	$\in \mathbb{R}$
Υ	[-]	Écart-type de la distribution des débits	$\in \mathbb{R}$

Lettres romaines

A_{Ham}	[J]	constante de Hamaker (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
B	[m]	longueur du connecteur diffuseur/partie active	$\in \mathbb{R}$
C_f	[-]	coefficient de perte de charge	$\in \mathbb{R}$
C_b	[kg.m ⁻³]	concentration de particule dans le fluide (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
C	[W.K ⁻¹]	débit de capacité thermique	$\in \mathbb{R}$
C_{arr}	[-]	coefficient pour le débit surfacique d'arrachement (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
C_C	[-]	facteur de correction de Stokes-Cunningham (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
$C_{drag, }$	[-]	coefficient de traînée tangentiel (encrassement)	$\in \mathbb{R}$

$C_{drag,\perp}$	$[-]$	coefficient de traînée normal (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
C^*	$[-]$	ratio des débits de capacité thermique	$\in \mathbb{R}$
C_m	$[-]$	constante de la corrélation de Talbot (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
c_p	$[\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}]$	capacité thermique massique	$\in \mathbb{R}$
C_S	$[-]$	constante de la corrélation de Talbot (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
C_t	$[-]$	constante de la corrélation de Talbot (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
d		fonction de mesure de la distance	$\in \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^+$
\mathcal{D}		espace des paramètres	$\subset \mathbb{R}^{N_d}$
d_{crow}		mesure de la <i>crowding distance</i>	$\in \mathbb{R}$
D_H	$[\text{m}]$	diamètre hydraulique	$\in \mathbb{R}$
d_p	$[\text{m}]$	diamètre de la particule (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
d_{pp}	$[\text{m}]$	distance de séparation entre la particule et la paroi (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
E	$[\text{m}]$	largeur en pied du <i>rib</i>	$\in \mathbb{R}$
e	$[\text{m}]$	largeur en tête du <i>rib</i>	$\in \mathbb{R}$
\vec{e}_i		i -ème vecteur du référentiel	$\in \mathbb{R}^3$
e_f	$[\text{m}]$	épaisseur du dépôt (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
e_p	$[\text{m}]$	épaisseur de la plaque	$\in \mathbb{R}$
\tilde{E}	$[-]$	changement de variable de la largeur en pied du <i>rib</i>	$\in \mathbb{R}$
$ev(\cdot)$		volume d'excursion	$\mathbb{R}^{N_d} \rightarrow \mathbb{R}$
$f_Y(\cdot)$		densité de probabilité de la v.a.r. Y	$\in \mathbb{R}$
$F_Y(\cdot)$		fonction de répartition de la v.a.r. Y	$\in \mathbb{R}$
\mathcal{F}		espace des objectifs	$\subset \mathbb{R}^{N_{obj}}$
F_{drag}	$[\text{N}]$	Forces de traînée (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
F_{VDW}	$[\text{N}]$	Forces de Van der Walls (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
$\mathbf{g}(\mathbf{p})$		vecteur des contraintes d'inégalités	$\in \mathbb{R}^{N_g}$
G_D		<i>generational distance</i>	$\in \mathbb{R}$
h	$[\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}]$	coefficient d'échange convectif	$\in \mathbb{R}$
H	$[\text{m}]$	hauteur du canal	$\in \mathbb{R}$
H_E	$[\text{m}]$	hauteur de l'échangeur	$\in \mathbb{R}$
H_{in}	$[\text{m}]$	hauteur de l'orifice d'entrée du diffuseur	$\in \mathbb{R}$
h_{rib}	$[\text{m}]$	hauteur du <i>rib</i>	$\in \mathbb{R}$
$\mathcal{H}(\cdot)$		fonction calculant l'hypervolume	$\mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$
\mathcal{I}		fonction d'amélioration	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
J	$[\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}]$	débit surfacique de quantité de matière (encrassement)	$\in \mathbb{R}$

$K(\cdot, \cdot)$	noyau de covariance du processus gaussien	$\mathcal{D}^2 \rightarrow \mathbb{R}$
k [m ² .s ⁻²]	énergie cinétique turbulente (CFD)	$\in \mathbb{R}$
\mathbf{K}	matrice de covariance du processus gaussien	$\mathcal{D}^2 \rightarrow \mathbb{R}^{N_o \times N_o}$
Kn [-]	nombre de Knudsen	$\in \mathbb{R}$
$\mathbf{k}(\cdot)$	vecteur de covariance du processus gaussien	$\mathcal{D}^2 \rightarrow \mathbb{R}^{N_o}$
$L(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})$	fonction de vraisemblance	
l [m]	libre parcours moyen des molécules (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
L [m]	pas entre ailettes (<i>pitch</i>)	$\in \mathbb{R}$
L_D [m]	longueur du diffuseur	$\in \mathbb{R}$
L_E [m]	longueur de l'échangeur	$\in \mathbb{R}$
L_{in} [m]	longueur de l'orifice d'entrée du diffuseur	$\in \mathbb{R}$
\dot{m} [kg.s ⁻¹]	débit masse	$\in \mathbb{R}$
$m(\cdot)$	moyenne du processus gaussien	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
M [kg.mol ⁻¹]	masse molaire (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
$m_K(\cdot)$	moyenne de krigeage	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
$\mathbf{m}_K(\cdot)$	vecteur des moyennes de krigeage	$\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{F}$
$\mathbf{n}(\mathbf{p})$	vecteur des contraintes d'égalités	$\in \mathbb{R}^{N_n}$
\mathbf{N}	matrice des terme de variance du bruit	$\in \mathbb{R}^{N_o \times N_o}$
\vec{n}	vecteur normal unitaire	$\in \mathbb{R}^3$
NUT [-]	nombre d'unité de transfert	$\in \mathbb{R}$
N_b	nombre de fonctions de base dans la tendance de krigeage	$\in \mathbb{N}$
N_{ch}	nombre de canaux	$\in \mathbb{N}$
N_d	nombre de paramètres	$\in \mathbb{N}$
N_g	nombre de contraintes d'inégalités	$\in \mathbb{N}$
N_n	nombre de contraintes d'égalités	$\in \mathbb{N}$
N_o	nombre d'observations dans le plan d'expériences	$\in \mathbb{N}$
N_{obj}	nombre d'objectifs	$\in \mathbb{N}$
N_{gen}	nombre de générations	$\in \mathbb{N}$
N_{pop}	nombre d'individus dans la population	$\in \mathbb{N}$
Nu [-]	nombre de Nusselt	$\in \mathbb{R}$
N_v	nombre d'observations dans un jeu de validation	$\in \mathbb{N}$
\mathbf{P}	matrice des paramètres du plan d'expériences	$\in \mathcal{D}^{N_o}$
\mathbf{p}	vecteur des paramètres	$\in \mathcal{D}$
\mathcal{P}_Y	images de \mathcal{P}_P	$\subset \mathcal{F}$
\mathcal{P}_P	ensemble des observations non-dominées du plan d'expériences	$\subset \mathcal{D}$

P	[Pa]	pression statique	$\in \mathbb{R}$
p_{c1}		probabilité de croisement du NSGA-II	$\in \mathbb{R}$
$\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$		ensemble de Pareto	$\in \mathcal{D}$
$\mathcal{P}_{\mathcal{F}}$		front de Pareto	$\in \mathcal{F}$
p_{mut}		probabilité de mutation du NSGA-II	$\in \mathbb{R}$
\mathbf{P}'_q		Matrice des paramètres ajoutés par l'enrichissement	$\in \mathcal{D}^q$
\mathbf{P}_q		ensemble de q vecteurs de paramètres	$\in \mathcal{D}^q$
Pr	[-]	nombre de Prandtl	$\in \mathbb{R}$
\mathbf{p}'		vecteur de paramètres ajouté par l'enrichissement	$\in \mathcal{D}$
Q^2		coefficient de corrélation quadratique de prédiction	$\in \mathbb{R}$
R		fonction de corrélation du noyau de covariance	$\mathcal{D} \times \mathcal{D} \times \mathbb{R}^{N_d} \rightarrow \mathbb{R}$
\mathcal{R}	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]	constante universelle des gaz parfaits (8.314)	$\in \mathbb{R}$
R^2		coefficient de détermination	$\in \mathbb{R}$
Re	[-]	nombre de Reynolds	$\in \mathbb{R}$
\mathbf{R}		matrice des corrélations	$\in \mathbb{R}^{N_o \times N_o}$
r_0	[m]	rayon d'action	$\in \mathbb{R}$
\tilde{R}		fonction de corrélation mono-dimensionnelle	$\mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$
R_{th}	[W.m ⁻² .K ⁻¹]	résistance thermique par unité de surface (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
$\mathbf{r}(\cdot)$		vecteur des corrélations	$\in \mathbb{R}^{N_o}$
S_d	[-]	probabilité d'adhésion de la particule à la paroi (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
\mathcal{S}		métrique intervenant dans le critère SMS	$\in \mathbb{R}$
S	[m ²]	surface d'échange totale de l'échangeur	$\in \mathbb{R}$
$s_K(\cdot)$		écart-type de la prédiction de krigeage	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
$s_K^2(\cdot)$		erreur quadratique moyenne de krigeage (variance)	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
S_{tot}	[m ²]	surface totale d'échange	$\in \mathbb{R}$
T	[K]	température statique	$\in \mathbb{R}$
U	[W.m ⁻² .K ⁻¹]	coefficient d'échange global	$\in \mathbb{R}$
U_{ref}	[m.s ⁻¹]	vitesse de référence	$\in \mathbb{R}$
\vec{u}	[m.s ⁻¹]	vecteur vitesse	$\in \mathbb{R}^3$
u_{th}	[m.s ⁻¹]	vitesse de dépôt par thermophorèse (encrassement)	$\in \mathbb{R}$
u_e	[m.s ⁻¹]	vitesse d'encrassement (objectif)	$\in \mathbb{R}$
u_{τ}	[m.s ⁻¹]	vitesse de frottement à la paroi	$\in \mathbb{R}$
\mathbf{V}		matrice de régression	$\in \mathbb{R}^{N_o \times N_b}$
$\mathbf{v}(\mathbf{p})$		vecteur des fonctions de base de la tendance v	$\in \mathbb{R}^{N_b}$
v		tendance du métamodèle de krigeage	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$

$\overline{v^2}$	[m ² .s ⁻²]	échelle de vitesse scalaire pour le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ (CFD)	$\in \mathbb{R}$
v_i		fonction de base de la tendance v	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
W_E	[m]	largeur de l'échangeur	$\in \mathbb{R}$
\vec{x}		vecteur position	$\in \mathbb{R}^3$
$Y(\mathbf{p})$		processus aléatoire associé à la fonction déterministe $y(\mathbf{p})$	
$\mathbf{y}(\cdot)$		vecteur des fonctions objectifs	$\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{F}$
$\mathbb{Y}(\mathbf{p})$		vecteur des processus aléatoires associés à $\mathbf{y}(\mathbf{p})$	
\mathbf{y}		vecteur des réponses du plan d'expériences	$\in \mathbb{R}^{N_o}$
\mathbf{Y}		matrice des réponses du plan d'expériences	$\in \mathbb{R}^{N_{obj} \times N_o}$
y^+	[-]	distance à la paroi adimensionnée $y^+ = \rho y u_\tau / \mu$	$\in \mathbb{R}$
\mathbf{y}^{ref}		point de référence pour le calcul d'hypervolume	$\in \mathcal{F}$
$y(\cdot)$		fonction modélisant la réponse du simulateur	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
Z		processus gaussien stationnaire centré	$\sim \mathcal{PG}(0, K(\cdot, \cdot))$

Autres symboles

$\mathbb{P}(\square)$		probabilité	
(E, \mathcal{E})		espace mesurable	
$(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$		espace probabilisé	
$ \square $		valeur absolue	$\in \mathbb{R} \rightarrow \in \mathbb{R}^+$
$Cov[Y_1, Y_2]$		covariance entre deux v.a.r. Y_1 et Y_2	$\mathcal{D} \times \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
$card(\square)$		cardinal de l'ensemble	$\in \mathbb{N}$
$\not\prec$		relation de non-dominance	
\preceq		relation de dominance	
$\mathbb{E}[\cdot]$		espérance d'une v.a.r.	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$
\mathbb{I}		matrice identité	$\in \mathbb{R}^{N \times N}$
\square^{-1}		opérateur d'inversion	$\in \mathbb{R}^{N \times N} \rightarrow \in \mathbb{R}^{N \times N}$
$\max(\square)$		opérateur maximum	$\in \mathbb{R} \rightarrow \in \mathbb{R}$
$\bar{\square}$		opérateur moyenne	$\in \mathbb{R} \rightarrow \in \mathbb{R}$
$\min(\square)$		opérateur minimum	$\in \mathbb{R} \rightarrow \in \mathbb{R}$
$\ \square\ $		norme euclidienne	$\in \mathbb{R}^3 \rightarrow \in \mathbb{R}$
\square^T		transposée	$\in \mathbb{R}^{N \times N} \rightarrow \in \mathbb{R}^{N \times N}$
$Var[\cdot]$		variance d'une v.a.r.	$\mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$

Indices

0	de référence
<i>arr</i>	arrachement
<i>c</i>	froid (<i>cold</i>)

<i>dep</i>	dépôt
<i>h</i>	chaud (<i>hot</i>)
<i>i</i>	entrée (<i>inlet</i>)
<i>o</i>	sortie (<i>outlet</i>)
<i>max</i>	maximum
<i>min</i>	minimum
<i>p</i>	particule (encrassement)
<i>int</i>	interface fluide/solide
<i>s</i>	solide
<i>tot</i>	totale
<i>w</i>	paroi (<i>wall</i>)

1.1 Contexte

Les problématiques relatives à la gestion des ressources énergétiques (production, transport, stockage, pollution) sont au centre de préoccupations sociétales, environnementales et climatiques majeures (GIEC, 2013). La nécessité d'une utilisation rationnelle de ces ressources conduit à concevoir des systèmes de transformation, d'échange et de gestion de plus en plus performants.

Dans ce cadre, les **échangeurs de chaleur**, permettant de transférer de l'énergie thermique entre deux ou plusieurs fluides, sont très présents. Il s'agit en effet de dispositifs incontournables dans de nombreux secteurs industriels. On les retrouve, entre autres, dans la production d'électricité (d'origine nucléaire, fossile ou renouvelable), dans l'industrie des procédés, les transports (automobile, naval, aviation militaire ou civile), la cryogénie ou même le conditionnement d'air. Parmi les applications de la vie courante, on peut citer comme exemples les radiateurs automobiles ou les échangeurs à plaques des chaudières domestiques. Enfin les échangeurs de chaleur sont des composants clés de l'efficacité énergétique (récupération de chaleur fatale, amélioration du rendement des systèmes, ...). L'**optimisation des performances des échangeurs** est donc un sujet transversal pour assurer une transition énergétique efficace.

Ces performances sont directement liées à la **forme** de l'échangeur et/ou de ses éléments constitutifs. Elle se définit à l'échelle globale, par le nombre de plaques ou de tubes et par la forme de l'organe de distribution. A l'échelle locale, elle est caractérisée par le type et la géométrie des structurations des canaux. Les performances sont également liées aux phénomènes physiques mis en jeu au sein d'un échangeur. Aux aspects thermohydrauliques peuvent s'ajouter des considérations chimiques et réactionnelles (échangeur/réacteur), des changements de phase (évaporateur/condensateur) ou des problématiques d'encrassement. Le comportement d'un échangeur est donc fortement **multi-échelle** et **multiphysique**.

Dans le langage courant, "l'optimisation" est assimilée à la démarche visant à rendre le fonctionnement ou les performances d'un objet ou d'un système les meilleures possibles, à les amener à leur plus haut niveau d'efficacité. Dans le cas des échangeurs de chaleur, l'optimisation va, par exemple, conduire à déterminer la géométrie ayant le

meilleur transfert thermique possible entre les fluides tout en limitant les différents coûts : de matière, de fabrication et de fonctionnement. Du point de vue mathématique, optimiser revient à rechercher le minimum ou le maximum d'une fonction mesurant les performances du système. Une première étape essentielle à la résolution d'un problème d'optimisation est celle de sa modélisation mathématique. Pour cela, il faut :

1. identifier les paramètres sur lesquels il est possible d'agir afin de faire évoluer les performances du système. Ce sont les **paramètres** ou variables de dessin, de décision ou de conception.
2. définir la (ou les) fonction(s) permettant d'évaluer les performances du système. On les appelle des **fonctions objectif**, fonctions de coût ou simplement objectifs.
3. décrire les **contraintes** imposées aux paramètres et aux objectifs.

Lorsqu'une seule fonction objectif est considérée, on parle d'optimisation **mono-objectif** (*single objective optimization*). Lorsqu'elles sont *a minima* au nombre de deux, l'optimisation devient **multiobjectif** (*multi-objective optimization*¹ - MOO).

Les présents travaux traitent de l'**optimisation de forme**. Cela veut dire que les paramètres sur lesquels on va agir pour modifier les performances du système vont définir la forme des éléments de l'échangeur. Contrairement à d'autres types d'étude, les conditions de fonctionnement (*i.e.*, débit et température des fluides) ne sont pas considérées ici comme des paramètres. Le domaine de l'optimisation de forme peut se scinder en trois axes (Allaire, 2007, Chap. 1) :

- l'optimisation de forme **paramétrique**, pour laquelle la forme est définie par des paramètres dimensionnels et mesurables sur l'objet réel (épaisseur, longueur, ...), ce qui limite le nombre de formes possibles,
- l'optimisation de forme **géométrique**, pour laquelle la forme est définie initialement et évoluera par le déplacement de ses frontières sans changement de topologie²,
- l'optimisation de forme **topologique**, pour laquelle la forme optimale peut être obtenue suite à des changements de topologie.

On se limite ici à l'optimisation de forme paramétrique. En effet, les échangeurs sont classiquement considérés comme un assemblage de plaques ou de tubes caractérisés par des dimensions mesurables. L'axe récent de la fabrication additive³ des échangeurs, étendant la conception à des considérations topologiques, est hors du cadre de cette thèse.

1.2 Objectifs

Les présents travaux visent à répondre à la problématique d'optimisation multiéchelle et multiphysique des échangeurs de chaleur. Dans un premier temps, il est nécessaire de se doter d'outils de dimensionnement et de modélisation adaptés. Le plus souvent ceux-ci sont numériques ou théoriques. Ensuite, l'optimisation requiert l'utilisation de méthodes mathématiques pertinentes. Enfin, il est nécessaire d'identifier, de mettre en œuvre et

1. Dans la littérature, l'optimisation multiobjectif est souvent associée à deux ou trois fonctions. De ce fait, une distinction est faite lorsque le nombre de fonctions est supérieur à trois. On parle alors d'optimisation *many-objective*.

2. On dit de deux formes qu'elles ont la même topologie si le passage de l'une à l'autre se fait par une déformation continue. Un critère important (en 2D) est le nombre de trous. Par exemple, un tore et une tasse ont la même topologie, de même qu'une boule et un cube.

3. dans certains cas appelée "impression 3D"

d'évaluer des méthodes et outils permettant de visualiser et d'analyser les résultats de l'optimisation.

L'objectif est ici de concevoir une chaîne d'optimisation robuste et polyvalente permettant de traiter les nombreuses configurations rencontrées dans le domaine des échangeurs de chaleur et applicable dans un contexte industriel. Cela sous-entend que la méthode d'optimisation et les résultats qu'elle génère doivent être indépendants des paramètres de modélisation. De plus, elle doit être suffisamment polyvalente pour que la prise en compte de nouveaux phénomènes physiques ou de différentes échelles ne nécessite que très peu de changement.

1.3 Organisation du manuscrit

Le manuscrit s'organise en deux parties, la première présentant l'état de l'art et la seconde les contributions des présents travaux visant à atteindre les objectifs exposés.

Le Chapitre 2 rappelle le fonctionnement des échangeurs de chaleur et présente les différents outils permettant de les dimensionner. Une attention particulière est portée aux méthodes globales et à la mécanique des fluides numérique. Enfin, diverses études d'optimisation antérieures sont recensées.

Le Chapitre 3 introduit le contexte, la formulation et les méthodes de résolution d'un problème d'optimisation. Après une brève description de plusieurs méthodes, l'accent est mis sur la description des algorithmes génétiques et des métamodèles de krigeage avec une stratégie d'enrichissement. La méthode d'optimisation retenue est détaillée.

Le Chapitre 4 regroupe et présente les quatre configurations étudiées durant ces travaux. Toutes reposent sur un échangeur à plaques air/eau à courants croisés dont les plaques sont équipées de perturbateurs. Ces configurations se veulent représentatives des problématiques multiéchelle et multiphysique rencontrées, simulées par les outils de modélisation introduits dans le Chapitre 2.

Le Chapitre 5 analyse la robustesse de la méthode d'optimisation retenue à différents paramètres de modélisation. Trois axes sont investigués : le changement du modèle de turbulence, le changement de la méthode de propagation des variations de la forme et le changement de solveur CFD.

Le Chapitre 6 étudie la robustesse de la méthode lorsque la physique considérée est plus complexe, que ce soit par la prise en compte de plusieurs échelles au niveau de l'échangeur ou par l'ajout du nouveau phénomène qu'est l'encrassement.

Enfin, le Chapitre 7 synthétise les conclusions de ces différentes études et aborde les perspectives qu'ouvrent les présents travaux.

Première partie

État de l'art

CHAPITRE 2

Les échangeurs, présentation et modélisation

Ce chapitre rappelle le fonctionnement des échangeurs et donne un aperçu des différentes technologies d'échangeur et des méthodes d'intensifications des transferts thermiques. Les outils de dimensionnement OD et de simulation numérique des fluides sont introduits. Un état de l'art de l'optimisation des échangeurs est présenté.

Sommaire

2.1	Les échangeurs de chaleur : généralités	8
2.1.1	Différentes classifications	8
2.1.2	Une classification basée sur la technologie	9
2.1.3	Intensification des transferts thermiques	13
2.1.4	Quelles problématiques pour l'utilisation des échangeurs?	16
2.1.5	Vers l'optimisation des échangeurs	20
2.2	Dimensionnement et modélisation des échangeurs	21
2.2.1	Une question d'échelle	21
2.2.2	Méthodes de dimensionnement globales	23
2.2.3	Modélisation par la mécanique des fluides numérique	27
2.2.4	Synthèse des outils	34
2.3	Optimisation des échangeurs, revue de la littérature	35
2.3.1	Une question de performances	36
2.3.2	Optimisation thermique à l'échelle globale	37
2.3.3	Optimisation thermique à l'échelle locale ou canal	38
2.3.4	Optimisation de la distribution	38
2.3.5	Optimisation multiéchelle	41
2.4	Conclusions	41

2.1 Les échangeurs de chaleur : généralités

Un échangeur de chaleur, ou plus simplement échangeur, est un dispositif technologique permettant de transférer de l'énergie thermique entre deux ou plusieurs fluides qui sont à des températures différentes. Dans la majorité des cas, les fluides sont séparés par une surface solide et ne se mélangent donc pas.

Cette partie introduit des informations générales sur les échangeurs de chaleur et est largement inspirée des premiers chapitres des livres de Shah and Sekulic (2003) et Thulukkanam (2013).

2.1.1 Différentes classifications

Les échangeurs sont utilisés dans de nombreux secteurs industriels : l'énergie (de source nucléaire, renouvelable ou fossile), la pétrochimie, le transport (automobile, aérien), l'agro-alimentaire et bien d'autres encore. La diversité des applications fait qu'il existe de nombreux types d'échangeurs. En proposer une classification universelle et exhaustive n'est donc pas chose aisée. La littérature propose, entre autres, des classifications en fonction :

- du **régime de fonctionnement**, qui distingue les échangeurs sans stockage (direct), lorsque les fluides s'écoulent en continu, ou avec stockage (indirect) lorsque un seul fluide s'écoule de manière intermittente et échange avec une matrice¹.
- de la **compacité**, qui est définie par le rapport entre la surface d'échange effective et le volume de l'échangeur. Shah and Sekulic (2003) considèrent qu'un échangeur est compact si sa compacité est supérieure à $700 \text{ m}^2/\text{m}^3$.
- du **type de fluides**, qui différencie les échangeurs dont les deux fluides sont uniquement des gaz, uniquement des liquides ou les deux.
- de l'**état des fluides**, qui distingue les échangeurs dont les fluides restent monophasiques, dont un seul fluide change de phase (évaporateur ou condensateur) ou dont plusieurs fluides changent de phase (évapo-condensateur).
- de la **disposition des écoulements**, qui considère les écoulements à une seule passe (courants croisés, contre-courant ou co-courant) et à passes multiples.
- de la **technologie de construction**, qui différencie les échangeurs à plaques, lorsque les fluides sont séparés par des plaques, et les échangeurs tubulaires, lorsqu'au moins un fluide circule dans un tube.

Shah and Sekulic (2003) et Thulukkanam (2013) proposent des sous-classifications plus complètes pour chaque classe présentée ici. Ces groupes se recoupent, et un échangeur donné peut évidemment s'insérer dans plusieurs d'entre eux. Le choix de la classification à utiliser va donc dépendre du secteur industriel considéré et des applications visées pour l'échangeur.

Dans les présents travaux, la classification basée sur les technologies des échangeurs est préférée, pour plusieurs raisons :

1. le sujet porte sur l'optimisation de la forme des échangeurs qui est intrinsèquement liée à la technologie. Il semble donc adéquat de les classer ainsi.

1. Les stockages thermiques avec matériaux à changement de phase (MCP) font partie de cette catégorie.

2. les méthodes de dimensionnement 0D (NUT-efficacité par exemple) reposent sur des corrélations qui différencient généralement les échangeurs en fonction de leur technologie.
3. cela permet d'introduire une différenciation d'échelle géométrique qui va influencer la modélisation des échangeurs retenue dans les présents travaux.
4. ne seront considérés que des échangeurs travaillant avec **deux fluides sans changement de phase**.

La section suivante présente quelques différences structurelles parmi les deux types d'échangeurs de la classification retenue.

2.1.2 Une classification basée sur la technologie

Cette classification considère donc principalement les **échangeurs à plaques et tubulaires**. Certains ouvrages (Thulukkanam, 2013) différencient également les échangeurs à surface étendue. Dans les présents travaux, ils seront considérés comme des cas particuliers d'échangeurs à plaques ou à tubes.

2.1.2.1 Les échangeurs tubulaires

Dans ce type d'échangeurs, au moins un fluide circule dans un tube, dont la section peut être de forme diverse (circulaire, elliptique, carrée). Ce sont les échangeurs les plus répandus dans de nombreuses applications. En effet, ils permettent de travailler avec différents types de fluide (gaz ou liquides), dans des conditions de changement de phase et dans une large gamme de pression. Les nombreux paramètres de conception (diamètre et nombre de tubes, disposition) en font des échangeurs très polyvalents.

Tubes et calandre. Ces échangeurs (*shell and tubes*) sont constitués de quelques dizaines à plusieurs milliers de tubes, formant un faisceau et insérés dans une calandre. Typiquement, un fluide chaud circule dans les tubes, et un autre froid autour des tubes dans la calandre. La Figure 2.1 détaille les différents éléments constituant l'échangeur : les tubes, la calandre, les boîtes d'échangeur, qui distribuent le fluide dans les tubes et les chicanes. Ils seront détaillés par la suite.

Il existe une grande variété d'échangeurs à tubes et calandre, qui vont dépendre des applications. Dans l'industrie, les standards américains de la *Tubular Exchanger Manufacturers Association* (TEMA, 2007) sont utilisés pour leur dimensionnement.

Les tubes sont généralement normalisés (diamètre et longueur). Leur épaisseur varie en fonction de la pression de fonctionnement. Ils peuvent être droits ou en U. Il est courant de venir structurer les tubes à l'intérieur pour augmenter le transfert thermique. Des ailettes (*fins*) sont également utilisées pour cela.

La calandre (*shell*) est l'enveloppe métallique qui contient les tubes. La TEMA définit sept configurations de calandre, qui dépendent des entrées et sorties du fluide. Elles sont équipées de plaques tubulaires qui maintiennent les tubes.

Les chicanes (*baffles*) sont utilisées pour rigidifier le faisceau de tubes dans la calandre et pour modifier l'écoulement du fluide. Elles permettent ainsi d'augmenter le transfert thermique entre les tubes et le fluide côté calandre, en accélérant localement la vitesse du fluide et en orientant l'écoulement transversalement aux tubes. Il existe différentes formes de chicanes (en segment, en disque, en couronne, en hélice) qui sont choisies en fonction des perturbations qu'elles induisent sur l'écoulement du fluide.

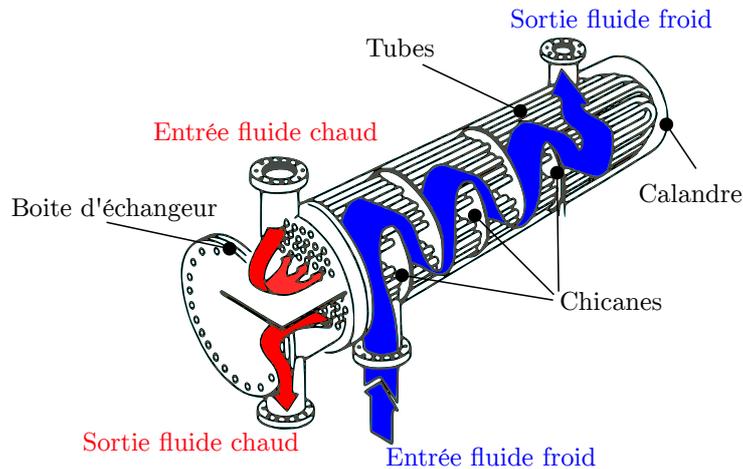


Figure 2.1 – Vue schématique d'un échangeur tubes et calandre et identification des ses composants. Cet échangeur n'a pas de boîte arrière et forme un U avec un cintrage des tubes (schéma adapté de Minvielle et al. (2014)).

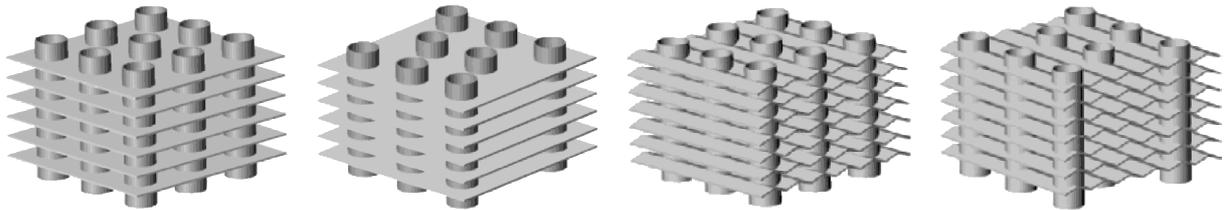


Figure 2.2 – Différentes configurations de tubes et ailettes transversales continues. De gauche à droite : tubes réguliers ailettes planes, tubes en quinconce ailettes planes, tubes réguliers ailettes ondulées, tubes en quinconce ailettes ondulées. (schéma issu de Bhuiyan and Islam (2016).)

Tubes ailetés. Ces échangeurs (*tube-fin*) prennent parfois le nom de batteries à ailettes. Ils sont constitués d'un faisceau de tubes entouré d'ailettes. Usuellement un liquide circule dans les tubes et un gaz (air) circule à l'extérieur. La présence d'ailettes permet d'augmenter la surface d'échange, et ainsi le transfert. Elles peuvent être transversales ou longitudinales (par rapport aux tubes).

Les tubes peuvent être de section circulaire, elliptique ou carrée. Leur arrangement peut être régulier ou en quinconce.

Ce sont les ailettes qui présentent le plus de variétés technologiques. Les ailettes transversales sont perpendiculaires aux tubes et peuvent être continues ou indépendantes. Les ailettes continues sont souvent planes ou ondulées (*wavy*), perforées ou non. La Figure 2.2 illustre plusieurs configurations de tubes et ailettes transversales continues.

Les ailettes longitudinales sont disposées dans l'axe du tube et sont quelquefois torsadées. Elles peuvent être positionnées à l'extérieur ou à l'intérieur des tubes.

2.1.2.2 Les échangeurs à plaques

Les échangeurs à plaques (*plate heat exchangers*) sont usuellement constitués d'un empilement de plaques métalliques. Elles peuvent être lisses mais présentent souvent des corrugations, nervures ou picots. On parle dans ce cas d'échangeurs à surface primaire. Dans certains cas, des obstacles à l'écoulement ou des tôles ondulées sont insérés

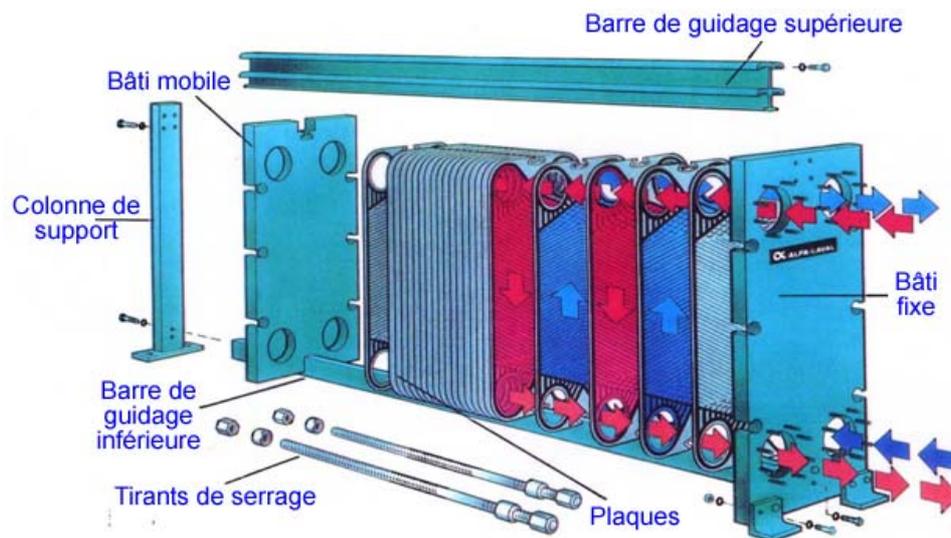


Figure 2.3 – Schématisation d'un échangeur à plaques à surface primaire. Il s'agit d'un échangeur à joint dont les plaques sont maintenues serrées par le tirant (schéma adapté de Minvielle et al. (2014)).

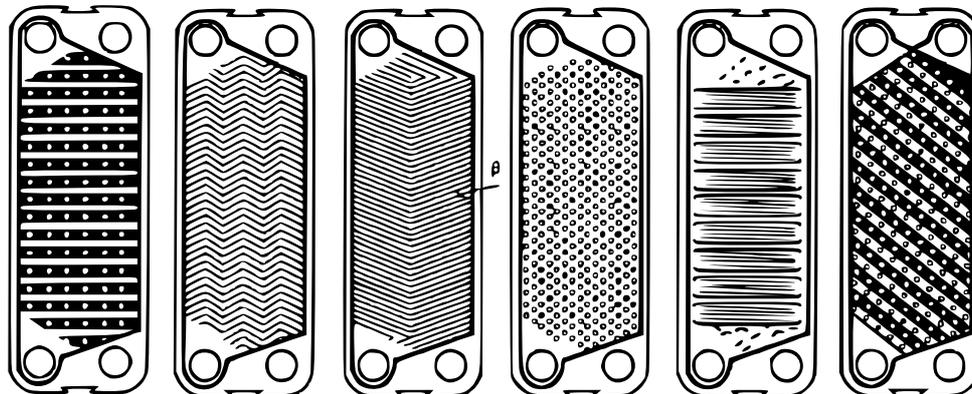


Figure 2.4 – Différents motifs de plaques. De gauche à droite : *washboard*, zigzag, chevrons, protubérances, corrugations secondaires et obliques (reproduit depuis Shah and Sekulic (2003))

entre les plaques. On parle alors d'échangeurs à surface secondaire. En règle générale, les échangeurs à plaques supportent des pressions maximales et différentielles plus faibles que les échangeurs à tubes et calandre, ce qui limite les fluides utilisables et les applications. Ils possèdent cependant une meilleure compacité que les échangeurs à tubes et calandre.

Échangeurs à surface primaire. Ces échangeurs sont constitués uniquement par un empilement de plaques, qui forment les canaux. Il existe différentes méthodes d'assemblage des plaques. La plus utilisée, visible sur la Figure 2.3, sépare les plaques par des joints pour assurer l'étanchéité. Des tirants maintiennent les plaques serrées entre deux bâtis. Les plaques peuvent être également brasées ou soudées.

Le motif des plaques peut être très varié, comme le montre la Figure 2.4, et il a pour objectif d'intensifier les transferts thermiques. Les plaques sont généralement obtenues par emboutissage.

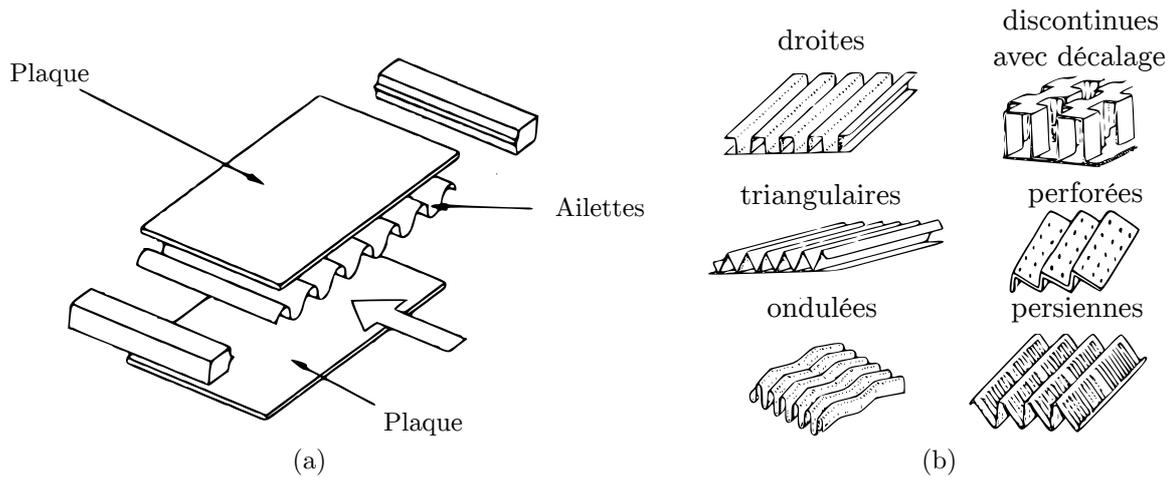


Figure 2.5 – Échangeur à plaque et ailettes : (a) principe de montage des ailettes entre les plaques (schéma adapté de Shah and Sekulic (2003)) et (b) différents types d'ailettes (schémas adaptés de Mikielewicz et al. (2018)).

Échangeurs à surface secondaire. Ces échangeurs sont souvent nommés échangeurs à plaques et ailettes (*plate-fin heat exchanger*). Ils sont usuellement utilisés pour des applications avec des gaz et qui nécessitent de grands coefficients d'échange de chaleur. On parle de surface secondaire car la surface d'échange est augmentée au moyen d'ailettes, insérées entre deux plaques, comme le montre la Figure 2.5(a). Les ailettes sont réalisées par pliage et emboutissage de tôles et peuvent avoir des hauteurs, des épaisseurs et des espacements différents. L'espacement entre deux plaques forment un canal dans lequel circulent les fluides. Usuellement, ces échangeurs fonctionnent à courants croisés ou contre-courant.

Les ailettes et les plaques sont assemblées par brasage, collage ou soudure. Il existe différents types d'ailettes, comme par exemple, les ailettes droites (*plains*), ondulées (*wavy*), discontinues avec un décalage (*offset strip fins - OSF*) ou à persiennes (*louvered*), qui sont visibles sur la Figure 2.5(b). La présence des ailettes, outre le fait d'étendre la surface d'échange entre le fluide et le solide, va également perturber l'écoulement et intensifier les transferts.

2.1.2.3 Quelques critères de choix

Cette section ne cherche pas à décrire de manière exhaustive la multitude d'échangeurs qui existent, mais seulement à apporter quelques notions sur la structure des échangeurs les plus courants.

Le choix et le dimensionnement de l'échangeur adapté se fera donc en fonction des **fluides en présence** et de la **quantité d'énergie** que l'on souhaite échanger.

En effet, les performances de l'échangeur vont dépendre de sa géométrie et de l'écart de température entre les fluides. Ces deux données vont impacter la surface d'échange nécessaire pour transférer l'énergie, et ainsi le coût de l'échangeur. L'intensification des transferts au sein de l'échangeur est donc un levier de première importance pour l'optimisation de ses performances et pour la réduction des différents coûts (matière, fabrication ou entretien).

Un autre facteur important à prendre en compte est la **puissance de pompage**

nécessaire à la circulation des fluides. Elle dépend des pertes de charge dans l'échangeur, influencées par le type d'échangeur, la géométrie et les fluides utilisés. Cette puissance est directement reliée au coût de fonctionnement de l'échangeur ; c'est pourquoi en pratique on cherche à la minimiser.

2.1.3 Intensification des transferts thermiques

Les transferts thermiques au sein d'un échangeur sont principalement dûs à la convection forcée entre le solide et les fluides et à la conduction dans le solide, le rayonnement étant négligé. Le coefficient d'échange global, qui détermine la puissance thermique échangée par l'échangeur, va donc dépendre de sa géométrie, des coefficients de transfert convectif entre les fluides et les parois du solide, et de la conductivité thermique du solide. Cette dernière va essentiellement dépendre du matériau utilisé.

Les fondamentaux théoriques du transfert thermique donnent l'expression de la puissance échangée Φ par convection entre un solide et fluide comme étant le produit d'un coefficient d'échange h , d'une surface d'échange S et d'une différence de température ΔT fluide/paroi :

$$\Phi = hS\Delta T \quad (2.1)$$

L'intensification du transfert thermique (*heat transfer enhancement*) va donc chercher à améliorer le coefficient d'échange, avec ou sans augmentation significative de la surface, pour :

- soit augmenter la puissance échangée en conservant le même écart de température,
- soit diminuer la différence de température nécessaire pour transférer la même puissance.

En écoulement monophasique turbulent, cette amélioration est la conséquence de trois mécanismes :

1. la réduction de l'épaisseur de la couche limite thermique (*thermal boundary layer*), en la perturbant localement par exemple,
2. l'augmentation du nombre de perturbations de l'écoulement, via, par exemple, la création de tourbillons,
3. l'augmentation de la vitesse à la paroi, en réduisant la section de passage localement.

2.1.3.1 Différentes technologies d'intensification

Dans les échangeurs, ces mécanismes interviennent à une échelle locale, de l'ordre du diamètre hydraulique des canaux ou des tubes. Technologiquement, plusieurs méthodes existent, et elles sont réparties en deux catégories, dites passives ou actives. Les méthodes passives ne nécessitent pas d'apport de puissance supplémentaire, et vont généralement se baser sur des modifications surfaciques ou géométriques. Les méthodes actives, via un apport de puissance supplémentaire, vont perturber l'écoulement afin d'augmenter le transfert.

Les techniques passives vont ainsi regrouper toutes les méthodes de traitement de surfaces², d'ajout d'obstacles à l'écoulement, d'extension des surfaces d'échange, de création

2. modification des propriétés de mouillage par exemple, intervenant essentiellement dans les échangeurs avec changement de phase

de tourbillons secondaires ou d'addition de particules dans les fluides³. Elles vont généralement augmenter le transfert, mais au prix de l'augmentation des frottements et des pertes de charge. Les méthodes actives reposent sur la vibration de la surface d'échange, l'utilisation de champs électrostatiques, d'ultrasons ou de jets pour améliorer les transferts. Dans les deux catégories, des méthodes existent également pour l'intensification des transferts en présence d'un changement de phase.

Les présents travaux ne considèrent que des **techniques passives** reposant sur la **perturbation de l'écoulement des fluides monophasiques**. Quelques méthodes sont présentées dans cette section. Pour une description plus exhaustive, on pourra se référer au chapitre 14 du *Heat Transfer Handbook* (Manglik, 2003).

2.1.3.2 Augmentation de la perturbation de la surface

Cette méthode va généralement être réalisée par l'ajout d'un obstacle perpendiculaire à l'écoulement. La présence de cet obstacle ne va pas augmenter significativement la surface d'échange. Néanmoins, il va perturber la sous-couche visqueuse en proche paroi et induire des zones de séparation et de ré-attachement des couches limites hydrodynamique et thermique. Ces phénomènes vont ainsi accroître le transfert thermique proche de la paroi. Lorsque l'obstacle est suffisamment grand par rapport au diamètre hydraulique, il va également induire une augmentation locale de la vitesse du fluide, suite à une réduction de la section de passage. On distingue en pratique les perturbateurs, qui sont obtenus par ajout de matière, des corrugations, qui sont obtenues par déformation. Cette méthode peut être appliquée à tous les types d'échangeurs vu précédemment. Technologiquement, certains ouvrages distinguent les rugosités à deux dimensions, qui consistent en une répétition d'un même motif dans le sens de l'écoulement, et les rugosités à trois dimensions, pour lesquelles les motifs sont répétés à la fois dans le sens de l'écoulement et transversalement à celui-ci.

Dans les échangeurs à tubes, il est possible d'intensifier le transfert à l'intérieur ou à l'extérieur des tubes. Pour cela, différentes technologies existent, comme le montre la Figure 2.6. Il est possible d'ajouter des perturbateurs, appelés *ribs* en anglais, transversaux ou hélicoïdaux ou de créer des corrugations. Il existe plusieurs profils de perturbateurs : circulaires, carrés ou triangulaires. La création de bosses (*dimples*) est également possible pour des rugosités à trois dimensions. Il est courant d'utiliser un perturbateur de forme circulaire par l'ajout d'un ressort à l'intérieur du tube. Les corrugations présentent l'avantage de structurer également l'extérieur du tube. Des rainurages (à l'intérieur et à l'extérieur) sont également possibles pour créer des perturbations.

A contrario, les échangeurs à plaques corruguées ont, par construction, une rugosité de paroi importante. Le motif de la corrugation (voir Figure 2.4) va ainsi influencer sur l'écoulement du fluide sur la plaque, perturbant de ce fait les couches limites et intensifiant le transfert. Il est également possible dans certains cas d'utiliser des perturbateurs (*ribs*) pour faire obstacle à l'écoulement et générer des recirculations. On retrouve ces *ribs* dans les circuits de refroidissement des aubes de turbine qui sont assimilés à des échangeurs à plaques monocanaux (Rau et al., 1998; Tanda, 2004).

3. comme le champ de recherche récent concernant les *nanofluides*

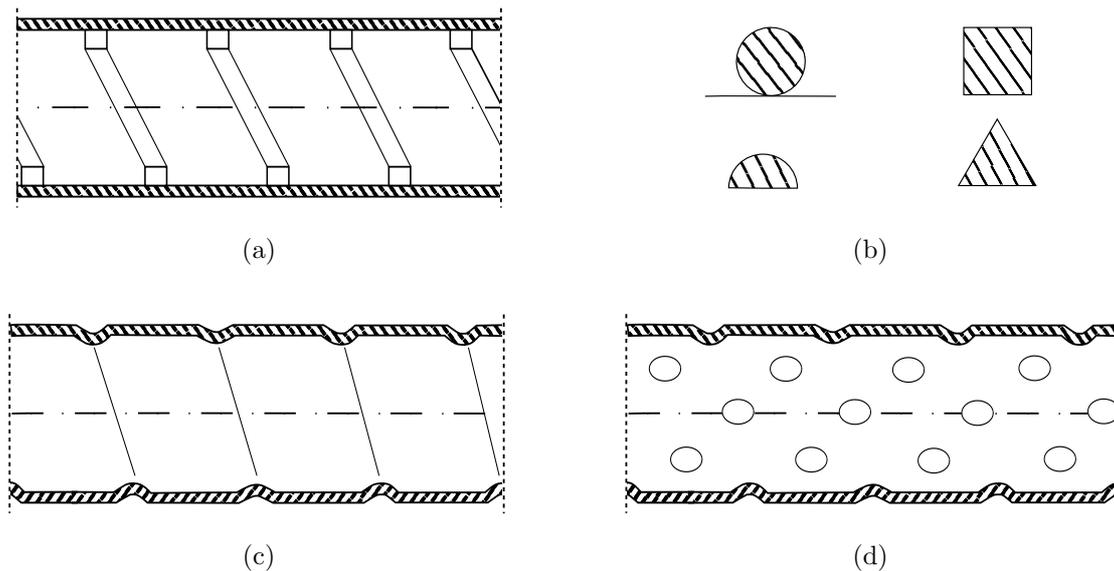


Figure 2.6 – Augmentation de la rugosité dans les tubes : (a) perturbateurs hélicoïdaux - (b) différents formes de perturbateurs - (c) corrugations hélicoïdales - (d) bossage en trois dimensions.

2.1.3.3 Extension de surface

Dans le cas des échangeurs gaz/liquide, le coefficient d'échange convectif du gaz est 50 à 100 fois plus faible que le coefficient d'échange du liquide. L'augmentation procurée par l'obstacle n'est alors pas suffisante. Les méthodes d'extension de surface cherchent ainsi à augmenter le produit hS en augmentant également la surface d'échange.

Ces méthodes sont parmi les plus utilisées actuellement, aussi bien dans les échangeurs à plaques que tubulaires, mais également pour le refroidissement de composants électroniques. Elles ont ainsi conduit à un nouveau type d'échangeur, référencé par certains ouvrages sous le nom d'échangeur à surface étendue (Thulukkanam, 2013). Dans les présents travaux, ils ont été présentés dans la Section 2.1.2.

Dans le cas des ailettes planes, seule la surface d'échange augmente. De nouvelles formes d'ailettes (ondulées, OSF, persiennes, discontinues) ont été développées afin d'introduire également des perturbations locales de l'écoulement du fluide. Cela permet de combiner avantageusement les mécanismes d'intensification à l'accroissement de la surface. La présence des ailettes va également augmenter la vitesse du fluide par une réduction de la section de passage.

Généralement, on trouve les ailettes à l'extérieur des tubes (continues ou discontinues) et sous forme de tôles pliées dans les échangeurs à plaques.

2.1.3.4 Création de tourbillons secondaires

La création de tourbillons secondaires dans l'écoulement va permettre de perturber les couches limites dynamique et thermique, de mélanger le fluide et de créer des gradients de vitesse. Cela rassemble donc tous les mécanismes propices à l'intensification du transfert thermique.

Dans les tubes lisses, il est courant d'utiliser des inserts, comme le montre la Figure 2.7(a). Ceux-ci jouent à la fois le rôle d'ailettes et de générateurs d'écoulements

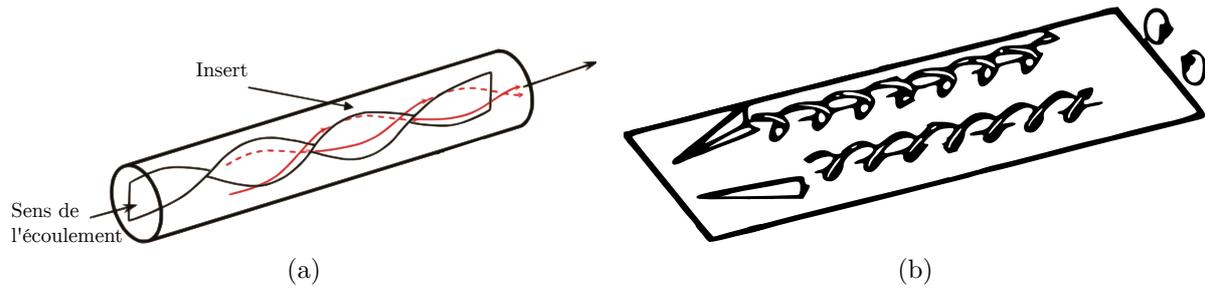


Figure 2.7 – Exemple de création de tourbillons secondaires : (a) ajout d'un insert dans un tube (reproduite depuis Kumar et al. (2018)) - (b) ajout d'une ailette delta (*delta wing*) sur une plaque (issu de Simo Tala (2012)).

secondaires en rotation (en rouge sur la figure), propices à l'augmentation du transfert. Certains inserts, présentant un grand encombrement dans le tube, vont réduire la section de passage et augmenter la vitesse du fluide. Par rapport aux techniques précédentes, les inserts présentent l'avantage d'être facilement mis en œuvre, et ce même une fois l'échangeur installé. Il existe de nombreuses formes d'inserts : simple, double, en étoile ou présentant des rugosités. A l'extérieur des tubes, les ailettes discontinues hélicoïdales peuvent également générer des tourbillons secondaires.

Au contraire dans les échangeurs à plaques et ailettes, la création de tourbillons secondaires est assurée par certaines formes d'ailettes (les *wavy* par exemple). Dans certains cas de plaques, des ailettes delta (*delta wings*) sont utilisées pour générer des recirculations secondaires, comme le montre la Figure 2.7(b).

2.1.3.5 Synthèse

L'intensification des transferts thermiques au sein d'un échangeur est un sujet qui a généré beaucoup de recherches sur les plans académique, technologique et industriel. Les présents travaux ne considèrent que les méthodes passives pour des écoulements qui restent monophasiques.

Comme présenté dans cette section, pour chaque type d'échangeur, des "intensificateurs" existent. Dans la majorité des cas, l'intensification se fait à une échelle très locale de l'échangeur, de l'ordre du diamètre hydraulique d'un tube ou du canal. Ces intensificateurs vont accroître le coefficient d'échange convectif en perturbant l'écoulement, en interrompant et en mélangeant la couche limite thermique et en augmentant localement la vitesse du fluide. Cependant, de tels phénomènes vont également conduire à une augmentation des pertes de charge, de la puissance de pompage nécessaire à l'écoulement des fluides et finalement du coût global d'opération de l'échangeur.

2.1.4 Quelles problématiques pour l'utilisation des échangeurs ?

Le fonctionnement des échangeurs n'est pas exempt de problématiques. En effet, leur conception et leur utilisation peuvent entraîner des problèmes de distribution des fluides dans les canaux, d'encrassement, de corrosion ou de vibration. Cette section présente deux problématiques, la mauvaise distribution et l'encrassement des échangeurs, qui sont étudiées dans les présents travaux.

2.1.4.1 Mauvaise distribution du fluide entre les canaux

La plupart des règles de dimensionnements utilisées par les ingénieurs supposent que l'écoulement des fluides dans l'échangeur est idéal⁴. Cependant, dans la pratique, des problèmes de mauvaise distribution (*flow maldistribution*) apparaissent : on remarque alors une non-uniformité des débits entre les différents canaux (Shah and Sekulic, 2003, Chap. 12). Deux causes sont généralement distinguées : d'une part, la géométrie des différents éléments de l'échangeur et d'autre part les conditions de fonctionnement (viscosité des fluides en fonction de la température par exemple). Une mauvaise distribution entre les canaux va fortement impacter les performances de l'échangeur.

Les présents travaux se concentrent sur les phénomènes induits par la géométrie, qui sont fortement dépendants de la conception et de la fabrication des échangeurs. Ils peuvent être classés en deux catégories, brièvement abordées dans cette section.

Mauvaise distribution à l'entrée des canaux. Cette mauvaise distribution est la conséquence de phénomènes macroscopiques comme une mauvaise conception des boîtes d'échangeur ou le blocage de certains canaux et passages pendant la fabrication. Certains canaux vont alors se retrouver sur-alimentés alors que d'autres ne verront passer qu'un faible débit. Dans le cas d'un divergent, un décollement suivi d'une recirculation vont obstruer certains canaux. Dans le cas des échangeurs à plaques, les canaux sont souvent alimentés transversalement pour des questions d'encombrement. Cela se traduit par une augmentation de la perte de charge globale de l'échangeur et une diminution de la puissance thermique échangée.

Différences géométriques entre les canaux. En théorie, les dimensions des canaux sont supposées identiques. Cependant, en pratique, les tolérances de fabrication induisent des différences géométriques entre deux canaux adjacents. Ainsi, la résistance à l'écoulement de chaque canal est différente. Étant donné que le fluide passe préférentiellement par le "chemin" le moins résistant, une mauvaise distribution apparaît. Dans ce cas, cela va se traduire par une légère diminution des pertes de charge et du transfert thermique, par rapport au cas idéal, pour lequel les géométries des passages sont identiques.

Lors de la conception des échangeurs, les mauvaises distributions sont souvent estimées grossièrement, voire ne sont pas considérées. Les échangeurs de chaleur sont usuellement sur-dimensionnés pour pallier cet effet.

2.1.4.2 Des généralités de l'encrassement ...

L'encrassement est un phénomène d'accumulation d'un matériau indésirable, appelé dépôt, sur les surfaces de l'échangeur. Ce phénomène réduit les sections de passage du fluide, entraîne donc une augmentation des pertes de charge, et peut aller jusqu'à l'obstruction totale des zones de passage du fluide. Le dépôt se comporte également comme une résistance thermique, pénalisant le transfert thermique (Shah and Sekulic, 2003, Chap. 13).

Lors de la conception des échangeurs, une résistance thermique et une perte de charge équivalentes sont estimées. Elles induisent ainsi un sur-dimensionnement de l'échangeur,

4. c'est-à-dire, avec un débit uniformément distribué dans les canaux.

de telle sorte qu'il puisse transférer la puissance voulue dans un état encrassé. D'un point de vue opérationnel, l'encrassement se traduit par une diminution de la rentabilité suite à des procédures d'arrêt, de nettoyage, ou à cause des surconsommations et des sur-dimensionnements que le phénomène induit.

Plusieurs types d'encrassement peuvent être considérés. Ils vont dépendre des applications, des fluides de travail et des matériaux de l'échangeur. Usuellement, ils sont classés selon les six mécanismes qui dominent le dépôt : encrassement particulaire (*particulate fouling*), encrassement par corrosion (*corrosion fouling*), encrassement par solidification (*freezing fouling*), entartrage (*precipitation fouling*), encrassement par réaction chimique (*chemical reaction fouling*), encrassement biologique (*biological fouling*). Dans la pratique, il est possible que plusieurs de ces phénomènes se combinent. Suite aux travaux de Epstein (1977), la littérature s'accorde sur la succession chronologique de cinq phases conduisant à l'encrassement :

1. l'**initiation** est caractérisée par le temps nécessaire à l'apparition d'un dépôt sur une surface propre.
2. le **transport** des composants jouant un rôle majeur dans l'encrassement (molécules d'oxygène pour la corrosion, particules), depuis le cœur de l'écoulement vers les parois. Ce transport peut être le résultat de plusieurs phénomènes pilotés par exemple par la température, l'inertie ou l'électromagnétisme.
3. l'**adhésion** à la paroi, qui dépend essentiellement de l'état de surface (mouillabilité par exemple) et des forces d'adhésion (Van der Waals par exemple).
4. l'**arrachement** ou réentraînement de certaines parties du dépôt, qui va dans certains cas compenser l'adhésion. Usuellement, on suppose que ce phénomène est lié aux forces de cisaillement.
5. le **vieillessement** du dépôt, qui peut être d'origine chimique ou cristalline et qui va altérer les propriétés (conductivité, épaisseur) de la couche encrassante.

En fonction des types d'encrassement et des applications, ces phases sont plus ou moins importantes dans la formation du dépôt.

2.1.4.3 ... à l'application aux échangeurs des circuits de recirculation des gaz d'échappement

Dans les présents travaux, le cas particulier des échangeurs des circuits de recirculation des gaz d'échappement (*Exhaust Gaz Recirculation - EGR*), ou plus simplement EGR coolers, est considéré. Ce circuit est utilisé dans les voitures afin de limiter l'émission des NO_x . L'échangeur refroidit une partie des gaz brûlés afin de pouvoir les ré-injecter dans le moteur. L'encrassement est causé par le dépôt des particules issues de la combustion du carburant dans le moteur. On estime que les particules ont un diamètre qui varie entre $10 \cdot 10^{-9}$ m et $300 \cdot 10^{-9}$ m (Abarham et al., 2010).

Dépôt. La formation de ce dépôt résulte de la combinaison d'un encrassement particulaire et chimique (Han et al., 2015). Les principaux mécanismes de transport mis en jeu sont :

- le **thermophorèse** (*thermophoresis*), qui est un phénomène engendré par la présence d'un gradient de température. Il en résulte une force qui tend à déplacer les particules vers les zones les plus froides de l'écoulement. Dans le cas des EGR

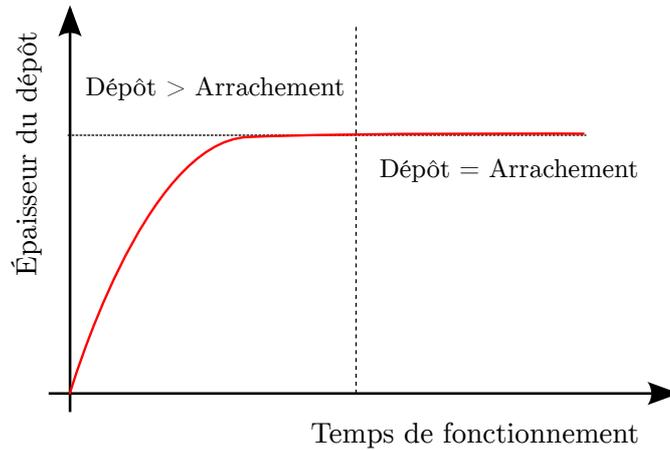


Figure 2.8 – Illustration du comportement asymptotique de l'encrassement.

coolers, les gaz sont usuellement à 600 K et la paroi à 350 K. C'est le phénomène majeur de transport des particules pour cette application (Abarham et al., 2010).

- la **diffusiophorèse** (*diffusiophoresis*), qui se produit à cause d'un gradient de concentration (Hornig et al., 2011). Sous l'influence de ce phénomène, les particules se déplacent en fonction de leur charge électrique et de celle de la solution vers les zones de haute ou de basse concentration (Guerra, 2017). Dans les EGR coolers, les espèces chimiques composant le dépôt (vapeur d'eau, hydrocarbures, acides) peuvent se condenser lorsque la température de la paroi est inférieure à la température de rosée de ces espèces. Cette condensation, qui dépend également de la composition des gaz et de la vitesse de l'écoulement, entraîne une différence de concentration avec le cœur de l'écoulement.
- la **diffusion** (*diffusion*), qui transporte les petites particules sous l'effet du mouvement Brownien, et l'**inertie** (*impaction*), qui dépose les grosses particules à la paroi sous l'influence de leur propre poids et du mouvement du fluide. L'importance de ce phénomène est quantifiée par le nombre de Stokes. Dans les EGR, il est très faible, car les particules sont petites.

Les phénomènes de diffusiophorèse et de condensation sont difficiles à prendre en compte car ils vont dépendre de la composition chimique des particules et des hydrocarbures, qui peut varier (Hornig et al., 2011).

Arrachement. La création d'une couche de dépôt diminue les performances thermiques de l'échangeur. Dans les EGR coolers, l'expérience montre une décroissance rapide qui tend ensuite vers un régime asymptotique, comme l'illustre la Figure 2.8. Deux hypothèses sont couramment avancées (Abarham et al., 2010; Han et al., 2015) :

- avec l'augmentation de la couche encrassante et de la résistance thermique, le gradient thermique entre le fluide et la paroi diminue. Ainsi l'effet de la thermophorèse se réduit jusqu'à devenir nul. Le dépôt ne croît plus.
- des phénomènes d'arrachement se produisent. Lorsque le régime asymptotique est atteint, le taux de dépôt de particules est égal au taux d'arrachement.

La littérature peine à donner une réponse claire sur les causes de cette stabilisation. La première hypothèse seule ne suffit pas, car une différence de température fluide/paroi nulle reviendrait à ne plus transférer de puissance par l'échangeur (Han et al., 2015). Plusieurs

études récentes se sont donc consacrées à l'identification des phénomènes d'arrachement. Le premier phénomène évoqué est le **cisaillement à la paroi** (*wall shear stress*) induit par l'écoulement (Abarham et al., 2010; Paz et al., 2013; Abd-Elhady et al., 2011; Abd-Elhady and Malayeri, 2013). Les résultats expérimentaux mettent en évidence un encrassement réduit dans les zones à fort taux de cisaillement. Ils sont également corroborés lorsque les performances globales de l'échangeur sont considérées. L'arrachement est justifié par un bilan des forces agissant sur une particule. Un cisaillement important va induire des forces aérodynamiques (portance et traînée) compensant les forces d'adhésion de Van der Waals, et permettant à la particule d'être réentraînée. L'air étant un fluide peu visqueux, les taux de cisaillement adéquats apparaissent pour des écoulements ayant une vitesse de l'ordre de 100 m/s (Abd-Elhady et al., 2011). Dans la pratique, de telles vitesses restent difficilement atteignables. D'autres auteurs ont étudié l'effet de la **condensation** de la vapeur d'eau (Warey et al., 2013; Abarham et al., 2013; Han et al., 2015). Lorsque le dépôt d'hydrocarbures est sec, la condensation conduit à un écaillage (*flaking*) de la couche qui va permettre l'arrachement. Cependant, ce phénomène est moins marqué lorsque le dépôt est humide, ce qui est généralement le cas en conditions réelles. Le **chargement thermique** cyclique et le **différentiel de dilatation** thermique entre le dépôt et la paroi ont également été avancés comme causes éventuelles de fracture de la couche encrassante (Abd-Elhady and Malayeri, 2013; Han et al., 2015). Le **vieillessement** du dépôt, soumis à des températures importantes (*bake out*) est également envisagé (Han et al., 2015). Enfin, certains auteurs (Abd-Elhady and Malayeri, 2013; Han et al., 2015) supposent également que le "**bombardement**" des grosses particules va induire un arrachement de certaines parties du dépôt.

Synthèse. L'encrassement est une problématique majeure dans les échangeurs, car elle induit des opérations de maintenance plus régulières et une diminution des performances. Dans le cadre des EGR coolers, les mécanismes de dépôt sont relativement bien connus de la littérature et des modèles existent (voir Section 2.2.3.4). Expérimentalement, une stabilisation dans le temps de la dégradation des performances est observée. Des phénomènes d'arrachement sont suspectés mais ne sont pas encore identifiés clairement.

2.1.5 Vers l'optimisation des échangeurs

Les échangeurs sont présents dans de nombreux secteurs industriels. Leur utilisation est incontournable actuellement dans les différents procédés faisant intervenir des fluides. Cette section a présenté brièvement les deux grands types d'échangeurs (à plaques et tubulaire) ainsi que les technologies permettant d'intensifier le transfert localement. Les problèmes couramment rencontrés dans l'utilisation de ces échangeurs ont également été évoqués.

Le dimensionnement d'un échangeur consiste usuellement à déterminer la géométrie et le type d'échangeur capable de transférer la puissance voulue avec un minimum de puissance de pompage tout en étant adapté aux contraintes de fonctionnement (encombrement, encrassement, corrosion). Dans certains cas, les demandes des industriels concernent l'amélioration d'un échangeur spécifique. L'optimisation vise généralement à (Manglik, 2003) :

- augmenter la puissance thermique échangée en conservant la même puissance de pompage ou le même débit ;

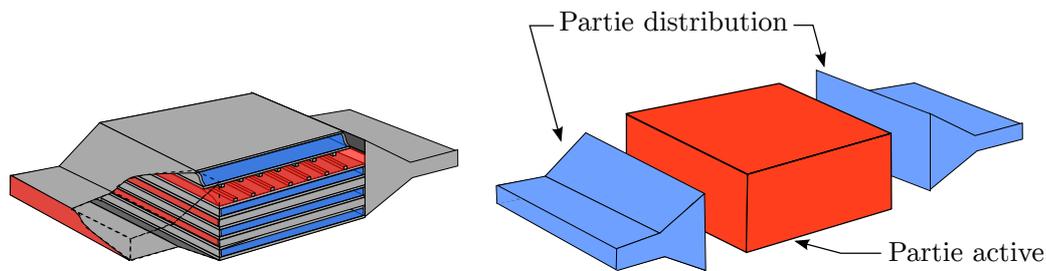


Figure 2.9 – Représentation schématique d'un échangeur de chaleur à plaques avec distributeur. Les parties active et distribution sont distinguées à droite.

- conserver la même puissance échangée en réduisant la différence de température entre les fluides et la surface d'échange ;
- réduire la taille de l'échangeur, en conservant la puissance thermique et la puissance de pompage ;
- réduire la puissance de pompage pour une puissance thermique échangée et une surface d'échange donnée.

Les objectifs affichés sont conflictuels. En effet, l'augmentation de la puissance échangée se fait au dépend de la puissance de pompage, et la mauvaise distribution ainsi que l'encrassement vont impacter négativement les performances thermohydrauliques.

Le besoin en terme d'outils de dimensionnement efficaces est évident, et une approche **multiobjectif** de la conception, et *a fortiori* de l'**optimisation** des échangeurs, semble donc toute indiquée.

2.2 Dimensionnement et modélisation des échangeurs

La conception et l'optimisation des échangeurs de chaleur nécessitent l'utilisation d'outils de dimensionnement et de modélisation adaptés. Usuellement, des méthodes de dimensionnement entrée/sortie, ou **méthodes globales**, sont utilisées pour déterminer les performances de l'échangeur. Avec l'évolution de la puissance des ordinateurs, la **mécanique des fluides numérique** (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) est également utilisée pour la simulation des écoulements et du transfert thermique. Cette section présente ces outils.

2.2.1 Une question d'échelle

La section précédente a permis d'introduire les différents éléments constituant un échangeur de chaleur. Typiquement, on considère des boîtes d'échangeur, des canaux et des éléments permettant d'intensifier le transfert thermique à l'intérieur des canaux. De manière générique, on appellera "canal", un tube ou l'espace entre deux plaques dans lequel le fluide circule.

2.2.1.1 Différentes échelles...

Comme l'illustre la Figure 2.9, l'échangeur de chaleur peut être scindé en deux parties, chacune assurant un rôle dans le fonctionnement de l'échangeur :

- la **partie distribution**, comprenant les boîtes d'échangeur, se charge de répartir le fluide entre les différents canaux de l'échangeur,
- la **partie active**, au sein de laquelle les transferts thermiques entre les différents fluides se déroulent.

On peut également considérer différentes échelles géométriques, qui dépendent d'une dimension caractéristique de l'échangeur. A chaque échelle vont correspondre des phénomènes physiques particuliers. Les présents travaux proposent de considérer :

- l'échelle **globale**, caractérisée par les dimensions de l'échangeur (hauteur, largeur, longueur). A cette échelle, il est possible d'analyser les performances globales de l'échangeur (puissance échangée et puissance de pompage) ainsi que la mauvaise répartition des débits induite par la partie distribution. Le transfert thermique est caractérisé par un coefficient d'échange global. C'est à cette échelle qu'interviennent les considérations autour du nombre de plaques/tubes et des débits de fluide.
- l'échelle du **canal**, définie par la longueur d'un canal. A cette échelle, le nombre d'éléments d'intensification est considéré. Les problématiques d'établissement de l'écoulement sont analysées, ainsi que l'évolution de la température le long du canal. L'interaction entre plusieurs éléments d'intensification est visible. L'impact des différences de géométrie et de la distribution des débits sur le transfert thermique et les pertes de charge peut être étudié à cette échelle.
- l'échelle **locale**, caractérisée par le diamètre hydraulique d'un canal. C'est à cette échelle que sont considérés les éléments d'intensification du transfert thermique. L'élément d'intensification est alors isolé, grâce à une périodicité géométrique. Les effets liés à la recirculation et au décollement des couches limites thermique et hydrodynamique apparaissent à cette échelle. Le transfert thermique est considéré à la paroi, et peut être défini par un profil ou par une valeur moyenne sur l'élément. Les changements de dimensions de l'élément induisent des changements dans l'écoulement, qu'il est alors possible d'analyser.

La partie distribution de l'échangeur a une dimension essentiellement globale. La partie active peut être analysée à chaque échelle.

La distinction des trois échelles s'applique à la majorité des types d'échangeurs présentés dans la Section 2.1, comme l'illustre la Figure 2.10. Elles permettent de réaliser une analyse des phénomènes physiques (couplés) qui interviennent dans le fonctionnement des échangeurs.

2.2.1.2 ... pour différentes modélisations

Ces échelles fournissent également un cadre pour la mise en place et l'utilisation des méthodes de modélisation.

En effet, les méthodes de dimensionnement dites "globales", appelées également méthodes 0D⁵, s'appliquent essentiellement à l'échelle globale et à l'échelle du canal. Elles considèrent un écoulement moyen et des températures uniformes sur les sections de passage. Elles ne peuvent donc pas prendre en compte les phénomènes qui apparaissent au niveau d'un intensificateur. Elles donnent des informations de type entrée/sortie sans indication sur l'évolution de la température à l'intérieur de l'échangeur.

La mécanique des fluides numérique peut en revanche s'appliquer à toutes les échelles, on parle alors de méthodes 2D ou 3D. Les informations issues de la simulation sont plus

5. D pour dimensions.

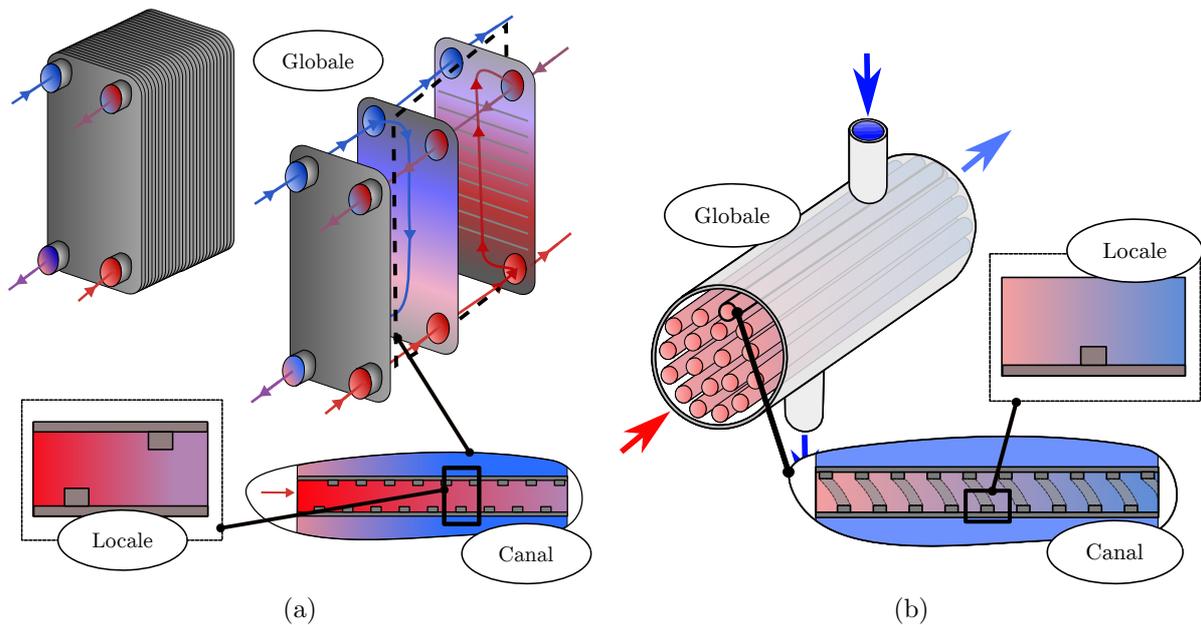


Figure 2.10 – Exemples de la différenciation des trois échelles : (a) échangeur à plaques avec des perturbateurs (*ribs*) - (b) échangeur à tubes avec perturbateurs hélicoïdaux et calandre.

nombreuses : répartition des débits, profils de vitesse et de température, évolution de la température le long de l'échangeur... Cependant la notion du coût de calcul intervient : réaliser la simulation d'un échangeur prenant en compte les trois échelles peut s'avérer problématique dans un contexte industriel, d'autant plus quand il y a plusieurs ordres de grandeur entre les différentes échelles.

Il existe également des méthodes 1D, qui utilisent les hypothèses d'écoulement moyen et d'uniformité des températures sur une section, capables de modéliser l'évolution de température le long de l'échangeur.

2.2.2 Méthodes de dimensionnement globales

Le dimensionnement d'un échangeur de chaleur passe par la prédiction de la puissance thermique échangée entre les fluides, en fonction des débits des fluides, des températures d'entrée et de la surface d'échange. Les présents travaux considèrent un échangeur mettant en jeu deux fluides, un chaud et un froid.

Il existe principalement deux méthodes pour estimer la puissance thermique cédée par le fluide chaud au fluide froid. On distingue la méthode de la différence de température moyenne logarithmique⁶, abrégée DTML, et la méthode efficacité-nombre d'unité de transfert⁷, abrégée ϵ -NUT. Ces deux méthodes reposent sur le premier principe de la thermodynamique. Cette section les présente brièvement avec leurs hypothèses.

2.2.2.1 Hypothèses

L'application des deux méthodes de dimensionnement nécessite l'idéalisation de l'échangeur, au travers de plusieurs hypothèses (Shah and Sekulic, 1998) :

6. *log mean temperature difference* - LMTD

7. *effectiveness - number of transfer unit* - ϵ -NTU

1. l'échangeur de chaleur fonctionne en régime permanent ;
2. les échanges de chaleur avec l'environnement sont négligés, et il n'y a pas de production de chaleur au sein de l'échangeur ;
3. la température est considérée homogène dans la section de passage, et les températures et vitesses en entrée sont uniformes. L'écoulement est défini par une vitesse moyenne dans la section ;
4. les propriétés des fluides sont constantes le long de l'échangeur ;
5. il n'y a pas de conduction de chaleur dans le sens de l'écoulement ;
6. le coefficient d'échange global U est uniforme dans l'échangeur ;
7. les variations de pression sont négligées pour le calcul de la thermique.

Ces différentes hypothèses fournissent un cadre qui permet de déduire du premier principe de la thermodynamique la puissance thermique échangée. Les hypothèses 4 et 5 peuvent être levées en considérant l'échangeur comme une succession de parties au seins desquelles ces hypothèses sont valides⁸.

2.2.2.2 Coefficient d'échange global

L'hypothèse 6 fait intervenir la notion de coefficient d'échange global. Ce terme représente l'inverse de la résistance thermique de l'échangeur. Le transfert thermique entre les deux fluides se fait via la succession de trois phénomènes : un échange par convection forcée entre le fluide chaud et le solide, un transfert par conduction dans le solide et un échange par convection forcée entre le fluide froid et le solide. Ces trois phénomènes mettent en jeu une résistance thermique.

L'analogie électrique (Bergman et al., 2011, Chap. 3) permet de définir le coefficient d'échange global U comme⁹ :

$$\frac{1}{US} = \frac{1}{h_h S_h} + \frac{e_s}{\lambda_s S_s} + \frac{1}{h_c S_c} \quad (2.2)$$

où les indices h , c et s désignent les fluides chaud, froid et le solide ; avec h les coefficients d'échange convectif entre les fluides (chaud (*hot*) et froid (*cold*)) et la paroi ; λ_s la conductivité thermique du solide et e_s l'épaisseur du solide, S_h , S_c et S_s les surfaces d'échange respectives.

2.2.2.3 Différence de température moyenne logarithmique

Cette méthode dérive du premier principe en considérant la puissance échangée par un élément infinitésimal d'un échangeur à courants parallèles (co-courant ou contre-courant). La puissance échangée est définie comme (Jiji, 2002, Chap. 9) :

$$\Phi = US\Delta T_{LM} \quad (2.3)$$

avec ΔT_{LM} la différence de température moyenne logarithmique qui s'exprime :

$$\Delta T_{LM} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} \quad (2.4)$$

8. On s'approche alors d'une méthode 1D.

9. dans le cas d'une plaque. Dans le cas d'un tube, l'expression fait intervenir le rayon du tube.

Dans le cas co-courant, les différences de température s'expriment :

$$\Delta T_1 = T_{hi} - T_{ci} \quad (2.5)$$

$$\Delta T_2 = T_{ho} - T_{co} \quad (2.6)$$

où les indices i et o les valeurs d'entrée et de sortie. Dans le cas d'un échangeur à contre-courant, elles deviennent :

$$\Delta T_1 = T_{hi} - T_{co} \quad (2.7)$$

$$\Delta T_2 = T_{ho} - T_{ci} \quad (2.8)$$

La méthode a été étendue à d'autres types d'échangeur (courants croisés et à passes multiples) par l'introduction d'un coefficient correctif empirique¹⁰ qui multiplie la valeur de ΔT_{LM} du cas contre-courant.

2.2.2.4 Efficacité et nombre d'unité de transfert

Il est aisé d'utiliser la méthode DTLM lorsque l'on connaît les températures d'entrée et de sortie (lorsqu'elles sont imposées typiquement). Dans le cas où seules les températures d'entrée sont connues, une procédure itérative fastidieuse est nécessaire. Il est alors préférable d'utiliser la méthode ε -NUT.

Quelques définitions sont nécessaires préalablement.

Débits de capacité thermique. En désignant le débit masse par \dot{m} et la capacité thermique par c_p , il est possible d'introduire les débits de capacité thermique des deux fluides comme le produit de ces deux quantités :

$$C_h = \dot{m}_h c_{p,h} \quad (2.9)$$

$$C_c = \dot{m}_c c_{p,c} \quad (2.10)$$

Les débits de capacité thermique minimum et maximum et le rapport des débits de capacité thermique s'expriment alors :

$$C_{min} = \min(C_h, C_c) \quad (2.11)$$

$$C_{max} = \max(C_h, C_c) \quad (2.12)$$

$$C^* = \frac{C_{min}}{C_{max}} \quad (2.13)$$

Efficacité. Cette méthode requiert la définition de l'efficacité (*effectiveness*) de l'échangeur. Elle représente le ratio entre la puissance réellement échangée et la puissance maximale échangeable :

$$\varepsilon = \frac{\Phi}{\Phi_{max}} \quad (2.14)$$

avec la puissance maximale échangeable définie comme :

$$\Phi_{max} = C_{min} (T_{hi} - T_{ci}) \quad (2.15)$$

et la puissance échangée :

$$\Phi = C_h (T_{hi} - T_{ho}) = C_c (T_{co} - T_{ci}) \quad (2.16)$$

10. tabulé

Type d'échangeur	$\varepsilon = f(\text{NUT})$
Co-courant	$\varepsilon = \frac{1 - \exp(-\text{NUT}(1+C^*))}{1+C^*}$
Contre-courant	$\varepsilon = \frac{1 - \exp(-\text{NUT}(1-C^*))}{1-C^* \exp(-\text{NUT}(1-C^*))}$

Tableau 2.1 – Exemples de relations ε -NUT.

Nombre d'unité de transfert. Le NUT, qui caractérise le pouvoir d'échange de l'échangeur, est défini comme :

$$\text{NUT} = \frac{US}{C_{min}} \quad (2.17)$$

Ce nombre est une adimensionalisation de la conductance US de l'échangeur par le débit de capacité thermique minimum.

Utilisation de la méthode. Lorsque l'on souhaite dimensionner un échangeur de chaleur, usuellement, les températures d'entrée et les débits sont connus. Le coefficient d'échange et la surface d'échange sont également connus. Il est alors possible de déterminer le NUT et Φ_{max} . L'efficacité est alors obtenue, pour les différents échangeurs, grâce à des relations qui dépendent du NUT et du rapport des débits de capacité thermique C^* . Le Tableau 2.1 donne quelques exemples de ces relations. Une liste plus complète est disponible dans le livre de Thulukkanam (2013).

Si l'on souhaite déterminer le NUT permettant de transférer une puissance donnée, alors une méthode itérative est utilisée.

L'hypothèse 4 impose que les propriétés physiques des fluides soient constantes le long de l'échangeur. Cependant celles-ci dépendent de la température du fluide. Usuellement, elles sont évaluées à une température moyenne entre l'entrée et la sortie :

$$\bar{T} = \frac{T_i + T_o}{2} \quad (2.18)$$

Étant donné que la température de sortie n'est pas connue initialement, une procédure itérative est utilisée jusqu'à la convergence de \bar{T} (à une tolérance près).

2.2.2.5 Calcul des pertes de charge

Il existe plusieurs méthodes permettant de calculer les pertes de charge dans l'échangeur et qui vont dépendre du niveau de précision considéré (effets d'entrée ou de sortie, inertie, friction, ...). La plus simple est de considérer uniquement les pertes de charge dues aux frottements dans la partie active. Elles s'expriment en fonction d'un coefficient de perte de charge¹¹ C_f , comme (Shah and Sekulic, 2003, Chap. 6) :

$$\Delta P_{ech} = C_f \frac{L_E}{D_H} \frac{\rho U_{ref}^2}{2} \quad (2.19)$$

avec L_E la longueur de la partie active, D_H le diamètre hydraulique du canal, ρ la masse volumique et U_{ref} la vitesse de référence du fluide considéré.

11. usuellement selon la définition donnée par Fanning

2.2.2.6 Détermination des coefficients d'échange convectif et de frottement

Afin de pouvoir calculer le nombre d'unité de transfert, il faut déterminer les coefficients d'échange convectif entre les fluides et le solide. Dans les échangeurs, ils dépendent du type et des dimensions des intensificateurs du transfert (voir Section 2.1.3). Pour quelques intensificateur, des corrélations issues de résultats expérimentaux existent dans la littérature. Elles permettent de déterminer le coefficient d'échange (ou le nombre de Nusselt) en fonction des dimensions de l'intensificateur et des régimes d'écoulement (caractérisés par le nombre de Reynolds) (Manglik and Bergles, 1995; Thulukkanam, 2013). De même, il existe des corrélations pour le coefficient de perte de charge.

Cette approche permet efficacement de dimensionner un échangeur utilisant des intensificateurs étudiés. Elle reste cependant limitée pour le développement de nouvelles géométries.

2.2.3 Modélisation par la mécanique des fluides numérique

Le mouvement d'un fluide est régi par les équations de Navier-Stokes, qui traduisent les hypothèses de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale de ce fluide (voir Annexe A.1). Excepté pour certains cas particuliers, elles ne peuvent être résolues analytiquement. Une solution approchée est alors calculée sur la base d'une discrétisation de l'espace et du temps (Ferziger and Peric, 2012). On parle alors de mécanique des fluides numérique, *Computational Fluid Dynamics* en anglais ou plus simplement CFD. La solution approchée, ou simulation, permet d'accéder aux champs de vitesse, pression et température pour analyser les écoulements.

2.2.3.1 La CFD dans les échangeurs

La CFD est devenue un outil important pour la modélisation et la conception des échangeurs de chaleur. Elle est principalement utilisée pour simuler les effets des boîtes d'échangeur sur la répartition du fluide entre les canaux, mais également pour simuler les effets d'un intensificateur localement (Sundén, 2007). La simulation de l'échangeur complet nécessite une discrétisation précise de chaque canal. Celle-ci conduit à un coût prohibitif, difficilement acceptable dans un contexte industriel. On préfère alors l'utilisation d'approche moyenne ou poreuse (Missirlis et al., 2010). Bhutta et al. (2012) synthétisent de nombreux travaux sur l'application de la CFD aux échangeurs de chaleur.

Dans la pratique, il est courant que la CFD soit utilisée pour simuler le comportement d'un intensificateur, pour différentes géométries et différents régimes d'écoulement. Cela permet ensuite de déterminer une loi de comportement du coefficient d'échange thermique et du coefficient de frottement à la paroi. À partir de ces résultats, des corrélations (numériques) peuvent être construites afin d'être utilisées ensuite avec une méthode de dimensionnement globale ou 1D (Abdelaziz, 2009, Chap. 4).

2.2.3.2 Modélisation de la turbulence pour le transfert thermique

Les transferts thermiques sont dépendants du régime d'écoulement du fluide dans les canaux. On distingue généralement trois régimes : laminaire, turbulent et de transition entre les deux. Le régime est caractérisé par le nombre de Reynolds, qui compare les forces

d'inertie et les forces visqueuses :

$$Re = \frac{\rho U_{ref} D_H}{\mu} \quad (2.20)$$

avec ρ la masse volumique, μ la viscosité dynamique, U_{ref} une vitesse de référence et D_H une dimension caractéristique, souvent le diamètre hydraulique des canaux¹². Un nombre de Reynolds faible correspond à un écoulement laminaire et élevé à un écoulement turbulent. Une plage de nombre de Reynolds de transition va caractériser le changement de régime¹³.

En régime turbulent, l'écoulement est composé d'une multitude de structures tourbillonnaires de taille et de temps caractéristique variés. On distingue usuellement des structures macroscopiques déterministes non turbulentes et des structures microscopiques stochastiques, turbulentes. La simulation numérique va chercher à calculer ces tourbillons ou au moins leurs effets.

Afin de capter toutes les structures, une discrétisation spatio-temporelle très fine¹⁴ est nécessaire. Cette approche est connue sous le nom de simulation numérique directe (*Direct Numerical Simulation* - DNS). Elle n'est réalisable en pratique que pour des écoulements simples et pour des nombres de Reynolds modérés, en raison des ressources de calcul très importantes qu'elle requiert.

Une deuxième approche est la simulation des grandes échelles (*Large Eddy Simulation* - LES) qui consiste à calculer les plus grandes structures stochastiques et à modéliser analytiquement les plus petites structures. Cette approche nécessite cependant toujours beaucoup de ressources pour des géométries et des écoulements complexes. Elle est donc en pratique utilisée sur peu de cas industriels, et n'est pas adaptée dans le cadre de l'optimisation.

La dernière approche est la plus utilisée actuellement dans l'industrie. Elle implique de décomposer l'écoulement en une composante statistique moyenne (au sens de Reynolds) et une composante fluctuante. Cette décomposition et l'application de la moyenne (au sens de Reynolds) aux équations de Navier-Stokes font apparaître de nouvelles inconnues au niveau des équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie. Les premières forment le tenseur des contraintes de Reynolds (*Reynolds stress tensor*). Les secondes sont les flux de chaleur turbulents (*turbulent heat fluxes*), et mettent en évidence l'importance des fluctuations de la vitesse dans l'échange par convection. Cette méthode, dite RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*), nécessite alors des **modèles de turbulence** afin de déterminer ces grandeurs, représentatives de la turbulence. Dans cette approche, seules les structures tourbillonnaires déterministes sont résolues.

Modélisation du tenseur des contraintes de Reynolds. Deux stratégies principales de modélisation existent. Les **modèles à loi de comportement** (*Eddy Viscosity Models*), ou de premier ordre, utilisent des relations algébriques pour modéliser les tensions de Reynolds. Ils reposent sur l'hypothèse de Boussinesq, qui relie le tenseur de Reynolds à la déformation du champs moyen via l'introduction d'une viscosité turbulente, notée ν_t .

12. le diamètre hydraulique est défini comme $D_H = \frac{4\chi}{S}$ avec χ le périmètre et S l'aire.

13. Pour les écoulements internes il est compris entre 2000 et 3000.

14. Typiquement, inférieur à l'échelle de Kolmogorov.

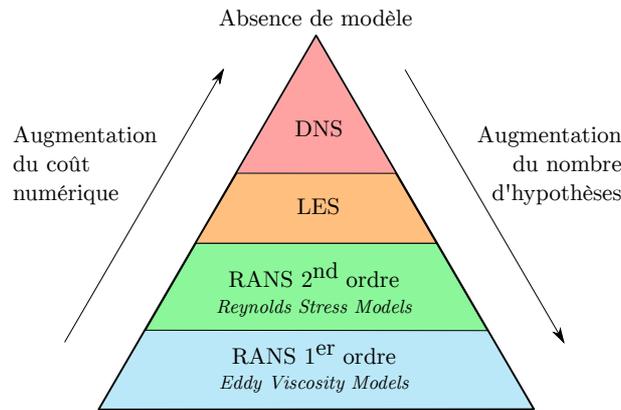


Figure 2.11 – Représentation schématique des différentes approches de modélisation de la turbulence.

Plusieurs modèles ont été proposés, tel que le $k - \epsilon$ (Launder, 1974), le $k - \omega$ (Wilcox, 1988) et sa variante *Shear Stress Transport - SST* - (Menter, 1994) ou le $\overline{v^2} - f$ (Durbin, 1991) et ses variantes $\zeta - f$ (Hanjalić et al., 2004) et $Bl - \overline{v^2}/k$ (Billard and Laurence, 2012).

Il est possible d'aller au delà de cette hypothèse en modélisant directement les **tensions de Reynolds** (*Reynolds Stress Models*) via des modèles de second ordre. Parmi les plus couramment utilisés, on trouve le RSM-SSG (Speziale et al., 1991) et l'EB-RSM (Manceau and Hanjalić, 2002). Ils n'ont pas été retenus dans les présents travaux car trop coûteux dans le cadre de l'optimisation.

Parmi les modèles précédents, le $k - \epsilon$ et RSM-SSG sont incapables, à cause des hypothèses qu'ils utilisent, de reproduire les phénomènes se produisant proche de la paroi. Ils utilisent donc des lois de paroi, afin de modéliser les phénomènes, et nécessitent d'avoir une discrétisation spatiale dont le premier point de calcul est suffisamment distant de la paroi¹⁵. Ces modèles sont dits **Haut-Reynolds**. Au contraire, des modèles comme le $Bl - \overline{v^2}/k$, le $k - \omega$ SST ou l'EB-RSM, qui résolvent intégralement la couche limite turbulente, sont dits **Bas-Reynolds**. Ils nécessitent une discrétisation spatiale très fine à la paroi¹⁶. Ce sont donc des modèles plus coûteux en ressources de calcul (Wald, 2016, Chap. 2).

L'Annexe A.2 présente ces différents modèles plus en détails. La Figure 2.11 résume les différentes approches, en indiquant l'accroissement du coût numérique et des hypothèses sous-jacentes à chacune des approches.

Modélisation des flux de chaleur turbulents. Comme pour les tensions de Reynolds, il est possible de modéliser les flux de chaleur turbulents de deux façons (Dehoux, 2012). La première consiste à utiliser directement l'équation de transport vectorielle des flux. La seconde est d'utiliser des modèles algébriques simplifiés. La seconde approche est généralement préférée dans l'industrie. Les modèles standards pour la convection forcée sont l'*Algebraic Flux Model* (AFM), le *Generalized Gradient Diffusion Hypothesis* (GGDH) et le *Simple Gradient Diffusion Hypothesis* (SGDH) (Dehoux, 2012).

L'AFM est le modèle le plus complet, car il prend en compte tous les termes de production de l'équation de transport, mais requiert le calcul de la variance de la fluctuation

15. La condition typiquement utilisée est que $y^+ > 30$ (voir Annexe A.2).

16. Usuellement $y^+ \simeq 1$.

de la température. Sa simplification, en ne considérant que le terme de production dû au gradient thermique en convection forcée, a conduit au modèle GGDH. Il requiert la résolution des tensions de Reynolds et n'est donc pas applicable avec les modèles *eddy viscosity*. Le modèle SGDH est le plus simple et le plus utilisé dans l'industrie. Il modélise les flux de chaleur turbulents via une loi de Fourier et une diffusivité thermique turbulente. Celle-ci est obtenue en divisant la viscosité turbulente par un nombre de Prandtl turbulent.

Il existe également des formulations Haut et Bas-Reynolds pour ces termes, faisant intervenir soit des lois de paroi, soit des fonctions d'amortissement. Toutes sont compatibles avec le modèle SGDH.

Choix des modèles. Dans les présents travaux, les modèles $k - \omega$ SST et $Bl - \overline{v^2}/k$ sont utilisés. De ce fait, le modèle SGDH est choisi pour modéliser les flux de chaleur turbulents.

Le modèle $k - \omega$ SST assure une transition, via l'utilisation de fonctions de raccordement, entre le modèle $k - \omega$ en proche paroi et le modèle $k - \epsilon$ dans la zone pleinement turbulente. Il combine donc les avantages de ces deux modèles, ce qui en fait un modèle largement utilisé actuellement dans l'industrie. Il représente donc un choix standard.

Le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ peut être considéré comme une amélioration du $k - \epsilon$. Il se base sur les travaux de Durbin (1991) qui propose de modéliser la composante du tenseur des contraintes de Reynolds normales à la paroi par un scalaire $\overline{v^2}$, via une troisième équation de transport (en plus de k et ϵ) et un terme de redistribution de l'énergie f . Cela permet de prendre en compte l'effet de la paroi sur la viscosité turbulente sans passer par l'utilisation de fonction d'amortissement. Le terme f est solution d'une équation elliptique. Hanjalić et al. (2004) proposent de considérer $\overline{v^2}/k$ plutôt que $\overline{v^2}$ afin de rendre le modèle plus robuste. L'originalité du $Bl - \overline{v^2}/k$ réside dans l'utilisation d'une pondération elliptique¹⁷ pour calculer le terme f . Dans ce modèle, c'est le coefficient de pondération qui est solution d'une équation elliptique. Encore une fois, ces modifications ont pour but d'améliorer la robustesse et la stabilité du modèle. De nombreuses études ont montré que cette classe de modèle, associée au SGDH, se révèle très performante pour la modélisation des transferts thermiques en convection forcée, en présence de perturbations des couches limites thermique et dynamique (Manceau and Hanjalić, 2002; Iaccarino et al., 2002; Sundén, 2007; Keshmiri et al., 2016; Dehoux et al., 2017). C'est pour cela qu'il a été choisi dans le cadre des présents travaux, étant de plus un bon compromis entre précision, robustesse et temps de calcul.

2.2.3.3 Utilisation de la CFD pour la prédiction des performances globales de l'échangeur

Les considérations précédentes sont essentielles lorsque l'on cherche à modéliser l'écoulement du fluide dans le cas des intensificateurs. Cependant, il est de plus en plus nécessaire de devoir estimer, non pas uniquement les performances de ces éléments locaux, mais les performances de l'échangeur complet et les effets d'une mauvaise distribution.

Construction de corrélations. Dans ses travaux de thèse, Abdelaziz (2009) propose d'utiliser un couplage entre la simulation CFD d'un "segment" de l'échangeur avec une méthode ϵ -NUT à chaque segment. La mauvaise distribution est prise en compte via

17. entre une valeur pariétal et une valeur au cœur de l'écoulement

une simulation des boîtes d'échangeur, sans thermique, entraînant une modification de la méthode ε -NUT.

Une approche similaire est proposée par Ciuffini et al. (2016). Ils réalisent la simulation d'un intensificateur périodique (ailettes à persiennes) pour construire des surfaces de réponses et utilisent les performances déduites dans une méthode ε -NUT.

Utilisation de milieux poreux. D'autres méthodes proposent de modéliser l'échangeur comme un milieu poreux. Cela permet de prendre en compte les interactions entre les différents fluides et l'impact des problèmes de distribution sur les performances de l'échangeur. Les paramètres majeurs définissant le milieu poreux sont la perte de charge et le coefficient d'échange thermique.

Missirlis et al. (2010) proposent d'employer une loi de Darcy-Forchheimer pour la perte de charge, avec une prise en compte de l'anisotropie, associée à une corrélation pour le nombre de Nusselt, dépendant des nombres de Reynolds et Prandtl. Les coefficients intervenant dans ces lois sont obtenues expérimentalement.

Huang et al. (2014) utilisent un milieu poreux pour simuler un échangeur automobile, avec des tubes plats munis d'ailettes *wavy*. La perte de charge du milieu suit une loi de Darcy-Forchheimer isotrope et les coefficients sont issus d'une simulation CFD locale réalisée sur un tube. Les termes thermiques instationnaires et les flux de conduction sont modifiés pour tenir compte de la porosité. La méthodologie débute par simulation poreuse avec des coefficients arbitraires, suivie d'une simulation locale pour modifier les coefficients. Une nouvelle simulation poreuse est réalisée pour déterminer les performances de l'échangeur.

Musto et al. (2016) utilisent également un milieu poreux pour simuler les performances d'un échangeur huile/air présent sur un avion. La méthode est similaire à celle de Huang et al. (2014), à la différence près des coefficients du milieu poreux, qui sont issus d'une extrapolation des données du constructeur.

2.2.3.4 Modélisation de l'encrassement dans les EGR coolers

La mécanique des fluides numérique est également très utilisée pour modéliser des physiques complexes comme l'encrassement. Dans les présents travaux, l'encrassement des EGR coolers est considéré. Il s'agit principalement d'un encrassement particulaire, piloté par la thermophorèse, et d'un encrassement chimique, induit par la diffusiphorèse et qui impacte le vieillissement du dépôt. Seule la thermique est prise en compte ici, les aspects liés à la chimie étant négligés. Cette section présente les différentes approches utilisées pour la modélisation de l'encrassement particulaire sous l'effet de la thermique.

Il existe principalement deux approches pour modéliser les écoulements fluides particules. Une approche, dite Lagrangienne, consiste à simuler le mouvement de chaque particule (ou groupe de particules) en réalisant un bilan des forces s'exerçant sur celles-ci. Une seconde approche, dite Eulérienne, considère les particules dans le fluide via une concentration scalaire (Healy, 2003).

La formulation Lagrangienne est intrinsèquement la plus précise car toutes les forces s'exerçant sur la particule sont prises en compte. Healy (2003) synthétise dans ses travaux les différentes interactions entre le fluide et les particules, conduisant à leurs mouvements et leur dépôt (thermophorèse, mouvement brownien et inertie). Les interactions particules/particules peuvent également être considérées (Henry et al., 2012) afin de modéliser les phénomènes d'agrégation et de colmatage. Enfin les interactions particules/paroi sont

prises en compte afin de pouvoir modéliser l'arrachement et la resuspension des particules (Henry and Minier, 2014). Le coût numérique de cette approche reste important, en particulier si les particules sont "polydispersées"¹⁸. Elle est de ce fait encore peu utilisée pour la prédiction de l'encrassement dans des applications industrielles.

L'approche Eulérienne a l'avantage d'être moins coûteuse mais considère un comportement moyen via une concentration, risquant donc d'être moins précise. Pour la modélisation de l'encrassement dans les EGR coolers, sans prise en compte de la chimie, le modèle proposé par l'équipe de Paz semble prometteur (Suárez et al., 2010; Paz et al., 2013). Les résultats numériques présentés sont en adéquation avec les observations expérimentale du dépôt. Celui-ci est modélisé via une vitesse de déposition qui dépend de la thermophorèse, déterminée via le modèle de Talbot et al. (1980), et du mouvement brownien, modélisé par la corrélation de Wood (1981). Comme énoncé dans la Section 2.1.4.3, l'arrachement reste le mécanisme le moins connu. Un consensus existe sur la stabilisation de la couche encrassante et l'hypothèse est faite que cela dépend du taux de cisaillement et ainsi de la différence de pression entrée/sortie de l'échangeur. Dans le modèle de Paz et al. (2013), la vitesse d'arrachement est ainsi proportionnelle au cisaillement local et à un coefficient correctif, reposant sur des mesures expérimentales.

2.2.3.5 Notion de maillage : création et déformation

Les simulations de mécanique des fluides numérique reposent sur une discrétisation spatiale des équations de Navier-Stokes. Il existe principalement trois méthodes de discrétisation : différences finies, éléments finis et volumes finis. Dans les présents travaux, la troisième est considérée. Elle consiste à diviser l'espace en un ensemble de volumes de contrôle, sur lesquels les équations de Navier-Stokes conservatives sont intégrées.

Définition d'un maillage. Ainsi la notion de grille de calcul, ou **maillage**, qui caractérise la discrétisation spatiale, impacte grandement la solution des simulations. Un maillage est formé par un ensemble de **nœuds** (*nodes*) et par une arborescence définissant les liaisons entre les nœuds, que l'on nomme **connectivité**. Ces liaisons vont ainsi définir les volumes de contrôle, appelés **cellules**, et les faces de ces cellules. En trois dimensions, on trouve différents types de cellules (hexaédriques, tétraédriques ou prismatiques) et de faces (carrées ou triangulaires).

On distingue généralement deux familles de maillage :

- les **maillages structurés**, pour lesquels la localisation des nœuds est définie par des indices¹⁹. Ainsi, ce type de maillage est uniquement constitué d'hexaèdres. La définition des nœuds voisins et la détermination des cellules sont donc aisées, et la connectivité ne nécessite pas le stockage d'une arborescence. Cependant, ces maillages sont difficiles d'emploi pour représenter des géométries très complexes.
- les **maillages non structurés**, pour lesquels l'identification des nœuds repose sur leurs coordonnées et leur numéro. La connectivité doit être stockée dans une arborescence, afin de bien identifier les nœuds voisins et les cellules. Cela permet d'utiliser une plus grande variété d'éléments, et ainsi de décrire des formes arbitrairement complexes. Cependant, les méthodes numériques nécessaires à la résolution des équations sont plus difficiles à mettre en œuvre sur ces maillages.

18. le diamètre des particules varie dans une large gamme.

19. (i, j, k) en 3D

Le choix entre ces familles dépend du solveur CFD utilisé et du parti-pris de ses développeurs.

Qualité d'un maillage. La réalisation d'un "bon" maillage va dépendre des applications considérées, des modèles physiques utilisés et des méthodes numériques (Wintergerste et al., 2002; ERCOFTAC, 2000). Par exemple, les modèles de turbulence Bas-Reynolds vont nécessiter une condition $y^+ \leq 1$ pour la taille de la première cellule proche paroi. Ou bien, des conditions de stabilité (condition de Courant-Friedrichs-Lewy par exemple) vont imposer une taille de cellule minimale. Un maillage de qualité permet de limiter les erreurs induites par la discrétisation. Ainsi, la création d'un maillage requiert une compétence "métier"²⁰ et une compétence "solveur"²¹.

Des métriques existent pour vérifier la qualité du maillage, indépendamment de la physique et du solveur utilisé (Knupp, 2003) et sont liées à la compétence métier (*aspect ratio*, distorsion, orthogonalité). Depuis 1993, le *Journal of Fluids Engineering* met en exergue l'importance d'un maillage correct et de l'étude de sensibilité au maillage (Freitas, 2002). Cela permet d'évaluer les erreurs numériques liées à la discrétisation et de s'en affranchir au maximum.

Le maillage dans l'optimisation de forme, deux stratégies. Dans une procédure standard de création de maillage, la première étape consiste à générer une géométrie (un canal par exemple) via un outil de Conception Assistée par Ordinateur (CAO). C'est sur cette géométrie que se base ensuite l'outil de maillage : il génère usuellement un maillage des frontières du domaine et "maille" enfin le volume.

Dans le cadre de l'optimisation de forme reposant sur des simulations CFD, il faut pouvoir propager le changement de forme sur le maillage. Une contrainte est que cette étape soit la plus automatique possible, afin de limiter les actions de l'utilisateur. Pour cela, deux stratégies sont généralement utilisées (Mohammadi and Pironneau, 2004) :

- le **remaillage**, qui consiste à modifier la géométrie via la CAO et à générer un nouveau maillage (Duchaine, 2007). Elle présente ainsi l'avantage de pouvoir supporter des changements de forme important. Cependant, elle nécessite une stratégie de maillage robuste, pour faire face à toutes les situations, parfois au détriment du savoir-faire métier. Le nombre et la taille des cellules peuvent également changer entre les formes. Des outils de remaillage performants sont de nos jours assez bien introduits dans des logiciels commerciaux.
- la **déformation de maillage** ou *morphing*, qui consiste à faire bouger directement les frontières d'un maillage initial pour représenter le changement de forme. Ainsi, l'utilisation d'un outil de CAO n'est plus obligatoire et les savoir-faire métier et solveur peuvent être conservés. En effet, il est possible de réaliser le maillage initial respectant tous les critères de qualité. De plus, cette stratégie va conserver le nombre de nœuds et la connectivité entre ceux-ci. Cela permet de réaliser des reprises de calcul sans interpolation des champs physiques (Mastrippolito et al., 2018a). Cependant, cette stratégie ne supporte généralement pas les changements de forme trop importants.

20. Bonne utilisation des outils de création de maillage.

21. Respect de certaines conditions liées aux modèles et à la résolution.

Déformation de maillage. L'idée sous-jacente à la déformation du maillage va être de déplacer les nœuds de la frontière et de propager ce déplacement aux nœuds internes. Il existe pour cela plusieurs méthodes rapportées dans la littérature et dont voici une liste non-exhaustive :

- l'analogie avec les **ressorts** (Batina, 1990; Farhat et al., 1998), s'applique aux maillages non structurés. Les nœuds sont assimilés à des masses reliées par des ressorts, dont la rigidité dépend de la longueur des liaisons. Ainsi, il est possible de construire une matrice de rigidité du maillage. Lorsque les frontières bougent, le déplacement des nœuds internes est déduit de cette matrice, via la résolution d'un système linéaire. Cette méthode peut conduire à des repliements (*folding*) du maillage, et requiert de connaître la connectivité.
- l'approche **pseudo-solide** (Nielsen and Anderson, 2002), considère le maillage comme un solide, et va appliquer les théories de l'élasticité linéaire pour propager la déformation. Un coefficient de Poisson est utilisé pour paramétrer l'amplitude du mouvement. Cependant, le choix de ce coefficient est complexe, et le coût de calcul de la méthode reste élevé.
- l'approche **free form deformation** (Sederberg and Parry, 1986), déforme le maillage en modifiant l'espace autour de lui, via une "boite" qui l'englobe. La déformation de cette boite est propagée au maillage via une loi de déformation. Cette méthode permet de s'affranchir des complexités géométriques du maillage. Cependant la déformation résultante est complexe à contrôler.
- la méthode utilisant des **fonctions à base radiale** (*Radial Basis Functions* - RBF) (Jakobsson and Amoignon, 2007; Rendall and Allen, 2008), va interpoler le déplacement connu de points de contrôle (situés à la frontière) aux nœuds internes du maillage. La zone d'influence est définie par l'utilisation de fonctions à base radiale. Cette méthode ne nécessite pas d'information sur la connectivité et considère le maillage comme étant un nuage de points. L'Annexe B présente la méthode en détail, ainsi que les différentes contributions apportées au cours de cette thèse, notamment sur la gestion d'une condition de glissement (Aubert et al., 2017) et sur l'amélioration des performances (Mastripolito et al., 2018a).
- la méthode des **déplacements aux moindres carrés** (*moving least square* - MLS) (Sieger et al., 2016) est présentée comme une alternative aux RBF. Elle propage le déplacement des nœuds de la frontière, de sorte à minimiser l'énergie de déformation.

Le choix entre ces méthodes dépend essentiellement des contraintes d'utilisation. Dans le domaine des interactions fluide/structure par exemple, la méthode utilisant des RBF connaît un engouement certain depuis les travaux de Jakobsson and Amoignon (2007). En effet, elle produit un champ de déplacement continu et indépendant du maillage utilisé. Ainsi elle permet de travailler avec des maillages structurés ou non, discrétisant le domaine fluide (pour la CFD) ou le domaine solide (pour la mécanique des structures). De plus, l'utilisation des points de contrôle permet de décrire précisément la forme et la déformation. Les divers avantages de cette méthode ont conduit à l'utiliser dans les présents travaux.

2.2.4 Synthèse des outils

Les différents outils existants pour la modélisation et le dimensionnement des échangeurs de chaleur ont été présentés. Chacun d'eux peut être utilisé pour considérer différen-

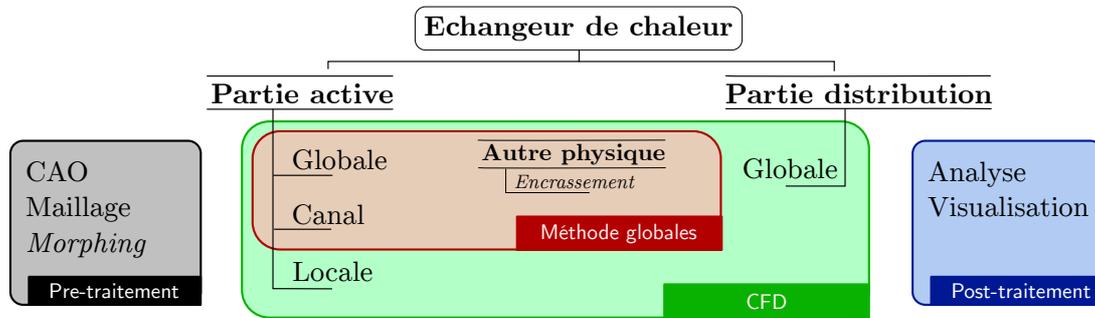


Figure 2.12 – Représentation schématique des différents outils intervenant dans la modélisation des échangeurs de chaleur.

tes échelles spécifiques et intégrer des physiques autres que la thermohydraulique, comme l’illustre la Figure 2.12. La CFD nécessitent par ailleurs des outils de pré-traitement (*pre-processing*) et de post-traitement (*post-processing*).

Dans les présents travaux, la méthode ε -NUT repose sur une implémentation Python²² et les relations ε -NUT les plus courante sont disponibles dans le package `ht.hx` (Bell, 2016). Les propriétés des fluides sont déterminées avec le package `CoolProp`²³ (Bell et al., 2014).

Le solveur de mécanique des fluides numérique utilisé est `Code_Saturne` (EDF R&D, 2018a), un code *open-source* sous licence GNU, présenté dans l’Annexe A.3. Le traitement des résultats CFD est assuré au travers de l’application `Paraview`²⁴ (Ayachit, 2015), qui possède l’avantage d’être scriptable en Python.

La plate-forme ANSYS®Workbench²⁵ a permis de mettre en place un stratégie de remaillage automatique et robuste. Elle dispose d’outils de CAO (`DesignModeler`) et de maillage (`Meshing`) ainsi que de fonctionnalités permettant le paramétrage de la forme, la mise à jour de la géométrie et la génération du maillage. L’automatisation des différentes étapes (import des paramètres, création du maillage, export du maillage) est scriptable en Python. Un outil de *morphing* par RBF a été développé au cours de cette thèse reposant sur une implémentation Python.

Afin de simplifier les échanges de données entre les différents outils (maillage, *morphing*, simulation, post-traitement), le format standardisé CGNS²⁶ (Poinot, 2016) a été utilisé.

2.3 Optimisation des échangeurs, revue de la littérature

Depuis une vingtaine d’années, l’optimisation de forme des échangeurs, utilisant des outils numériques, est un domaine de recherche qui gagne en intérêt grâce à l’augmentation de la puissance des ressources de calcul et au développement d’outils mathématiques adéquats. Cette section propose une revue de la littérature des principales études traitant de l’optimisation des performances des échangeurs de chaleur que ce soit d’un point de

22. Version 2.7 - <http://www.python.org/>

23. <http://www.coolprop.org/>

24. Version 5.4 - <https://www.paraview.org>

25. Release 18.0

26. *CFD General Notation System* - <https://cgns.github.io/>

vue global (échangeur complet) ou local (intensificateur). Les méthodes d'optimisation sont détaillées plus particulièrement.

2.3.1 Une question de performances

L'optimisation vise à déterminer les performances conduisant au meilleur fonctionnement possible de l'échangeur. Cette notion est donc de première importance.

2.3.1.1 Performances à l'échelle locale

Lorsque l'objet de l'optimisation est un intensificateur, les performances sont usuellement décrites par le nombre de Nusselt moyen du motif :

$$Nu_{D_H} = \frac{\bar{h}D_H}{\lambda} \quad (2.21)$$

et le coefficient de perte de charge moyen :

$$C_f = \frac{\Delta P_{i,o}}{0.5 \rho U_{ref}^2} \frac{D_H}{L}, \quad (2.22)$$

avec, \bar{h} le coefficient d'échange moyen sur le motif, λ la conductivité thermique du fluide, ρ la masse volumique, $\Delta P_{i,o}$ la différence de pression statique entre l'entrée et la sortie du motif, U_{ref} la vitesse du fluide, D_H le diamètre hydraulique et L la longueur du motif.

Comme abordé dans la Section 2.1.3, l'intensification des transferts thermiques est principalement la conséquence de trois phénomènes. Guo et al. (1998) ont cherché à développer un concept permettant d'expliquer de manière unique ces trois phénomènes. Ils ont mis en évidence l'interaction entre la vitesse et le gradient de température pour l'amélioration des transferts, qu'ils nomment synergie (*synergy*). L'angle de synergie entre la vitesse et le gradient est alors mesuré. La minimisation de cet angle conduit à maximiser le transfert ; en d'autres termes, le transfert est maximal si l'écoulement est dans le même sens que le gradient thermique. Ce concept peut être utilisé pour analyser localement le transfert thermique, mais n'est pas propice dans le cadre de l'optimisation. Une discussion est proposée dans l'Annexe C.

2.3.1.2 Performances à l'échelle globale

Lorsque l'optimisation porte sur l'échangeur global, les performances sont définies grâce à l'efficacité de l'échangeur ε , défini Eqn. (2.14), et la perte de charge de l'échangeur ΔP_{ech} , définie Eqn. (2.19). La mauvaise distribution du fluide peut être quantifiée par l'écart-type de la distribution de débit dans chaque canal, noté Υ (Saleh et al., 2013b; Koo et al., 2014) :

$$\Upsilon = \sqrt{\frac{1}{N_{ch}} \sum_{i=1}^{N_{ch}} (\dot{m}_i - \bar{\dot{m}})^2} \quad (2.23)$$

avec N_{ch} le nombre de canaux de l'échangeur, \dot{m}_i le débit masse circulant dans le i -ème canal et $\bar{\dot{m}}$ le débit moyen de l'ensemble des canaux

$$\bar{\dot{m}} = \frac{1}{N_{ch}} \sum_{i=1}^{N_{ch}} \dot{m}_i \quad (2.24)$$

Les notions de coût et/ou d'encombrement de l'échangeur sont également présentées dans la littérature comme des objectifs à minimiser (Gholap and Khan, 2007; Maghsoudi et al., 2018).

2.3.1.3 Approche thermodynamique

La littérature, depuis les années 80, fait état d'une approche thermodynamique (*second law approach*) pour évaluer les performances (Bejan, 2006). Elle repose sur les notions de production d'entropie et de destruction d'exergie. Ces critères permettent de quantifier l'irréversibilité d'une transformation affectant un système : dans les échangeurs, le transfert de chaleur entre les fluides. Le principe de minimisation de la production d'entropie (*Entropy Generation Minimization*) vise à se rapprocher au maximum d'une transformation réversible idéale, correspondant à une situation générant le moins de perte d'énergie. Comme présenté dans l'Annexe C, cette approche n'est pas utilisée dans les présents travaux car la production d'entropie ne constitue pas un objectif discriminant dans le cadre de l'optimisation des échangeurs, lorsque ceux-ci sont considérés en tant que composants isolés n'étant pas inclus dans un système thermodynamique.

2.3.1.4 Autres critères

D'autres critères sont bien sur utilisables en fonction des applications. Dans les présents travaux, des critères relatifs à l'encrassement sont utilisées. Wen et al. (2018) utilisent la contrainte mécanique que subit une ailette OSF dans le cadre de simulations thermo-mécaniques. L'uniformité de la température et la l'apparition de point singulier en température sont également envisageable à différentes échelles.

2.3.2 Optimisation thermique à l'échelle globale

Lorsque l'échangeur est considéré à l'échelle globale, les paramètres de l'optimisation sont généralement les dimensions des éléments le constituant : le diamètre des tubes, la taille des plaques, l'épaisseur des ailettes ou le nombre de canaux par exemple. Les performances sont alors usuellement déterminées grâce aux méthodes de dimensionnement globales (voir Section 2.2.2). Le Tableau 2.2 présente une revue des différentes méthodes d'optimisation utilisées dans la littérature. La notion de moteur d'optimisation est présentée dans le Chapitre 3.

Il est difficile de définir un point de départ dans la littérature sur l'utilisation d'une méthode en particulier. Chaudhuri et al. (1997) semblent être parmi les premiers à avoir utilisé une méthode de recuit simulé pour minimiser la surface d'échange nécessaire au transfert d'une puissance donnée. Selbas et al. (2006) proposent également de minimiser la surface d'échange d'un échangeur tubes et calandre en utilisant l'algorithme génétique de Holland (1975).

Suite à ces travaux, comme le montre le Tableau 2.2, beaucoup d'auteurs ont utilisé des algorithmes génétiques pour l'optimisation des échangeurs, et en particulier le NSGA-II pour les problèmes multiobjectifs. La majorité des études portant sur les échangeurs à plaques cherchent à optimiser la forme des ailettes en se basant sur des corrélations issues de la littérature. Certains auteurs proposent des algorithmes d'optimisation spécifiques (Costa and Queiroz, 2008; Raja et al., 2017). Avant 2010, l'optimisation était essen-

tiellement mono-objectif, les différents objectifs étant traités par agrégation (voir Section 3.1.3.2).

2.3.3 Optimisation thermique à l'échelle locale ou canal

En parallèle de ces optimisations à l'échelle globale, des études ont cherché à optimiser la forme des intensificateurs. En effet, les corrélations de la littérature limitant la plage de variation des paramètres, l'utilisation de la CFD pour prédire les performances a permis de développer de nouvelles formes. Le Tableau 2.3 synthétise différentes études tirées de la littérature. Les notions relatives à la colonne "Optimisation" sont présentées dans le Chapitre 3

Le carburant pour l'optimisation (voir Section 3.1.3.3) étant la CFD, le coût des évaluations est important. C'est pour cela que la majorité des études utilisent un méta-modèle et un plan d'expériences. La méthode de krigeage et les surfaces de réponse polynomiale (RS) sont les plus représentées. Les moteurs d'optimisation sont principalement des algorithmes génétiques multiobjectifs (MOGA (Fonseca and Fleming, 1993) et NSGA-II (Deb et al., 2002)). Introduite par Kim et al. (2011), la méthode de *clustering* (classification) par *K-means* est utilisée pour mettre en évidence un nombre fini de formes représentatives.

Certains auteurs louent la précision des métamodèles basés sur des RS. Cependant, comme nous le verrons plus tard, un des avantages du métamodèle de krigeage est sa capacité à évaluer la vraisemblance de sa prédiction. Dans leurs comparaisons, Husain and Kim (2010) et Wansaseub et al. (2017) mettent en évidence un meilleur comportement du krigeage avec des géométries de complexité croissante (par rapport à au moins deux autres métamodèles).

Relativement peu d'études enrichissent leurs métamodèles dynamiquement (voir Section 3.3.5). Dans cette synthèse, seule l'équipe de Saleh et al. (2013b) utilise un enrichissement basé sur un échantillonnage des individus du front de Pareto tant que l'erreur moyenne de prédiction (RMSE) est supérieure à une tolérance.

2.3.4 Optimisation de la distribution

Plus récemment, des études ont cherché à optimiser les boîtes d'échangeur. Saleh et al. (2013a) utilisent des NURBS pour définir la forme du distributeur d'un échangeur à tubes. La méthode repose sur un algorithme génétique (MOGA) et un métamodèle de krigeage, alimenté par des simulations CFD. Le but est de minimiser l'écart-type de la distribution Υ et la perte de charge. Un enrichissement de ce métamodèle sur la base des individus du front de Pareto est réalisé. Le modèle numérique utilise une approche poreuse pour simuler la perte de charge dans les tubes.

Koo et al. (2014) optimisent le distributeur d'un échangeur sur circuit imprimé, grâce à un algorithme génétique mono-objectif. Les objectifs à minimiser sont l'écart type de la distribution Υ et la perte de charge, rassemblés en une seule fonction par agrégation. Un plan d'expériences par LHS, basé sur 26 simulations CFD, est utilisé pour construire un métamodèle de krigeage et un réseau de neurones. Les résultats montrent une prédiction plus précise par krigeage.

Shi et al. (2017) optimisent la boîte d'échangeur d'un échangeur à plaques. Les objectifs sont les mêmes que précédemment et sont également agrégés. Ils utilisent un algorithme

Auteurs	Type	Performances		Optimisation	
		Méthode	Objectifs	Moteur	Commentaires
Gholap et al. (2007)	Plaques	Éléments finis	- Coût - Conso.	NSGA-II	Régression polynomiale et plan de Box-Beckhen
Xie et al. (2008)	PFHX	ε -NUT	- Coût - Volume - ΔP_{ech}	GA	
Costa et al. (2008)	STHX	Le moteur est couplé avec la modélisation et inclus des tests de faisabilité			
Peng and Ling (2008) Peng et al. (2010)	PFHX	DTML	- Coût - Poids	GA +ANN PSO	ΔP_{ech} et ε sont considérés comme des contraintes. Les objectifs sont pondérés. Les équations thermiques sont des contraintes.
Liu and Cheng (2008)	PFHX	Méthode spécifique	- Poids - ΔP_{ech} - U	Prog. non linéaire	
Mishra et al. (2009)	PFHX	ε -NUT	- Entropie	GA	L'efficacité minimale est une contrainte.
Ponce et al. (2009)	STHX	DTML	- Coût	GA	-
Guo et al. (2009) Guo et al. (2010)	STHX	ε -NUT	- Entropie	NSGA-II	-
Sayane et al. (2010a) Sayane et al. (2010b)	STHX PFHX	ε -NUT	- ε - Coût	NSGA-II	
Ahmadi et al. (2011)	PFHX	ε -NUT	- Entropie - Coût - Exergie - ε	NSGA-II	Les objectifs sont traités 2 par 2
Rao and Patel (2010)	PFHX	ε -NUT	- Entropie	PSO	
Najafi et al. (2010)	Plaque	Maximisation de US via un GA et sur la base de corrélations.			
Najafi et al. (2011)	PFHX	ε -NUT	- Puissance - Coût	GA	
Hadidi et al. (2013)	STHX	DTML	- Coût	ICA	Comparaison entre son algorithme impérialiste et un GA.
Liu et al. (2016)	Générateur thermoélec.	CFD	- Temp. moyenne - Gradient temp. - ΔP_{ech}	AMGA	Utilise une surface de réponse polynomiale d'ordre 3 basée sur un tableau orthogonal.
Wen et al. (2016)	PFHX	ε -NUT	- Puissance - Entropie - Coût	NSGA-II	Utilise un métamodèle de Krigeage et un enrichissement basé sur le front de Pareto.
Raja et al. (2017)	PFHX	ε -NUT	- ε - Coût - Poids - Entropie	MOHTS	Algorithme spécifiquement développé pour l'optimisation des échangeurs de chaleur.
Maghsoudi et al. (2018)	PFHX	ε -NUT	- Coût - ε	NSGA-II	

PFHX (échangeur à plaques et ailettes), STHX (échangeur tubes et calandre), GA (algorithme génétique), ANN (réseau de neurones), PSO (essai particulaire).

Tableau 2.2 – Tableau de synthèse des méthodes d'optimisation utilisées à l'échelle globale.

Auteurs	Forme/ Type	Objectifs	Optimisation			Commentaires
			Moteur	Métamodèle	DOE	
Kim and Kim (2002)	Ribs	- Nu - C_f	Gradient	-	-	Agrégation des obj.
Park et al. (2004)	Heat sink	- Temp. - ΔP	SLP	-	-	Agrégation Variation des poids de l'agrégation
Kim and Choi (2005)	Dimples	- Nu - C_f	Dérivation	RS	FFD 27 obs.	Agrégation
Hilbert et al. (2006)	Tubes	- Temp. - ΔP	GA	-	-	20 gen. de 30 pop. Simulations laminares
Foli et al. (2006)	μ HX	- Φ - ΔP	NSGA-II	-	-	Formes définies par NURBS
Park et al. (2006)	Heat sink	- Temp. - ΔP	Recuit Simulé	Krigeage	LHS 30 obs.	Mono-objectif, la température est une contrainte
Kim and Shin (2008)	Dimples	- Nu - C_f	SQP	Krigeage	LHS 20 obs.	Agrégation
Zhou et al. (2009)	Heat sink	- Entropie	GA	-	-	-
Husain and Kim (2010)	Heat sink	- Temp. - ΔP	NSGA-II + SQP	Krigeage/ RS/ ANN	FFD	Comparaison
Kim et al. (2011)	Dimples	- Nu - C_f	NSGA-II + SQP	Krigeage	LHS	Clustering par Kmeans du front de pareto
Han et al. (2011)	Corrugations	- Nu - ΔP	MOGA	Krigeage	MED 200 obs.	
Lee et al. (2012)	Wavy	- Nu - ΔP	MOGA	Krigeage	MES 250 obs.	Enrichissement basé sur le front de Pareto
Lee and Kim (2012)	Zigzag	- Φ - ΔP	NSGA-II + SQP	RS	LHS 22 obs.	Clustering par Kmeans du front de pareto
Saleh et al. (2013b)	Corrugations	- Nu - ΔP	MOGA	Krigeage	MED 200 obs.	Enrichissement basé sur le front de Pareto et RMSE
Lee and Kim (2015)	Zigzag	- Φ - ΔP	NSGA-II + SQP	RS	LHS 10 obs.	- Simulations 3D - Clustering Kmeans
Kulkarni et al. (2015)	Ribs	- Nu - C_f	MOGA	Krigeage/ RS	LHS 30 obs.	- Clustering Kmeans - RS donne de meilleurs resultats
Cavazzuti et al. (2015)	Fins tubes	- U	Simplex	-	540 obs.	Méthode peu claire
Seo et al. (2016)	Ribs	- Nu - C_f	MOGA	Krigeage/ RS	LHS 40 obs.	- Clustering Kmeans - RS donne de meilleurs resultats
Wen et al. (2016)	OSF	- Nu - C_f	NSGA-II	Krigeage	CCD 45 obs.	Laminaire
Wen et al. (2017)	Chicanes	- U - ΔP	MOGA	RS	CCD	Simulations 3D
Wansaseub et al. (2017)	Ribs	- U - ΔP	Optimisation mono-objectif (agrégation) qui compare de nombreux moteurs et de nombreux métamodèles.			
Liu et al. (2017a)	OSF	- Nu - C_f	NSGA-II	Krigeage	LHS	Enrichissement basé sur le front de Pareto et RMSE
Wen et al. (2018)	OSF	- Nu/C_f - Contraintes méca.	MOGA	RS	CCD	

DOE (plan d'expériences), RS (Surface de réponse), FFD (*Full Factorial Design*), GA (algorithme génétique), LHS (*Latin Hypercube Sampling*), SQP (*Sequential Quadratic Programming*), ANN (Réseau de neurones), MED (*Minimum Entropie Design*), MOGA (*Multi-Objective GA*), CCD (*Central Composite Design*).

Tableau 2.3 – Tableau de synthèse des méthodes d'optimisation utilisées à l'échelle locale ou du canal.

génétique mono-objectif associé à un réseau de neurones, basé sur un plan d'expériences par LHS à 30 observations.

Aucune des études précédentes ne considère conjointement l'impact du distributeur sur les pertes de charge et sur l'efficacité de l'échangeur.

2.3.5 Optimisation multiéchelle

De nombreuses études mettant en œuvre des optimisations aux différentes échelles sont publiées dans la littérature. Cependant, il existe très peu d'exemples d'optimisations multiéchelles, pour lesquels l'impact des variations de la forme d'un intensificateur sur les performances globales est évalué.

Hajabdollahi et al. (2011) proposent un couplage entre la simulation CFD d'une ailette droite triangulaire avec une méthode ε -NUT, qui donne les performances d'un échangeur à plaques et ailettes. Ils utilisent pour cela un réseau de neurones, reposant sur les simulations, comme corrélations pour le nombre de Colburn²⁷ et le coefficient de frottement d'un motif périodique de l'ailette. L'optimisation vise à maximiser l'efficacité tout en minimisant ΔP_{ech} , par la variation de la section triangulaire de l'ailette. La comparaison entre les corrélations ainsi obtenues et des données expérimentales montre le bon comportement du réseau de neurones.

Yin and Ooka (2015) proposent sur le même principe l'optimisation de la forme d'une ailette droite dans un échangeur à plaques et ailettes. Les objectifs visés sont la minimisation des productions d'entropie dues aux effets thermiques et de pression statique. Les corrélations pour le nombre de Colburn et le coefficient de perte de charge utilisent 45 simulations CFD et une surface de réponse polynomiale. La méthode d'optimisation est bien décrites, mais aucune conclusion n'est apportée concernant sa robustesse.

2.4 Conclusions

L'état de l'art sur les technologies, la modélisation et l'optimisation des échangeurs, présenté dans ce chapitre, permet de mettre en évidence différents points.

Tout d'abord, un échangeur est intrinsèquement **multiéchelle**, que ce soit du point de vue des technologies mais également des phénomènes physiques rencontrés. Il paraît donc opportun de se doter d'outils de modélisation permettant de prendre en compte ce comportement, afin de prédire au mieux les performances des échangeurs. De plus, il paraît clair que la forme des intensificateurs joue un rôle prépondérant sur les performances.

La modélisation des échangeurs à l'échelle globale passe usuellement par des méthodes soumises à de nombreuses hypothèses. Elles requièrent également l'utilisation de corrélations, au niveau des intensificateurs, généralement issues de l'expérience. De ce fait, il devient complexe de proposer des formes innovantes. La mécanique des fluides numérique (CFD) permet de se substituer à l'expérience et ainsi de créer des corrélations pour des formes nouvelles. Dans la littérature, ces corrélations numériques sont régulièrement utilisées avec des méthodes globales. Afin de s'affranchir de certaines hypothèses, des modèles CFD poreux sont proposés, utilisant également des corrélations. Il est donc concevable de **coupler une approche CFD locale avec une approche CFD poreuse** (globale), afin d'évaluer l'impact du distributeur sur la thermohydraulique de l'échangeur.

27. alternative au nombre de Nusselt (Bergman et al., 2011, pp. 417).

Un autre point important concerne l'optimisation des échangeurs. Des études concernant des méthodes globales ou locales existent. Cependant, très peu d'études proposent un couplage efficace pour lequel une **modification locale de la forme impacterait les performances globales de l'échangeur**. De même, aucune optimisation conjointe de formes locales (intensificateur) et globales (distributeur) n'est présentée actuellement.

De la même façon, la littérature ne fait état que de peu d'études d'optimisation **prenant en compte un aspect multiphysique** autre que le couplage thermohydraulique, comme l'**encrassement** par exemple.

L'aperçu des méthodes d'optimisation utilisées pour les échangeurs, montre que les **algorithmes génétiques**, et particulièrement le NSGA-II de Deb et al. (2002), sont la référence en terme de moteur d'optimisation. Lorsque la CFD, coûteuse, est utilisée, le recours à un métamodèle est quasi-systématique. Le **métamodèle de krigeage** semble bien introduit dans la communauté, mais la richesse de cette méthode, de base probabiliste, n'est que très peu exploitée (par exemple la notion de variance de krigeage n'est pas utilisée).

Bien que régulièrement utilisées dans l'aéronautique (Forrester and Keane, 2009), les **méthodes d'enrichissement** dynamique (*infill criteria*) des métamodèles restent très peu utilisées dans la communauté de la thermique. L'avantage en terme de réduction de coût et d'amélioration de la précision des métamodèles que ces méthodes induisent, serait profitable pour l'optimisation des échangeurs.

Enfin, concernant l'analyse des résultats de l'optimisation, généralement, les études se concentrent sur le front de Pareto, mais pas sur la distribution des paramètres l'ayant généré. L'équipe de recherche de Kim et al. (2011), utilise une méthode de classification pour extraire un nombre fini de formes et les analyser. D'autres communautés proposent différentes méthodes de **support à l'analyse** pouvant être appliquées au domaine des échangeurs.

CHAPITRE 3

Outils numériques pour l'optimisation

Ce chapitre présente les concepts associés à la formulation mathématique d'un problème d'optimisation multiobjectif. Les notions de moteur d'optimisation et de carburant pour l'optimisation utilisées pour résoudre ce problème sont introduites. Le choix de l'algorithme génétique (moteur) et de la métamodélisation par krigeage (carburant) est motivé. Les fondamentaux théoriques des deux méthodes sont ensuite présentés.

Sommaire

3.1	Cadre général de l'optimisation multiobjectif	44
3.1.1	Notion de dominance	47
3.1.2	Optimalité au sens de Pareto	48
3.1.3	Résolution d'un problème d'optimisation multiobjectif	50
3.2	Moteur d'optimisation : Algorithmes génétiques	53
3.2.1	Principe de fonctionnement	53
3.2.2	Algorithme NSGA-II	54
3.3	Carburant pour l'optimisation : Métamodèles	56
3.3.1	Pourquoi la métamodélisation ?	56
3.3.2	Quelles méthodes ?	58
3.3.3	Krigeage, formulation	61
3.3.4	Validation des métamodèles	66
3.3.5	Critères d'enrichissement	68
3.4	Analyse des résultats	74
3.4.1	Analyse de la convergence de la solution de l'AG	74
3.4.2	Classification et visualisation des résultats	76
3.5	Synthèse des outils	81

La formulation mathématique de l'optimisation passe par la définitions de paramètres dont vont dépendre des fonctions objectif, et sur lesquels pourront être appliquées des contraintes.

En fonction de la nature des paramètres et des fonctions objectif, il est possible de classer les problèmes d'optimisation selon différents axes. La Figure 3.1 présente la classification proposée par Collette and Siarry (2013). Cette classification a été initialement élaborée pour l'optimisation mono-objectif, mais elle reste pertinente dans le cadre multi-objectif. Elle n'a toutefois pas la prétention d'être exhaustive, le domaine de l'optimisation étant vaste et complexe (Deb, 2001).

La première distinction porte sur les paramètres. S'ils peuvent prendre un nombre fini de valeurs, le problème sera combinatoire ou discret (comme le cas bien connu du voyageur de commerce). Ces problèmes possèdent un nombre fini de solutions. Pour des problèmes simples, la solution est souvent exacte. Lorsqu'ils sont plus complexes, la solution sera approchée via des méthodes heuristiques. Au contraire, si les valeurs possibles des paramètres sont définies continûment dans une plage de variation, le problème d'optimisation est qualifié de continu.

Dans le cadre de l'optimisation continue, une deuxième distinction peut être faite selon la nature des objectifs. Lorsque ceux-ci sont des fonctions linéaires des paramètres, l'optimisation est dite linéaire (également désignée sous le nom de programmation linéaire). La convergence de ces problèmes est assurée par un certain nombre de propriétés mathématiques (Deb, 2001). En ingénierie, l'optimisation linéaire est typiquement utilisée pour des problèmes de production et de contrôle de l'énergie (centrale électrique, *smart grid*). Lorsque les objectifs ne sont pas des fonctions linéaires, on parle d'optimisation non linéaire¹. Lorsque les fonctions objectif sont non linéaires, il peut exister plusieurs optima. On différencie alors l'optimisation locale, pour laquelle on va rechercher l'optimum dans le voisinage d'un point précis, de l'optimisation globale, pour laquelle on recherche l'optimum global. Enfin, les fonctions différentiables et non différentiables sont également distinguées.

Cette arborescence permet de qualifier les problèmes d'optimisation et, pour chaque problème, des méthodes ont été développées pour les résoudre. Elles peuvent s'appuyer sur un cadre mathématique plus ou moins formel, différenciant les méthodes dites classiques des méthodes méta-heuristiques. Dans les présents travaux, nous les appellerons des **moteurs d'optimisation**.

Comme vu précédemment, l'optimisation de forme des échangeurs de chaleur est un problème intrinsèquement multiobjectif. Dans le cadre de la classification précédente, on peut également dire que c'est un problème continu, non linéaire, différentiable et global.

3.1 Cadre général de l'optimisation multiobjectif

Cette section introduit les concepts mathématiques permettant l'optimisation des échangeurs de chaleur. Comme présenté précédemment, la modélisation d'un problème d'optimisation fait intervenir des paramètres, des fonctions objectif et des contraintes. La résolution du problème conduit à l'obtention de la valeur des paramètres qui va minimiser les fonctions objectif, que l'on nommera **solution**.

1. Au sein de l'optimisation non linéaire, l'optimisation de fonctions quadratiques a retenu l'attention des mathématiciens, car celles-ci possèdent des propriétés intéressantes pour la convergence (Culioli, 2012).

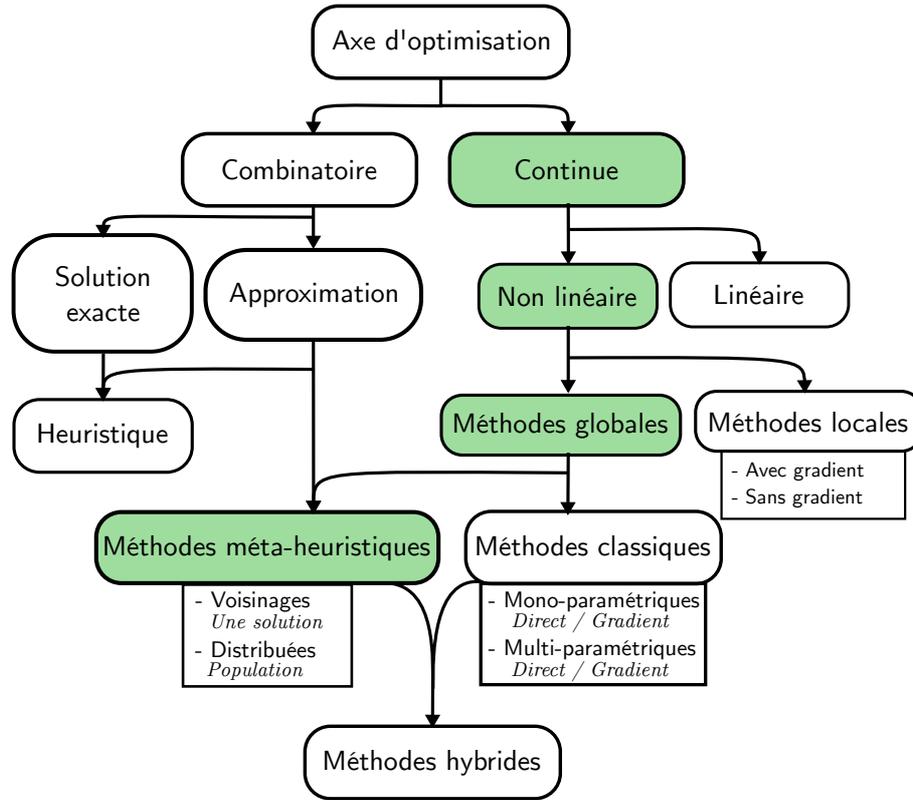


Figure 3.1 – Classification des grands domaines de l'optimisation (extraite du livre de Collette and Siarry (2013)). Le cadre de l'optimisation des échangeurs des présents travaux est défini en vert.

Dans les présents travaux, le problème est formulé comme un problème de minimisation. Dans les cas pratiques d'ingénierie, pour lesquels on cherche à maximiser certains objectifs, le principe de dualité (Deb, 2001, pp. 14) permet de se ramener à un problème de minimisation en multipliant la valeur de l'objectif considéré par -1 .

Ainsi, dans le cas général, le problème d'optimisation multiobjectif (*multi-objective optimization problem* - MOP) cherche à minimiser chacune des composantes du vecteur des fonctions objectif sachant certaines contraintes. Il s'écrit formellement comme (Deb, 2001, pp. 13) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{N_d}} \quad \mathbf{y}(\mathbf{p}) \\ \text{sachant} \quad \left| \begin{array}{l} \mathbf{g}(\mathbf{p}) \leq 0 \\ \mathbf{n}(\mathbf{p}) = 0 \\ \mathbf{p}^{(L)} \leq \mathbf{p} \leq \mathbf{p}^{(U)} \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (3.1)$$

avec

— le **vecteur des fonctions objectif**, de taille N_{obj}

$$\mathbf{y}(\mathbf{p}) = [y_i(\mathbf{p})]_{1 \leq i \leq N_{obj}} \in \mathbb{R}^{N_{obj}} \quad (3.2)$$

pour lequel la i -ème composante est une fonction objectif à minimiser telle que :

$$y_i : \mathbf{p} \in \mathbb{R}^{N_d} \rightarrow y_i(\mathbf{p}) \in \mathbb{R} \quad (3.3)$$

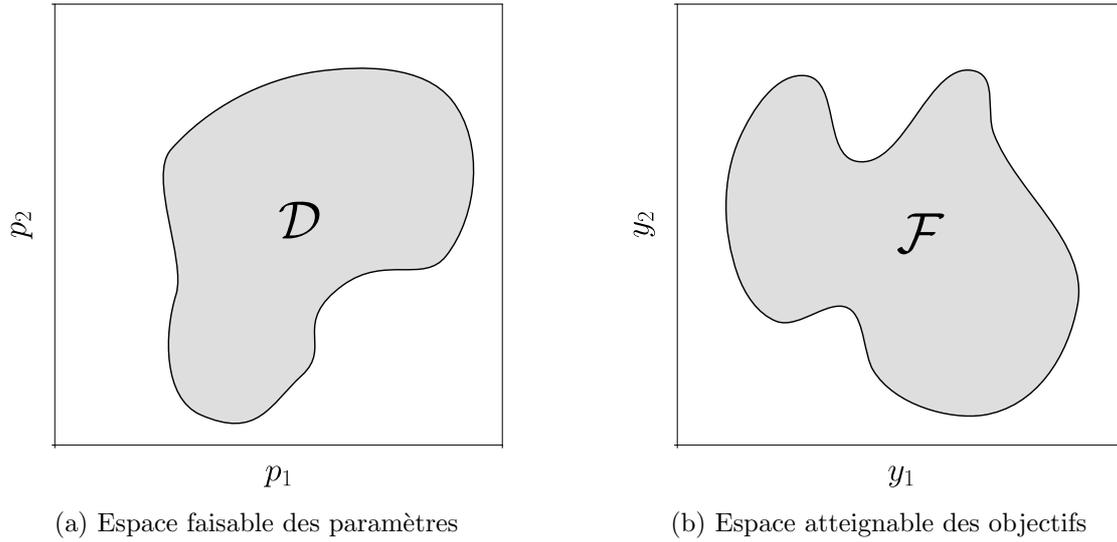


Figure 3.2 – .

Représentation de l'espace faisable des paramètres (a) et de l'espace atteignable des objectifs (b) pour un cas à deux paramètres (p_1, p_2) et deux objectifs (y_1, y_2) .

— le **vecteur de paramètres**, de taille N_d ,

$$\mathbf{p} = [p_i]_{1 \leq i \leq N_d} \in \mathbb{R}^{N_d} \quad (3.4)$$

et borné par $\mathbf{p}^{(L)}$ et $\mathbf{p}^{(U)}$.

— les vecteurs \mathbf{g} des N_g contraintes d'inégalités et \mathbf{n} des N_n contraintes d'égalités, dont les composantes sont des fonctions telles que :

$$\forall j \in [1, N_g], \quad g_j : \mathbf{p} \in \mathbb{R}^{N_d} \rightarrow g_j(\mathbf{p}) \in \mathbb{R} \quad (3.5)$$

$$\forall k \in [1, N_n], \quad n_k : \mathbf{p} \in \mathbb{R}^{N_d} \rightarrow n_k(\mathbf{p}) \in \mathbb{R} \quad (3.6)$$

Les contraintes et les intervalles de variation de chaque paramètre définissent l'**espace faisable des paramètres** (*feasible design space*) tel que (Marler and Arora, 2004) :

$$\mathcal{D} = \{ \mathbf{p} \mid \mathbf{g}(\mathbf{p}) \leq 0; \mathbf{n}(\mathbf{p}) = 0; \mathbf{p}^{(L)} \leq \mathbf{p} \leq \mathbf{p}^{(U)} \} \quad (3.7)$$

L'**espace atteignable des objectifs** (*feasible objective space*), composé des images des vecteurs de \mathcal{D} , est défini comme :

$$\mathcal{F} = \{ \mathbf{y}(\mathbf{p}) \mid \mathbf{p} \in \mathcal{D} \} \quad (3.8)$$

Ainsi, un problème d'optimisation est défini dans deux espaces. La Figure 3.2 en donne une illustration pour un cas à deux paramètres et deux objectifs. Par abus de langage, dans la suite de ces travaux, \mathcal{D} est nommé l'espace des paramètres et \mathcal{F} , l'espace des objectifs. Le problème d'optimisation multiobjectif s'écrit plus simplement comme :

$$\min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \mathbf{y}(\mathbf{p}) \quad (3.9)$$

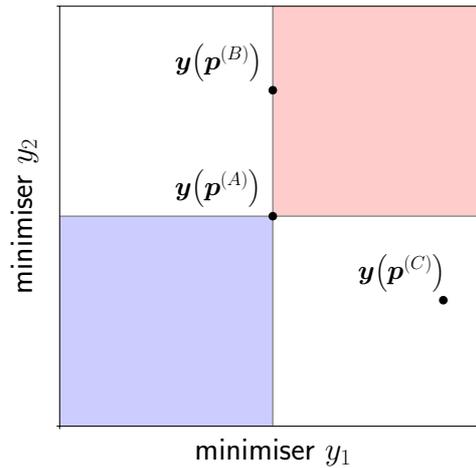


Figure 3.3 – Illustration du concept de dominance. Le vecteur $\mathbf{p}^{(A)}$ domine la zone rouge et est dominé par la zone bleue. Les zones blanches sont non-dominées par $\mathbf{p}^{(A)}$.

3.1.1 Notion de dominance

La solution d'un MOP est rarement unique. Ainsi les solutions sont multiples et forment l'ensemble des **meilleurs compromis** possibles entre les différents objectifs du vecteur $\mathbf{y}(\mathbf{p})$. L'expertise de l'ingénieur sera au final requise afin de sélectionner une (ou quelques) solution(s) parmi ces compromis.

Il faut donc pouvoir être à même de comparer efficacement deux solutions $\mathbf{p}^{(1)}$ et $\mathbf{p}^{(2)}$ du problème défini Eqn. (3.9). On introduit la notion de dominance comme :

Définition 3.1 (Dominance). Soient deux vecteurs de paramètres $\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)} \in \mathcal{D}$. On dit que $\mathbf{p}^{(1)}$ domine $\mathbf{p}^{(2)}$, si et seulement si :

— pour tous les objectifs, l'image de $\mathbf{p}^{(1)}$ n'est pas pire que l'image de $\mathbf{p}^{(2)}$

$$\forall i \in [1, N_{obj}], \quad y_i(\mathbf{p}^{(1)}) \leq y_i(\mathbf{p}^{(2)})$$

— pour au moins un des objectifs, l'image de $\mathbf{p}^{(1)}$ est meilleure que l'image de $\mathbf{p}^{(2)}$

$$\exists i \in [1, N_{obj}], \quad y_i(\mathbf{p}^{(1)}) < y_i(\mathbf{p}^{(2)})$$

Cette relation est notée $\mathbf{p}^{(1)} \preceq \mathbf{p}^{(2)}$.

La relation de dominance possède des propriétés permettant de classer des solutions. Elle est non réflexive, ainsi un vecteur ne peut pas se dominer lui-même. Elle est également asymétrique, car $a \preceq b$ implique que b ne peut pas dominer a . Elle est enfin transitive car si $a \preceq b$ et $b \preceq c$ alors $a \preceq c$. Ainsi, le vecteur des paramètres $\mathbf{p}^{(A)}$ de la Figure 3.3 domine ceux de la zone rouge ($\mathbf{p}^{(B)}$ par exemple) et il est dominé par ceux de la zone bleue.

Certains vecteurs de paramètres ne peuvent pas être comparés par cette relation. C'est le cas du vecteur $\mathbf{p}^{(C)}$ sur la Figure 3.3. Sa performance est meilleure que $\mathbf{y}(\mathbf{p}^{(A)})$ pour l'objectif y_2 mais moins bonne pour y_1 . On dit alors que $\mathbf{p}^{(A)}$ et $\mathbf{p}^{(C)}$ sont **non-dominés** (noté $\mathbf{p}^{(A)} \not\preceq \mathbf{p}^{(C)}$) l'un par rapport à l'autre et sont considérés équivalents du point de vue de la solution du problème multiobjectif. Les zones non-dominées apparaissent en blanc sur la Figure 3.3.

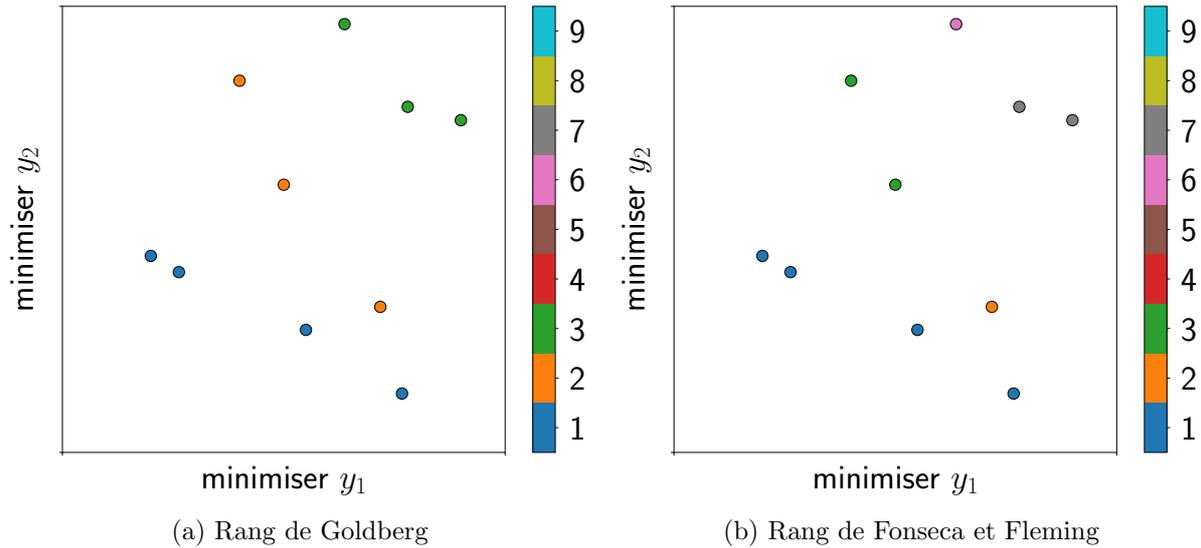


Figure 3.4 – Représentation du rang de Goldberg (a) et de de Fonseca et Fleming (b) pour un problème à deux objectifs.

3.1.2 Optimalité au sens de Pareto

Les différentes relations de dominance permettent de classer les vecteurs de paramètres les uns par rapport aux autres en considérant leur efficacité vis à vis des objectifs. En comparant un ensemble de vecteurs de paramètres deux à deux, on peut les classer par ordre de dominance et regrouper les vecteurs non-dominés. Ils forment alors un **ensemble non-dominé** (Deb, 2001) défini formellement comme :

Définition 3.2 (Ensemble non-dominé). Un ensemble non-dominé est constitué de vecteurs de paramètres $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ qui sont non-dominés les uns par rapport aux autres.

L'image de cet ensemble dans l'espace des objectifs est appelé un **front**. La notion de rang d'un front peut alors être introduite. Il indique la position d'un vecteur de paramètres (et de son image) dans un ensemble. Les deux définitions du rang les plus utilisées dans la littérature sont (Jacquenot, 2010) :

- le rang de Goldberg, qui définit le rang de \mathbf{p} comme le nombre de fronts qui le dominant plus un,
- le rang de Fonseca et Fleming, qui donne le rang de \mathbf{p} comme le nombre de vecteurs de paramètres qu'il domine plus un.

La Figure 3.4 illustre la différence entre les deux définitions. Le nombre de rangs de Fonseca est plus élevé (7) que celui de Goldberg (3) et est discontinu : il passe de 3 à 6 directement. La notion de rang est très utilisée par les algorithmes évolutionnaires pour la résolution des problèmes multiobjectifs.

Il est ainsi possible de définir l'optimalité grâce à la dominance, appelée également optimalité au sens de Pareto :

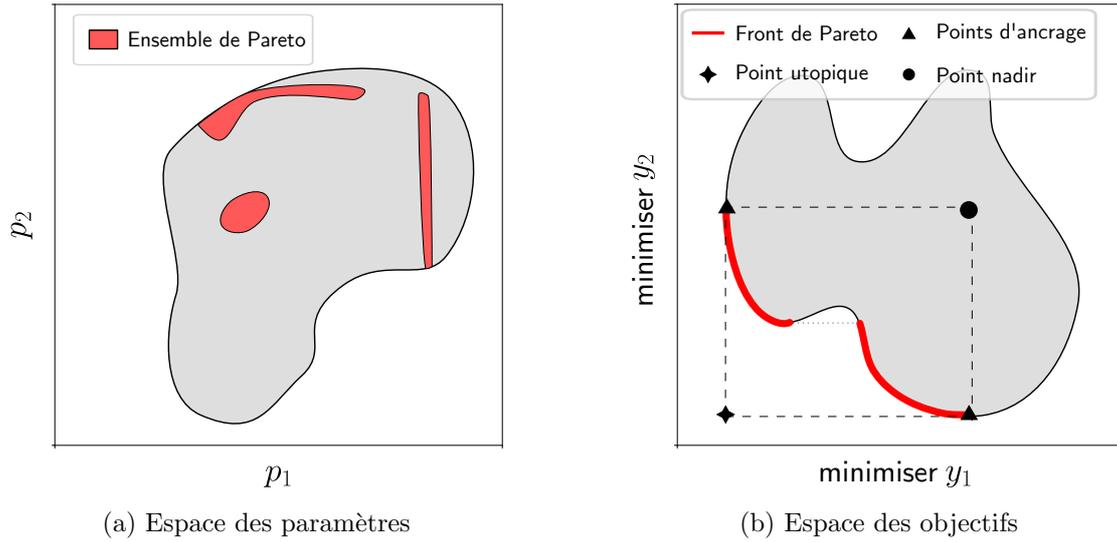


Figure 3.5 – Illustration de l'ensemble de Pareto $\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ (a) et du front de Pareto $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}$ (b) pour un problème à deux objectifs et deux paramètres. Les différentes solutions remarquables sont représentées dans l'espace des objectifs par les symboles (\blacktriangle , \bullet , \blackstar).

Définition 3.3 (Optimum au sens de Pareto). Un vecteur de paramètres $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ est dit optimal au sens de Pareto s'il n'est dominé par aucun autre vecteur de l'espace des paramètres.

On peut définir l'ensemble optimal de Pareto (*Pareto optimal set*), comme étant composé uniquement de vecteurs de paramètres non-dominés les uns par rapport aux autres, et qui dominent tous les autres vecteurs de \mathcal{D} . Il est nommé plus simplement l'**ensemble de Pareto**, et se définit comme :

$$\mathcal{P}_{\mathcal{D}} = \{\mathbf{p} \in \mathcal{D} \mid \nexists \mathbf{p}' \in \mathcal{D} \mid \mathbf{p}' \preceq \mathbf{p}\} \quad (3.10)$$

L'image de cet ensemble dans l'espace des objectifs est appelée le **front de Pareto** :

$$\mathcal{P}_{\mathcal{F}} = \mathbf{y}(\mathcal{P}_{\mathcal{D}}) \quad (3.11)$$

Ces deux ensembles forment la solution du problème multiobjectif défini Eqn. (3.9) et sont illustrés par la Figure 3.5 pour un cas à deux paramètres et deux objectifs. Le front de Pareto est, dans ce cas, une ligne discontinue. Il est évident que $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}$ représente le meilleur compromis entre les objectifs. En effet, quelque soit le vecteur des objectifs pris sur ce front, l'amélioration des performances d'un objectif va nécessairement entraîner la dégradation d'un autre. Ce front délimite également l'espace faisable non optimal et l'espace infaisable. On notera que la proximité de deux solutions dans l'espace des objectifs ne signifie pas nécessairement que leurs antécédents sont proches dans \mathcal{D} . \mathcal{D} est souvent un sous-ensemble disjoint de \mathcal{D} . Enfin, les vecteurs constituant le set de Pareto ont un rang égal à un quelque soit la définition utilisée. Certaines solutions remarquables du problème d'optimisation multiobjectif sont parfois utilisées pour le résoudre. Le **point utopique** est un vecteur dans l'espace des objectifs tel que ses composantes minimisent chacune des fonctions objectif. C'est un point de l'espace des objectifs inatteignable, sauf cas très particuliers. Le **point nadir** est un vecteur qui définit la borne supérieure du front de Pareto. Les points extrêmes du front de Pareto s'appellent les **points d'ancrage**. Tous sont illustrés sur la figure Figure 3.5.

3.1.3 Résolution d'un problème d'optimisation multiobjectif

Afin de résoudre des problèmes d'optimisation multiobjectifs, la littérature fait état de nombreux outils et méthodes, tels que les méthodes d'agrégation, les algorithmes stochastiques, les méthodes de descente ou l'utilisation de métamodèles. Cependant, les termes et les concepts employés peuvent varier selon les auteurs et englober une ou plusieurs méthodes. De plus, chaque méthode, bien que participant à la résolution du problème, peut avoir un rôle précis qui n'est pas directement celui de trouver le minimum d'une ou plusieurs fonctions.

Certains auteurs (Deb, 2001; Marler and Arora, 2004; De Weck, 2004; Duchaine, 2007) proposent une classification des méthodes selon trois axes qui dépendent du moment où le choix de la solution parmi les compromis est fait :

- articulations des préférences *a priori*, lorsque le choix est fait avant l'optimisation au moyen d'une somme pondérée des différents objectifs,
- pas d'articulation préférentielle, lorsque avant l'optimisation on agrège les objectifs ensemble mais sans pondération, ainsi aucun objectif n'est privilégié,
- articulation *a posteriori*, lorsque le choix est fait après l'optimisation en analysant le front de Pareto.

Ils différencient ensuite les méthodes **Pareto**, qui déterminent directement le front de Pareto dans sa globalité, et les méthodes **non-Pareto**, qui traitent le problème multiobjectif comme un ou plusieurs problèmes mono-objectifs.

Cependant, cette classification n'est pas suffisamment explicite car elle traite indifféremment les méthodes permettant de conditionner le problème multiobjectif en un problème mono-objectif, et les méthodes d'optimisation à proprement parler, qui recherchent le minimum d'une fonction.

Les présents travaux proposent une nouvelle classification des méthodes utilisées dans le cadre de l'optimisation multiobjectif au moyen de trois groupes d'outils :

- les **moteurs d'optimisation**, qui sont les outils recherchant le minimum de la (ou des) fonction(s) objectif en utilisant les valeurs de cette fonction et de ses dérivées (si nécessaire) par rapport aux paramètres.
- les **conditionneurs**, qui sont des outils permettant de transformer le vecteur des objectifs initial en un vecteur mieux adapté au moteur utilisé. C'est un outil optionnel, dont le choix est influencé par le moteur d'optimisation.
- les **carburants pour l'optimisation**, qui vont fournir aux moteurs les valeurs des fonctions nécessaires à la minimisation.

La Figure 3.6 illustre comment les trois groupes s'articulent et échangent les informations nécessaires à la résolution du problème. Ces trois groupes sont présentés plus en détail ci-après.

3.1.3.1 Moteurs d'optimisation

Le moteur est la composante principale de la méthode d'optimisation. Il est fortement lié à l'axe d'optimisation dans lequel le problème se situe (voir Figure 3.1) et peut être contraint par le carburant utilisé. Une liste non exhaustive des principaux moteurs permettant de résoudre des problèmes d'optimisation continus non linéaires est présentée dans l'Annexe D.1. Deux groupes sont à distinguer : les méthodes **classiques** par essence

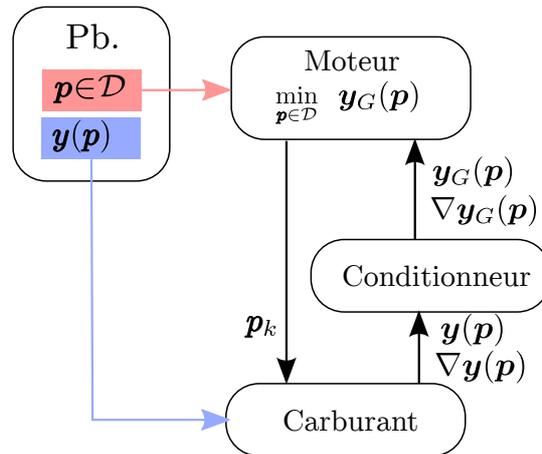


Figure 3.6 – Schéma de la communication entre le conditionneur, le moteur d'optimisation et le carburant pour l'optimisation. La minimisation est assurée par le moteur, alimenté par les évaluations du carburant, possiblement adaptées par le conditionneur.

mono-objectif, reposant sur les propriétés mathématiques des fonctions ; et les méthodes **méta-heuristiques**, moins formelles mathématiquement et souvent issues d'analogies avec la biologie, la physique ou l'éthologie, et qui permettent de traiter des problèmes mono-objectifs et également multiobjectifs directement (c'est à dire trouver le front et le set de Pareto). On peut également considérer un troisième groupe **hybride** qui est constitué de méthodes tirant profit des divers avantages des deux autres groupes.

Le choix du moteur est une étape importante pour la résolution du problème d'optimisation. Il dépend de la fonction objectif et va conditionner le choix du carburant pour l'optimisation.

Beaucoup de moteurs connus de la littérature ne traitent que des cas mono-objectifs. C'est pour cela que durant les débuts des problèmes d'optimisation multiobjectifs, beaucoup de travaux ont cherché à les conditionner en problème à une seule fonction.

Dans le cadre des présents travaux, un **algorithme génétique** (méthode méta-heuristique distribuée générant le front de Pareto) est utilisé pour les différentes optimisations car présentant plusieurs avantages. Il est aisé d'ajouter de nouveaux paramètres, elle ne nécessite pas l'emploi des dérivées des fonctions objectif, elle génère un front de Pareto et le traitement en population permet une parallélisation des étapes. Le fondement théorique de cette méthode est présenté plus en détails dans la Section 3.2.

3.1.3.2 Conditionneurs

Afin de pouvoir utiliser les moteurs d'optimisation connus de la littérature, des conditionneurs ont été développés pour transformer les vecteurs des objectifs de manière à ce qu'ils soient mieux adaptés (Koski and Silvennoinen, 1987). Différentes méthodes ont été proposées (Marler and Arora, 2004) et l'Annexe D.2 en présente une liste non-exhaustive. On pourra citer les méthodes d'agrégation, visant à obtenir une unique fonction objectif à partir d'un vecteur, en réalisant une somme pondérée. La difficulté de cette méthode réside dans le choix des poids, qui influence grandement le résultat optimal. Le choix du conditionneur va dépendre du type de moteur choisi, du problème (convexe ou non) et du type de solution nécessaire (un seul optimum ou l'ensemble du front).

Un cas très particulier de conditionneur est l'opérateur identité, n'entraînant aucune modification du vecteur des objectifs. Dans les présents travaux, c'est celui qui est utilisé.

Il permet, entre autres, d'ajouter de nouveaux objectifs au processus d'optimisation sans avoir besoin de recalibrer les éventuels poids d'une agrégation.

3.1.3.3 Carburants pour l'optimisation

Les carburants pour l'optimisation ne font pas, à proprement parler, partie des méthodes d'optimisation. Ils servent seulement à alimenter le moteur avec les évaluations des fonctions objectif et de leurs dérivées le cas échéant.

La nature du carburant est une donnée d'entrée du problème d'optimisation qui peut conditionner le choix du moteur. S'il n'est pas capable de fournir les dérivées des fonctions objectif en fonction des paramètres, alors l'utilisation d'une méthode de gradient en tant que moteur ne sera pas possible directement.

Il existe plusieurs types de carburant, dits :

- directs, lorsque l'expression analytique des fonctions est connue. C'est le cas de nombreux problèmes d'optimisation théoriques servant de base de tests aux moteurs d'optimisation (Huband et al., 2006).
- bruts, lorsque l'on ne connaît pas l'expression des fonctions et que l'on dispose uniquement de la réponse d'un système (numérique ou expérimental) pour un jeu de paramètres. Les solveurs de mécanique des fluides numérique ou de mécanique des structures sont des exemples typiques des carburants bruts.
- raffinés, lorsque, à partir du carburant brut, un traitement mathématique (et/ou physique) permet de définir une expression des objectifs en fonction des paramètres. Les métamodèles sont un exemple de carburants raffinés.

Pour les carburants directs, les dérivées sont usuellement connues. Dans le cas des carburants bruts, le calcul est souvent plus complexe mais peut se faire par différences finies. Dans le cadre de la mécanique des fluides numérique, on peut citer les méthodes adjointes, qui calculent les dérivées des objectifs en fonction des paramètres lors de la résolution numérique. Cela permet d'utiliser avantageusement un moteur d'optimisation reposant sur les gradients. L'inconvénient majeur est dans le choix de l'objectif. Si celui-ci change en cours d'optimisation², alors les simulations réalisées jusque là sont à refaire. Or ces simulations sont usuellement coûteuses numériquement (plusieurs dizaines d'heures). Au contraire, si les objectifs sont bien connus comme dans l'aéronautique externe avec les coefficients de portance et de traînée, cette méthode est avantageuse.

L'usage des carburants raffinés est souvent motivé par une diminution du coût par rapport à celui d'un carburant brut. C'est le cas des métamodèles, qui construisent une approximation continue et moins coûteuse à exploiter, à partir d'un nombre fini de simulations numériques. Une autre raison peut être d'extraire plus d'informations du carburant brut. C'est le cas notamment de la paramétrisation d'ordre élevée (Soulat et al., 2013), qui va reconstruire à partir des simulations, les dérivées des champs physiques de la solution en fonction des paramètres. Les carburants raffinés permettent également de changer facilement les objectifs de l'optimisation à tout moment.

Dans le cadre de ces travaux, le carburant brut sera un **solveur de mécanique des fluides numérique** (que l'on appellera également simulateur) que l'on raffinera grâce à un **métamodèle de krigeage**.

2. car pas assez discriminant par exemple

3.1.3.4 De la véracité du solveur

Il faut veiller à garder en tête que le solveur de mécanique des fluides repose sur des modèles mathématiques et physiques qui sont une approximation de la réalité (modèle de turbulence ou schéma de convection par exemple). A ce titre, ces différents modèles sont définis pour certaines configurations et peuvent, dans certains cas, donner une prédiction erronée des phénomènes physiques. C'est pourquoi des étapes de validations expérimentales de ces modèles sont indispensables (Wintergerste et al., 2002). Cependant, il est impensable de réaliser de telles validations pour toutes les configurations rencontrées dans un processus d'optimisation. Dans ce cadre là, on suppose alors que le modèle est prédictif, ou *a minima* qu'il respecte les gradients du comportement des objectifs afin de positionner les optima physique et numérique dans la même région de l'espace des paramètres.

3.2 Moteur d'optimisation : Algorithmes génétiques

Les moteurs d'optimisation sont nombreux et variés et leur choix dépend essentiellement du type de problème que l'on veut résoudre. La recherche autour des méthodes évolutionnaires a été très riche dans les années 1970, alors que la communauté cherchait à développer un moteur d'optimisation polyvalent, permettant de résoudre une large gamme de problèmes (Duchaine, 2007). Parmi ces méthodes, les algorithmes génétiques (*Genetic Algorithm* - AG) ont suscité un grand intérêt. Cette section présente leur fonctionnement et se concentre plus particulièrement sur le NSGA-II (Deb et al., 2002). D'autres algorithmes sont présentés Annexe D.1.4.

3.2.1 Principe de fonctionnement

Les algorithmes génétiques reposent sur la théorie d'évolution des espèces proposée par Darwin au XIX-ième siècle. Celle-ci considère que chaque nouvelle génération d'une population est mieux adaptée à son environnement que la précédente. Pour cela, les mécanismes de sélection naturelle et de concurrence vitale ne vont conserver que les individus de la population présentant des gènes avantageux. Cette évolution est le résultat d'un processus de reproduction, au cours duquel les individus vont combiner leurs gènes, et d'un processus de mutation, au cours duquel un individu, stimulé par l'environnement, va spontanément développer des gènes mieux adaptés.

Holland (1975) a été le premier à appliquer cette théorie dans le cadre de l'apprentissage machine (*machine learning*). Ainsi les différentes étapes des algorithmes génétiques, schématisées sur la Figure 3.7, et le vocabulaire en sont directement issus.

Les algorithmes génétiques vont faire évoluer itérativement une **population d'individus** sur plusieurs **générations** afin de se rapprocher de la solution optimale. Les individus sont composés d'un **chromosome** (le vecteur de paramètres), regroupant les différents **gènes** (les paramètres), et d'un **phénotype** (le vecteur des objectifs associé).

Les individus d'une génération sont **évalués** afin de déterminer leur phénotype. C'est à cette étape qu'intervient le carburant pour l'optimisation. Les individus les plus adaptés sont **sélectionnés**. L'**adaptation** (*fitness*) est définie différemment en fonction des problèmes traités :

- dans le cas mono-objectif, il s'agit usuellement de la valeur de l'objectif et les individus les plus adaptés sont ceux qui minimisent cette valeur,

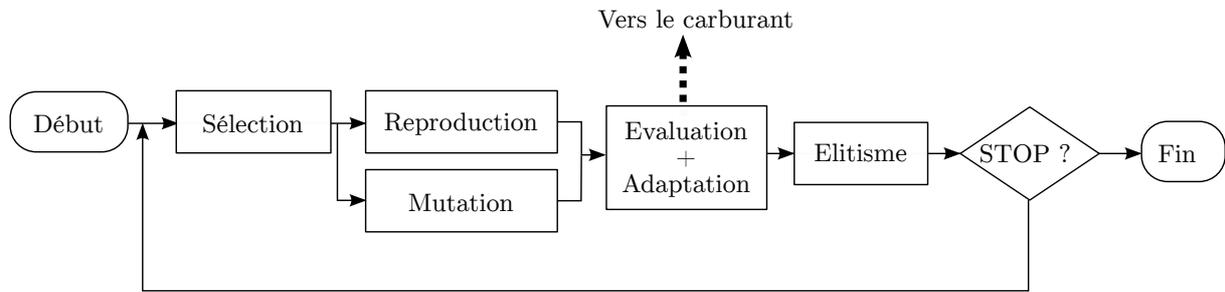


Figure 3.7 – Principe de fonctionnement des algorithmes génétiques.

- dans le cas multiobjectif, le rang du front (voir Section 3.1.2) est généralement utilisé, et les individus appartenant au rang le plus faible sont les mieux adaptés.

Pour les cas multiobjectifs, plus le nombre d'individus est important, mieux le front de Pareto sera décrit. Une difficulté réside toutefois dans la bonne répartition des individus le long de ce front. Afin d'éviter la concentration de tous les individus autour d'une seule partie du front, des critères d'adaptation supplémentaires ont été développés, afin d'assurer la **diversité** de la population. Cette sélection va déterminer le **groupe reproducteur** (*mating pool*) constitué des individus utilisés pour l'évolution.

L'évolution d'une génération à la suivante est le résultat d'une première étape de **reproduction** de plusieurs couples d'individus **parents**, appartenant au groupe reproducteur et qui vont donner naissance à des **enfants** par combinaison de leurs gènes. Une seconde étape de **mutation** de certains individus est également réalisée. Ceux-ci vont subir une altération aléatoire de leurs gènes. L'étape de reproduction permet de conserver une convergence rapide vers la solution optimale tandis que l'étape de mutation permet de continuer à explorer l'espace des paramètres aléatoirement afin de ne pas rester piégé dans une zone de minimum local.

Une dernière étape optionnelle, l'**élitisme**, peut compléter l'algorithme. Cette étape intervient avant de passer à la prochaine génération et a donné lieu à deux classes d'algorithmes génétiques : les algorithmes non-élitistes et élitistes (Deb, 2001). Les premiers vont systématiquement remplacer la génération courante par la nouvelle génération, composée des individus enfants. Cette approche risque, en éliminant des individus prometteurs, de dégrader l'adaptation d'une génération à l'autre et donc de ralentir la convergence. Les seconds, au contraire, vont comparer la génération courante et la génération issue des étapes de reproduction et de mutation. Les individus de la nouvelle génération les moins bien adaptés seront éliminés. Ainsi, étant donné que des individus adaptés pourront survivre sur plusieurs générations, le risque de dégradation de l'adaptation est moindre.

3.2.2 Algorithme NSGA-II

Deb et al. (2000) proposent un algorithme génétique élitiste nommé *Elitist Non-dominated Sorting Genetic Algorithm* ou NSGA-II. Il s'agit d'un des plus performants et des plus utilisés actuellement pour les problèmes d'ingénierie (Sanaye and Hajabdollahi, 2010b; Hajabdollahi et al., 2011; Soulat et al., 2013; Buisson et al., 2013). Il est en effet très robuste et capable de décrire l'ensemble du front de Pareto. Cependant, les résultats montrent qu'il converge rapidement durant les premières générations et que cette convergence devient ensuite plus laborieuse à cause de l'opérateur de diversité (Deb, 2001). La littérature a également montré les limites du NSGA-II lorsque le nombre d'objectifs est supérieur à 4. Cela a conduit au développement du NSGA-III (Deb and Jain,

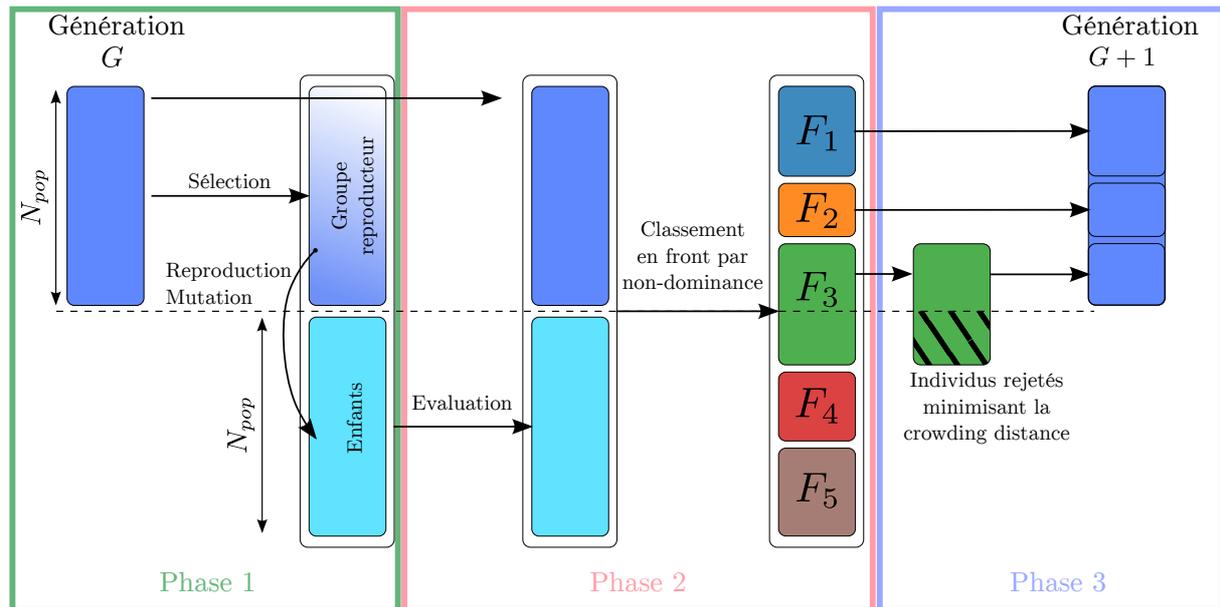


Figure 3.8 – Schématisation des trois phases de l'algorithme NSGA-II.

2014). Dans les présents travaux, le nombre d'objectifs restant inférieur ou égal à quatre, le NSGA-II est utilisé. De plus, le recul de la communauté sur ses performances est plus important.

3.2.2.1 Fonctionnement global

La création d'une nouvelle génération peut être divisée en trois phases, présentées par la Figure 3.8. Elles sont répétées jusqu'à ce que le critère de convergence soit atteint. Usuellement, il s'agit du nombre maximum de générations N_{gen} . On suppose que chaque génération est composée d'une population de N_{pop} individus.

Dans un premier temps (phase 1), le groupe reproducteur est constitué. N_{pop} individus sont sélectionnés par des tournois³ de taille 2 parmi les individus de la génération G . Un même individu peut être présent dans ce groupe en plusieurs exemplaires. Ces individus se reproduisent, en utilisant l'opérateur de croisement *Simulated Binary Crossover*⁴, et mutent, via une mutation polynomiale⁵, afin de générer des enfants. A ce stade, l'algorithme travaille avec une population jointe de taille $2N_{pop}$ composée de la génération originelle et des enfants.

La seconde phase commence par l'évaluation des individus enfants via le carburant pour l'optimisation (les individus de G étant déjà évalués). Les $2N_{pop}$ individus sont ensuite classés en fonction de leur adaptation : d'abord selon leur rang au sens de Goldberg ; ensuite en fonction de leur diversité via l'application de l'opérateur de *Crowding Distance*⁶ front par front. C'est cette phase qui renferme le caractère élitiste du NSGA-II car tous les individus (parents et enfants) sont concernés par ce classement.

Afin de définir la génération $G+1$, la troisième phase va réduire la taille de la population jointe à N_{pop} individus. Pour cela, l'algorithme va choisir successivement les individus appartenant aux fronts ayant le meilleur rang. Sur la Figure 3.8, il s'agit des fronts 1 et 2.

3. Voir Annexe D.1.5.1

4. Voir Annexe D.1.5.2

5. Voir Annexe D.1.5.3

6. Voir Annexe D.1.5.4

Il manque cependant encore des individus pour atteindre les N_{pop} individus. Le troisième front comporte cependant trop d'individus. C'est à ce moment que la valeur de la *crowding distance* est utilisée. Les individus sélectionnés sont, dans cet exemple, ceux du front 3 qui maximisent successivement cette distance.

Le NSGA-II permet également de réaliser des optimisations sous contraintes. Cela modifie la comparaison des individus lors des étapes de sélection du groupe reproducteur et de classement. Avant de comparer les individus selon le principe de dominance, leur admissibilité vis à vis des contraintes est vérifiée :

- si un des deux individus ne satisfait pas les contraintes, c'est l'autre qui est sélectionné,
- si les deux individus ne sont pas admissibles, l'individu le plus satisfaisant est sélectionné
- si les deux individus sont admissibles, ils sont comparés selon le principe de dominance.

3.2.2.2 Utilisation et limite du NSGA-II

Les deux paramètres majeurs du fonctionnement sont la taille de la population N_{pop} et le nombre maximal de générations N_{gen} . Afin d'obtenir une convergence acceptable, l'expérience montre que plusieurs centaines d'individus sur plusieurs dizaines de générations sont nécessaires. Cela conduit donc rapidement à devoir évaluer plusieurs milliers d'individus.

Si le carburant pour l'optimisation est un solveur de mécanique des fluides numérique, comme c'est le cas dans les présents travaux, il est évident que les ressources numériques nécessaires à la réalisation de telles évaluations limitent l'utilisation de la méthode dans un processus industriel de conception. C'est pour cela qu'un carburant raffiné de type métamodèle est utilisé. La section suivante présente les fondements théoriques et pratiques de ce type de méthodes.

3.3 Carburant pour l'optimisation : Métamodèles

Cette section présente les aspects théoriques et pratiques nécessaires à l'obtention et à l'utilisation d'un métamodèle de krigeage. Les motivations de l'utilisation de la métamodélisation dans le contexte de l'optimisation sont tout d'abord introduites. La formulation mathématique du krigeage sera ensuite détaillée. L'enrichissement des métamodèles est également abordé et plusieurs critères de la littérature seront introduits.

3.3.1 Pourquoi la métamodélisation ?

Lors de l'utilisation d'un algorithme génétique comme moteur d'optimisation, les individus à évaluer sont très nombreux. Or en mécanique des fluides numérique le coût d'évaluation d'un individu (une simulation) peut rapidement être prohibitif. Il est donc inconcevable d'utiliser directement le simulateur en tant que carburant pour l'optimisation lors d'un processus de conception industriel.

Pour répondre à cette problématique, des **métamodèles** (*metamodels* ou *surrogate models*) ont été introduits dans le processus d'optimisation (Simpson et al., 2001b; Koziel

et al., 2011). Le terme de métamodèle se rapporte à l'approximation des résultats d'un modèle, dans notre cas la simulation, par un autre modèle, plus abstrait, analytique ou semi analytique et décorrélé de la physique⁷. Dans cette thèse, la simulation est réalisée par un solveur de mécanique des fluides numérique, appelé **simulateur**, et le résultat est un scalaire appelé **réponse**. Celui-ci dépend des paramètres d'entrée. La réponse du simulateur est assimilée à une fonction multivariable à valeur réelle y :

$$y : \mathbf{p} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^{N_d} \rightarrow y(\mathbf{p}) \in \mathbb{R} \quad (3.12)$$

qui prend en argument un vecteur de paramètres d'entrée du simulateur \mathbf{p} défini dans l'espace des paramètres $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^{N_d}$ avec N_d le nombre de paramètres. On suppose que chaque paramètre est un scalaire réel.

Afin de construire un métamodèle, un **plan d'expériences** (*Design of Experiments* - *DOE*) est utilisé pour échantillonner l'espace des paramètres. Ainsi, un petit nombre de simulations à réaliser est déterminé afin d'y évaluer la réponse du modèle. Sur la base de ces réponses - ou **observations** - les paramètres du métamodèle sont ajustés, et l'approximation est construite. Un plan d'expériences à N_o observations est composé d'une matrice de vecteurs de paramètres \mathbf{P} et d'un vecteur des réponses \mathbf{y} définis comme :

$$\mathbf{P} = [\mathbf{p}^{(i)}]_{1 \leq i \leq N_o} \in \mathcal{D}^{N_o} \quad (3.13)$$

$$\mathbf{y} = [y(\mathbf{p}^{(i)})]_{1 \leq i \leq N_o} \in \mathbb{R}^{N_o} \quad (3.14)$$

où $\mathbf{p}^{(i)}$ est le i -ième vecteur de paramètres du plan d'expériences et $y(\mathbf{p}^{(i)})$ la réponse du simulateur associée.

L'avantage d'un métamodèle est donc évident : grâce à lui, un nombre restreint de simulations CFD coûteuses (observations discrètes) conduit à une approximation continue de la réponse en fonction des paramètres. Ainsi cette approximation est mieux adaptée à une utilisation dans le cadre de l'optimisation avec une algorithme génétique.

Cependant malgré le soin apporté à la construction du métamodèle, celui-ci reste une approximation. L'utilisation de cette approximation comme carburant à l'optimisation peut introduire deux types de biais sur les résultats de l'optimisation (Ponweiser et al., 2008b). Le premier consiste en un léger décalage de l'optimum du métamodèle par rapport à l'optimum du modèle. Malgré l'erreur de prédiction, les optima restent situés dans la même zone d'intérêt de l'espace des paramètres. Le second biais est introduit lorsque l'optimum global du modèle se trouve dans une région mal prédite par le métamodèle. Dans ce cas, le moteur d'optimisation peut ne pas le trouver et risque de converger vers un optimum local ou vers un faux optimum n'étant qu'un artefact du métamodèle.

La question qui se pose alors est celle du choix des méthodes d'échantillonnage et de métamodélisation. En effet, il faut que celles-ci assurent :

1. l'**efficacité** du métamodèle, en utilisant un nombre d'observations minimal pour sa construction,
2. la **précision** de l'approximation afin de limiter les risques énoncés précédemment.

7. On pourra noter que la dégradation d'un modèle physique en un modèle moins fidèle peut être considérée comme de la métamodélisation (Duchaine, 2007). Dans le cadre des présents travaux, seules les méthodes faisant abstraction de la physique sont considérées : on parle alors de modélisation "boîte noire" (Ginsbourger, 2009).

3.3.2 Quelles méthodes ?

3.3.2.1 Différentes méthodes de métamodélisation

Le nombre de méthodes de métamodélisation existant dans la littérature est très important. Outre les différentes théories mathématiques derrière chaque métamodèle, on peut distinguer les métamodèles déterministes ou probabilistes (Ginsbourger, 2009). Les premiers donnent une approximation de la réponse sous forme d'une fonction. Les seconds donnent la réponse sous la forme d'une prédiction associée à une estimation de l'incertitude de la prédiction.

Ci-après certaines méthodes de métamodélisation, parmi les plus utilisées, sont présentées brièvement (on pourra se reporter aux travaux de Simpson et al. (2001a) ou de Laurent (2013) pour plus d'informations) :

- La méthode de **régression polynomiale** suppose que la relation entre la réponse et les paramètres d'entrée peut être approchée par un polynôme. Cette méthode déterministe s'implémente et s'utilise aisément. Elle a en outre la capacité de lisser les observations bruitées. Cependant elle reste mal adaptée lorsque la réponse est multimodale. Dans ce cas, augmenter l'ordre du polynôme peut améliorer la précision mais au risque de voir apparaître des oscillations et de devoir augmenter le nombre d'observations nécessaires à l'ajustement des paramètres du métamodèle.
- Les métamodèles basés sur des **fonctions à base radiale** (*Radial Basis Functions* - RBF) approchent la réponse par une somme pondérée de fonctions. Ces fonctions sont "radialisées" par la distance Euclidienne. Les poids sont obtenus en inversant un système linéaire reposant sur les observations. Cette méthode déterministe a l'avantage de fournir une approximation interpolante.
- Les métamodèles par **régression multivariée par splines adaptatives** (*Multivariate Adaptive Regression Splines* - MARS) ressemblent aux RBF dans le sens où la réponse est approchée par une somme pondérée de fonctions de base. Celles-ci sont des fonctions continues avec un comportement conditionnel. Ces métamodèles déterministes ont l'avantage d'être très adaptables.
- Les métamodèles de **krigeage** (*kriging*) interpolent la réponse comme la réalisation d'un processus Gaussien aléatoire défini par une tendance et une matrice de covariance. Comme les RBF, ces métamodèles sont interpolants, flexibles et permettent d'approcher de manière précise des réponses fortement non-linéaires et multimodales. Par ailleurs, la formulation probabiliste du krigeage permet d'obtenir une estimation de la vraisemblance de l'approximation par l'erreur quadratique moyenne. Cela permet de mettre en place des stratégies d'enrichissement du plan d'expériences.
- Les **réseaux de neurones** (*neural networks*) sont des interpolateurs reposant sur l'analogie avec le cerveau. Ils sont capables d'approcher des fonctions continues par la somme pondérée de plusieurs fonctions non-linéaires. Un seul réseau peut fournir les approximations de plusieurs fonction ainsi que leurs dérivées. Toutefois, il requiert l'utilisation de deux populations différentes (apprentissage et test) pour le valider.

3.3.2.2 Différentes méthodes d'échantillonnage

Comme évoqué précédemment, la construction d'un métamodèle s'appuie sur des plans d'expériences numériques. Ces plans se distinguent des plans d'expériences usuels utilisés

pour traiter les données expérimentales, qui tiennent compte des erreurs aléatoires de mesure. Dans ce cas, les méthodes classiques, comme les plans factoriels (complets ou fractionnaires), les plans composites ou les plans de Box-Behnken, cherchent à positionner des observations sur les frontières de l'espace des paramètres pour prendre en compte la part aléatoire de la mesure (Franco, 2008). D'autre part, ces plans supposent une certaine linéarité de la réponse, ce qui peut ne pas être le cas pour des résultats issus de simulations numériques. Or dans le cadre des présents travaux, la réponse du simulateur (solveur CFD) à un jeu de paramètres d'entrée est considérée déterministe.

Aussi, de nouveaux plans d'expériences tels que les approches dites de "remplissage de l'espace" (*Space Filling Design*), ont été développés pour répondre aux problématiques liées à la simulation numérique. Ces approches cherchent essentiellement à répartir les observations dans l'espace des paramètres pour capter les non-linéarités tout en évitant les répétitions.

Parmi les méthodes de remplissage de l'espace, la plus utilisée actuellement est celle de l'**échantillonnage par hypercube latin** (*Latin Hypercube Sampling - LHS*). En effet, elle génère des observations bien réparties et non redondantes et permet également de traiter une grande variété de problèmes en terme de taille d'espace (nombre de dimensions) et de nombre d'observations souhaitées (Viana, 2013). Cette méthode est en outre facile à mettre en place et à utiliser.

Un plan d'expériences par LHS se construit en plusieurs étapes. Tout d'abord, chaque intervalle de variation des N_d dimensions de l'espace des paramètres est divisé en un nombre de niveaux (*bins*) égal au nombre d'observations N_o à réaliser. Ensuite, un tirage aléatoire répartit les N_o observations en veillant à ce qu'il n'y ait qu'une observation par niveau. La distribution des observations dans l'espace des paramètres ainsi obtenue est uniforme selon chaque dimension. Cependant, à cause du caractère aléatoire du tirage, la propriété de *space filling*, qui représente l'homogénéité de la distribution des observations dans l'espace, n'est pas garantie (Viana, 2013; Damblin et al., 2013). Cette propriété est également dégradée si le nombre d'observations n'est pas suffisant. Les trois exemples d'échantillonnage visibles Figure 3.9 mettent en évidence l'intérêt de la propriété de *space filling*.

Afin de garantir un *space filling* de qualité, il faut veiller à respecter la règle empirique qui fixe le nombre minimal d'observations⁸ à $N_o \sim 10N_d$ (Damblin et al., 2013; Jones et al., 1998). De plus, de nombreuses études se sont concentrées sur l'optimisation de la position des observations en fonction de différents critères. On parle alors de **LHS optimisé**. Parmi les critères, on peut citer (Franco, 2008; Damblin et al., 2013) :

- l'**entropie** de Shannon, qui conduit à un plan maximisant la quantité d'informations apportée par les réponses. A noter que ce critère nécessite d'avoir accès à la réponse pour être utilisé, ce qui le rend difficile à utiliser dans le cadre de la métamodélisation d'un simulateur.
- le **maximin**, qui minimise la distance maximale entre les observations et les points d'une grille régulière discrétisant l'espace des paramètres.
- le **minimax**, qui maximise la distance minimale entre deux observations. Ce critère s'avère facile à calculer mais difficile à optimiser. En pratique, on lui préfère le critère ϕ_p (Viana, 2013), plus simple à optimiser et qui conduit aux mêmes optima quand p tend vers l'infini (Damblin et al., 2013).

8. nécessaire, mais non suffisant

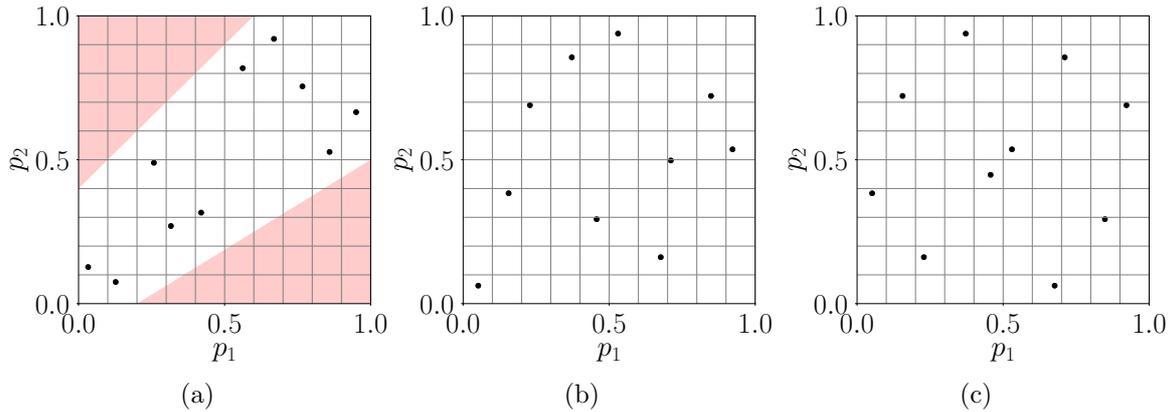


Figure 3.9 – Exemple de trois LHS pour $N_d = 2$ et $N_o = 10$. Chaque intervalle est divisée en 10 niveaux (grille grise) avec une observation par niveau (point noir) - (a) La répartition des observations est uniforme selon les dimensions mais des zones de l'espace ne sont pas échantillonnées (en rouge). - (b) La répartition possède un *space filling* correct. - (c) La répartition est optimisée sur la base de la discrédance.

- la **discrédance** (*discrepancy*), qui mesure l'irrégularité d'une distribution, en regardant l'écart entre cette distribution et une distribution uniforme. Les mesures de discrédance basées sur la norme L^2 sont les plus répandues car des expressions analytiques faciles à calculer existent.
- le critère de **Minimum Spanning Tree** (*MST*) qui réalise une analyse géométrique en fonction de la distance entre les observations. La MST est une arborescence (*tree*) qui relie toutes les observations et dont la somme des longueurs des branches est minimale. Une analyse de la longueur moyenne des branches ainsi que de la dispersion permet de qualifier la distribution : les plans avec des longueurs moyennes importantes et des faibles dispersions assurent un bon remplissage de l'espace (Franco, 2008).

Afin de réaliser l'optimisation des plans d'expériences en fonction de ces différents critères, différentes approches sont possibles. Une approche simple est de générer un grand nombre de LHS différents et de choisir celui qui optimise le critère (Laurent, 2013). Damblin et al. (2013) jugent cette méthode inefficace au vu du grand nombre de LHS possible.

Ainsi, des approches reposant sur des algorithmes métaheuristiques ont été proposées. L'idée principale est de réaliser une petite perturbation du plan LHS initial et de réévaluer la valeur du critère. Cette perturbation est typiquement une permutation entre deux observations aléatoires d'un même niveau d'une même dimension. Les propriétés de l'hypercube latin restent préservées après la perturbation. Si la perturbation améliore le critère, elle est conservée sinon, elle peut être refusée⁹. Jin et al. (2005) ont proposé un nouvel algorithme, *Enhanced Stochastic Evolutionary*, pour l'optimisation de LHS jugé plus efficace par Damblin et al. (2013).

3.3.2.3 Choix des méthodes

Le krigeage a été retenu dans les présents travaux. En effet la méthode est polyvalente, permet des stratégie d'enrichissement et peut évaluer sa vraisemblance. Elle présente

9. Elle n'est pas systématiquement refusée afin d'éviter de se retrouver piégé dans un minimum local.

également l'avantage de pouvoir considérer des réponses et observations "bruitées". En effet, il ne semble pas pertinent de considérer la réponse du simulateur comme déterministe et exempte de sauts (Mohammadi, 2016). Les schémas spatiaux et temporels de la simulation, le maillage, les modèles de turbulence ou la convergence des simulations sont autant de facteurs pouvant entraîner des perturbations de la réponse et cette "fonctionnalité" du krigeage semble pertinente. La théorie de cette méthode est présentée de manière plus détaillée dans la Section 3.3.3.

La méthode d'échantillonnage est un LHS optimisé par l'algorithme ESE. Pour plus de détails sur la théorie, on pourra se reporter aux travaux de Franco (2008).

3.3.3 Krigeage, formulation

La méthode de krigeage est issue de la géostatistique, initiée par Krige (1951) dans le cadre de l'étude de la répartition spatiale de gisements miniers d'or à partir de forages existants. La méthode est nommée et formalisée mathématiquement suite aux travaux de Matheron (1969). La géostatistique a ensuite connu un essor important avec un développement de la méthode de krigeage en particulier (Chauvet, 2008).

Dans les années 1980, Sacks et al. (1989) proposent d'employer le krigeage dans le cadre de l'approximation de fonctions déterministes. La méthode prend le nom de *Design and Analysis of Computer Experiments* (DACE). Depuis les années 1990, la méthode de krigeage est utilisée dans le domaine du *machine learning* (Rasmussen and Williams, 2006) avec une terminologie et une interprétation différentes : le formalisme bayésien est adopté et la méthode prend le nom de régression par processus gaussien (Ponweiser et al., 2008b). C'est sous cet angle qu'est présentée la méthode dans les présents travaux.

3.3.3.1 Construction du métamodèle de krigeage

La méthode de krigeage approche la fonction déterministe y comme la réalisation d'un **processus aléatoire** $\{Y(\mathbf{p})\}_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}}$ défini comme la somme d'une tendance $v : \mathbf{p} \in \mathcal{D} \rightarrow v(\mathbf{p}) \in \mathbb{R}$ et d'un **processus aléatoire gaussien stationnaire** $\{Z(\mathbf{p})\}_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}}$ centré¹⁰. L'approximation pour un vecteur de paramètres $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ s'écrit donc :

$$Y(\mathbf{p}) = v(\mathbf{p}) + Z(\mathbf{p}) \quad (3.15)$$

avec :

- la tendance qui peut être vue comme un modèle de régression, et qui est une somme pondérée de fonctions de bases v_i :

$$v(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_b} \beta_i v_i(\mathbf{p}) \quad (3.16)$$

- le processus gaussien stationnaire à l'ordre 2 centré :

$$Z(\mathbf{p}) \sim \mathcal{PG}(0, K(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)})) \quad (3.17)$$

L'Annexe D.3.1 rappelle brièvement les notions théoriques relatives aux processus gaussiens.

Selon la forme choisie pour la tendance, trois types de krigeage sont définis dans la littérature (Roustant et al., 2012) :

10. A espérance nulle.

- le krigeage simple (*Simple Kriging - SK*) lorsque la fonction $v(\cdot)$ est connue,
- le krigeage ordinaire (*Ordinary Kriging - OK*) lorsque la tendance est une constante inconnue,
- le krigeage universel (*Universal Kriging - UK*) lorsque la tendance est donnée par Eqn. (3.16) avec $v_i(\cdot)$ des fonctions connues et β_i des coefficients inconnus.

Dans la suite, la construction du krigeage universel est détaillée car il s'agit du cas le plus général.

Soient \mathbf{P} la matrice des vecteurs de paramètres et \mathbf{y} le vecteur des réponses associées tels que définis Eqns. (3.13) et (3.14). Le métamodèle de krigeage approxime la valeur de $y(\mathbf{p})$ pour un vecteur de paramètres $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ comme la réalisation d'un processus conditionné par les observations précédentes, soit $(Y(\mathbf{p}) | Y(\mathbf{P}) = \mathbf{y})$.

La loi de probabilité de ce processus dérive de la minimisation de l'erreur quadratique moyenne et respecte les lois de non-biais et de linéarité de l'estimateur vis à vis des observations¹¹ (Martínez-Frutos and Herrero-Pérez, 2016). Ce processus conditionnel est également¹² gaussien stationnaire à l'ordre 2 et il admet des moments d'ordre 1 ($m_K(\cdot)$) et 2 ($s_K^2(\cdot)$) :

$$(Y(\mathbf{p}) | \mathbf{y}) \sim \mathcal{P}\mathcal{G}(m_K(\cdot), s_K^2(\cdot)) \quad (3.18)$$

En utilisant la formule de Sherman-Morrison-Woodbury (Brochu et al., 2010), on peut déterminer sa moyenne $m_K(\cdot)$ comme :

$$m_K(\mathbf{p}) = \mathbb{E}[Y(\mathbf{p}) | \mathbf{y}] \quad (3.19)$$

$$= \mathbf{v}(\mathbf{p})^T \hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{V} \hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (3.20)$$

et sa variance, ou erreur quadratique moyenne (*mean squared error - MSE*)¹³ comme :

$$s_K^2(\mathbf{p}) = \text{Cov}[Y(\mathbf{p}), Y(\mathbf{p}) | \mathbf{y}] \quad (3.21)$$

$$= \hat{\sigma}^2 \left(1 - \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}(\mathbf{p}) \right. \\ \left. + (\mathbf{v}(\mathbf{p})^T - \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{V})^T (\mathbf{V}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{V})^{-1} (\mathbf{v}(\mathbf{p})^T - \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{V}) \right) \quad (3.22)$$

avec :

- le vecteur des fonctions de bases

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = [v_i(\mathbf{p})]_{1 \leq i \leq N_b} \quad (3.23)$$

- la matrice de régression (*experimental matrix*)

$$\mathbf{V} = [v_j(\mathbf{p}^{(i)})]_{1 \leq i \leq N_o, 1 \leq j \leq N_b} \quad (3.24)$$

11. En effet, le formalisme géostatistique (Chauvet, 2008) définit la moyenne de krigeage Eqn. (3.20) comme étant le meilleur estimateur linéaire sans biais des observations (*best linear unbiased predictor - BLUP* (Goldberger, 1962)) et qui minimise la variance (*mean squared error*) (Sacks et al., 1989).

12. Conformément à la remarque D.5

13. Formellement $\text{MSE}[Y] = \text{Var}[Y] + \text{Biais}[Y]^2$, mais comme la définition du krigeage conduit à un prédicteur non biaisé, $\text{MSE}[Y] = \text{Var}[Y]$.

- le vecteur des corrélations entre un vecteur $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ inconnu et les vecteurs de paramètres du plan d'expériences \mathbf{P}

$$\mathbf{r}(\mathbf{p}) = [R(\mathbf{p}, \mathbf{p}^{(i)}, \boldsymbol{\theta})]_{1 \leq i \leq N_o} \quad (3.25)$$

$$= \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{k}(\mathbf{p}) \quad (3.26)$$

où $\mathbf{k}(\mathbf{p}) = [K(\mathbf{p}, \mathbf{p}^{(i)})]_{1 \leq i \leq N_o}$ est le vecteur de covariance,

- la matrice des corrélations entre les différents vecteurs du plan d'expériences \mathbf{P}

$$\mathbf{R} = [R(\mathbf{p}^{(i)}, \mathbf{p}^{(j)}, \boldsymbol{\theta})]_{1 \leq i \leq N_o, 1 \leq j \leq N_o} \quad (3.27)$$

$$= \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{K} \quad (3.28)$$

où $\mathbf{K} = [K(\mathbf{p}^{(i)}, \mathbf{p}^{(j)})]_{1 \leq i \leq N_o, 1 \leq j \leq N_o}$ est la matrice de covariance,

- la variance estimée $\hat{\sigma}^2$, le vecteur des estimations des coefficients de la tendance $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ et le vecteur des paramètres de portée $\boldsymbol{\theta}$ sont les paramètres inconnus du modèle de krigeage et doivent être estimés. Cette estimation sera présentée dans la section 3.3.3.2.

En l'état¹⁴, la moyenne de krigeage $m_K(\cdot)$, donnée Eqn. (3.20), est interpolante et la valeur de la variance $s_K^2(\cdot)$, donnée Eqn. (3.22), est nulle aux points du plan d'expériences :

$$\forall \mathbf{p} \in \mathbf{P}, \quad m_K(\mathbf{p}) = y(\mathbf{p}) \quad (3.29)$$

$$s_K^2(\mathbf{p}) = 0 \quad (3.30)$$

On pourra également remarquer que l'expression de la variance de krigeage (Eqn. (3.22)) ne dépend pas directement des observations \mathbf{y} . La Figure 3.10 illustre l'approximation d'une fonction cosinus par un métamodèle de krigeage construit avec 5 observations. La moyenne de krigeage est identifiée par le trait plein. La variance permet de déterminer les intervalles de confiance à 95 % en gris. Le comportement interpolant est clairement visible.

3.3.3.2 Estimation des paramètres de krigeage

Afin d'estimer les paramètres du krigeage, la méthode basée sur le maximum de vraisemblance de l'estimation (*maximum likelihood estimation - MLE*) est la plus utilisée (Sacks et al., 1989; Roustant et al., 2012). L'idée sous-jacente de la méthode est de déterminer les paramètres du krigeage de telle sorte qu'ils maximisent la vraisemblance du métamodèle. Dans le cadre du krigeage universel et d'un processus gaussien stationnaire, la vraisemblance est donnée par la fonction (Park and Baek, 2001) :

$$L(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{N_o/2} |\mathbf{R}|^{1/2}} \exp\left(\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{V}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{V}\boldsymbol{\beta})}{-2\sigma^2}\right) \quad (3.31)$$

La définition de la fonction de vraisemblance $L(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})$ est explicite en fonction du vecteur des coefficients de la tendance $\boldsymbol{\beta}$ et de la variance du processus gaussien σ . L'écriture des dérivées partielles en fonction de ces deux variables conduit à une expression

14. Ce ne sera pas le cas pour la formulation bruitée (Roustant et al., 2012).

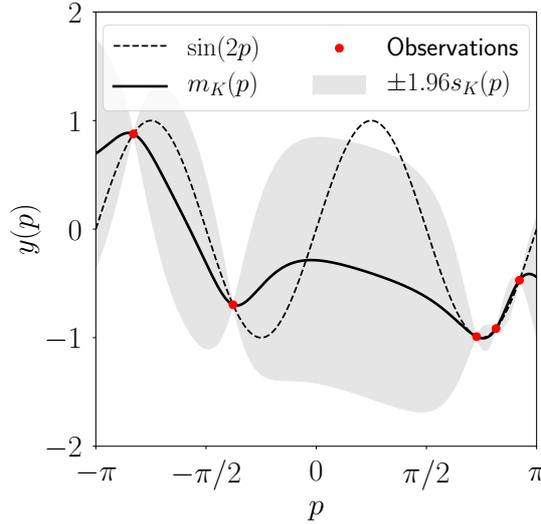


Figure 3.10 – Illustration de l'approximation par krigeage. La "vrai" réponse est en pointillée, les observations sont identifiées par les points rouge et $m_K(p)$ est en trait plein. Les zones grises indiquent les intervalles de confiance à 95%.

analytique. L'annulation de ces dérivées donne le vecteur des estimations aux moindres carrés généralisées (*vector of generalized least square estimates*) $\hat{\beta}$:

$$\frac{\partial L(\beta, \sigma^2, \theta, \mathbf{y})}{\partial \beta} = 0 \quad (3.32)$$

$$\Rightarrow \hat{\beta} = (\mathbf{V}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{V})^{-1} \mathbf{V}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} \quad (3.33)$$

et l'estimateur de la variance $\hat{\sigma}^2$:

$$\frac{\partial L(\beta, \sigma^2, \theta, \mathbf{y})}{\partial \sigma^2} = 0 \quad (3.34)$$

$$\Rightarrow \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N_o} (\mathbf{y} - \mathbf{V}\hat{\beta})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{V}\hat{\beta}) \quad (3.35)$$

Ces deux estimateurs sont des fonctions du vecteur des paramètres de portée θ . En les injectant dans l'expression Eqn. (3.31), maximiser la vraisemblance revient à trouver θ qui maximise la "log-vraisemblance" (*log-likelihood*) exprimée comme :

$$\ln L(\beta, \sigma^2, \theta, \mathbf{y}) = -\frac{1}{2} (N_o \ln(2\pi) + N_o \ln(\hat{\sigma}^2) + \ln(|\mathbf{R}|) + N_o) \quad (3.36)$$

La résolution de ce problème de maximisation nécessite le recours à un algorithme. Celui présenté par Park and Baek (2001) est parmi les plus utilisés¹⁵.

La qualité de la prédiction du métamodèle dépend de l'estimation des paramètres par la MLE (Mohammadi, 2016). En effet dans certains cas, l'apparition d'un plateau de la fonction de vraisemblance est possible lorsque les paramètres de portée deviennent petits car la matrice des corrélations tend vers l'identité. Afin d'éviter ce problème, différentes méthodes ont été proposées comme l'utilisation d'un test de détection du plateau (Mohammadi, 2016) ou l'utilisation d'une MLE pénalisée (PLME) (Roustant et al., 2012).

15. Il est notamment implémenté dans *DiceKriging*.

3.3.3.3 Modélisation du bruit - effet de pépité

La formulation du krigeage suppose que la réponse y du simulateur est déterministe en fonction des paramètres d'entrée. Ainsi, le métamodèle de krigeage est interpolant comme énoncé par les Eqns. (3.29) et (3.30). Cependant, dans certains cas et notamment en simulation numérique, la réponse n'est pas nécessairement déterministe et pour un même vecteur de paramètres d'entrée, la réponse peut légèrement varier à cause de problématiques de convergence par exemple. On dira que la réponse est bruitée (*noise*).

Ainsi pour chaque observation du plan d'expériences, on suppose que la réponse est la somme d'une partie déterministe et d'un bruit. Dans le cas où le bruit est constant pour toutes les observations, on parle de bruit **homogène**, sinon on dit qu'il est **hétérogène**.

Il est possible de dériver la théorie du krigeage en supposant que le bruit ϵ est la réalisation d'une variable aléatoire. L'hypothèse est faite que le bruit suit une loi normale centrée :

$$\epsilon(\mathbf{p}^{(i)}) \sim \mathcal{N}(0, \tau_i^2), \quad 1 \leq i \leq N_o \quad (3.37)$$

Ainsi l'expression du métamodèle de krigeage devient :

$$Y(\mathbf{p}) = v(\mathbf{p}) + Z(\mathbf{p}) + \epsilon(\mathbf{p}) \quad (3.38)$$

L'ajout de ce bruit change donc la moyenne et la variance de krigeage en modifiant la matrice de covariance définie Eqn. (3.28) qui devient :

$$\mathbf{K} = \sigma^2 \mathbf{R} + \mathbf{N} \quad (3.39)$$

avec $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{N_o \times N_o}$ la matrice diagonale des termes de variance τ_i^2 . Si le bruit est homogène, $\mathbf{N} = \tau^2 \mathbb{I}$ avec \mathbb{I} la matrice identité. Dans ce cas, la moyenne de krigeage n'est plus interpolante.

Un autre phénomène lié à la sensibilité du simulateur est l'apparition de "sauts". Dans ce cas là, une petite perturbation du vecteur de paramètres en entrée va entraîner une forte variation de la réponse. Cette forte discontinuité est gérée dans le cadre de la géostatistique via l'ajout d'un effet de pépité¹⁶ (*nugget effect*). Le principe est d'ajouter un terme de variance τ^2 constant (inconnu ou non) au noyau de covariance :

$$K(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}) = \sigma^2 R(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}, \boldsymbol{\theta}) + \tau^2 \delta(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}) \quad (3.40)$$

où $\delta(\cdot, \cdot)$ est le symbole de Kronecker.

L'ajout d'un tel terme au noyau de covariance donne un comportement du métamodèle de krigeage proche de celui avec des observations bruitées homogènes. On notera cependant que l'ajout d'un effet de pépité donne une moyenne de krigeage interpolante car la variance additionnelle est ajoutée directement au noyau de covariance et non plus seulement à la matrice de covariance comme présenté Eqn. (3.39) (Roustant et al., 2012).

La prise en compte du bruit et de l'effet de pépité entraîne une modification de l'estimation des paramètres de krigeage $\boldsymbol{\beta}$, σ^2 et $\boldsymbol{\theta}$. Ci-après les nouvelles expressions dans le cadre du krigeage universel sont présentées.

Dans le cas de l'effet de pépité ou d'un bruit homogène inconnu, on définit la variance totale $\sigma_\tau = \sigma^2 + \tau^2$ et $\mathbf{R}_\tau = \frac{\sigma^2}{\sigma_\tau} \mathbf{R} + \frac{\tau^2}{\sigma_\tau} \mathbf{1}_{N_o}$. Ainsi la matrice de covariance s'écrit $\mathbf{K} = \sigma_\tau \mathbf{R}_\tau$.

16. Il prend également le nom de *jitter* dans le cadre du *machine learning*.

Les estimateurs $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ et $\hat{\sigma}_\tau$ deviennent :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{V}^T \mathbf{R}_\tau^{-1} \mathbf{V})^{-1} \mathbf{V}^T \mathbf{R}_\tau^{-1} \mathbf{y} \quad (3.41)$$

$$\hat{\sigma}_\tau = \frac{1}{N_o} (\mathbf{y} - \mathbf{V} \hat{\boldsymbol{\beta}})^T \mathbf{R}_\tau^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{V} \hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (3.42)$$

et la log-vraisemblance dépend de $\boldsymbol{\theta}$ et du rapport $\hat{\sigma}^2/\hat{\sigma}_\tau$:

$$\ln L(\boldsymbol{\beta}, \sigma_\tau, \boldsymbol{\theta}, \tau^2, \mathbf{y}) = -\frac{1}{2} (N_o \ln(2\pi) + N_o \ln(\hat{\sigma}_\tau^2) + \ln(|\mathbf{R}_\tau|) + N_o) \quad (3.43)$$

La résolution du problème de maximisation de la log-vraisemblance donne les paramètres de portée et τ^2 .

3.3.3.4 Options de construction du modèle de krigeage

Dans les présents travaux, des métamodèles basés sur le krigeage universel seront utilisés. Les fonctions de base définissant la tendance seront dans la majorité des cas, et sauf indications contraires, des fonctions linéaires vis à vis des paramètres $v_i(p) = p_i$.

Le noyau de covariance sera basé sur la fonction mono-dimensionnelle Matérn $\nu = 5/2$ (dont l'expression est définie dans le Tableau D.2). En effet, dans ses travaux, Laurent (2013) a montré que la fonction gaussienne peut conduire à des problèmes de conditionnement (et donc d'inversibilité) de la matrice de covariance, conduisant à l'impossibilité de calculer la vraisemblance.

La maximisation de la vraisemblance sera réalisée avec l'algorithme *Genetic Optimization Using Derivatives* (Mebane Jr et al., 2011). Cet algorithme combine avantageusement la recherche globale d'un algorithme génétique et la recherche locale d'une méthode de gradient. L'utilisation de cet algorithme permet ainsi d'obtenir des résultats stables (et répétables) mais au prix d'une augmentation du temps de calcul : plusieurs minutes à comparer avec les quelques secondes nécessaires en utilisant simplement une méthode de gradient. Au vu du temps nécessaire pour obtenir la réponse du simulateur (plusieurs heures), cette augmentation est négligeable sur le processus d'optimisation complet et la répétabilité des résultats est une caractéristique importante.

La sensibilité et le non-déterminisme du simulateur seront également considérés via l'estimation d'un l'effet de pépite.

3.3.4 Validation des métamodèles

Une fois le métamodèle construit, sa qualité doit être évaluée afin de pouvoir conclure sur la validité de l'approximation. On peut différencier deux types de méthode permettant de qualifier le métamodèle :

- le premier utilise un jeu d'observations n'ayant pas servi à construire le métamodèle et permet donc d'évaluer la qualité de la prédiction en des points de l'espace des paramètres inconnus du métamodèle. On l'appellera le **jeu de validation**.
- le second type de méthode ne nécessite pas de nouvelles observations et la qualité du métamodèle est évaluée en utilisant les points ayant permis de le construire.

Cette partie présente les indicateurs de qualité les plus utilisés dans la littérature (Dupuy et al., 2015).

Erreur quadratique moyenne. L'erreur quadratique moyenne (*mean squared error - MSE*) et plus particulièrement sa racine carrée (*root mean squared error - RMSE*) est un indicateur très utilisé pour mesurer la précision d'une prédiction. La RMSE va mesurer l'écart, au sens de la norme L^2 , entre la fonction $y(\cdot)$ et sa prédiction $m_K(\cdot)$ en un certain nombre d'observations de validation N_v :

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N_v} \sum_{i=1}^{N_v} (y(\mathbf{p}^{(i)}) - m_K(\mathbf{p}^{(i)}))^2} \quad (3.44)$$

L'interpolation est de bonne qualité lorsque la RMSE tend vers 0. Cette mesure est dépendante de l'amplitude de variation de la fonction. Pour s'en affranchir, il est possible de normaliser la RMSE par la différence des extrema des observations

$$\max(y(\mathbf{p}^{(i)})) - \min(y(\mathbf{p}^{(i)}))$$

On parle alors de RMSE relative.

Erreur absolue moyenne. L'erreur absolue moyenne (*mean absolute error - MAE*) est un critère similaire à la RMSE, mais qui mesure l'écart au sens de la norme L^1 :

$$\text{MAE} = \frac{1}{N_v} \sum_{i=1}^{N_v} |y(\mathbf{p}^{(i)}) - m_K(\mathbf{p}^{(i)})| \quad (3.45)$$

avec $|\cdot|$ la valeur absolue. Ce critère a l'avantage d'être plus robuste que la RMSE car moins sensible à l'impact des valeurs aberrantes (*outliers*). Le métamodèle est jugé précis lorsque la MAE tend vers 0. De la même manière que précédemment, il est possible d'utiliser une MAE relative par une normalisation.

Coefficient de détermination. Ce critère, plus communément noté R^2 , est le plus utilisé pour mesurer la prédictibilité des métamodèles, notamment quand ils reposent sur des méthodes de régression. Il se calcule comme :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_v} (y(\mathbf{p}^{(i)}) - m_K(\mathbf{p}^{(i)}))^2}{\sum_{i=1}^{N_v} (y(\mathbf{p}^{(i)}) - \bar{y})^2} \quad (3.46)$$

avec $\bar{y} = 1/N_v \sum_{i=1}^{N_v} y(\mathbf{p}^{(i)})$ la valeur moyenne des réponses du jeu de validation. Plus la valeur de R^2 est proche de 1 plus le modèle est précis.

Lorsque, comme pour un métamodèle de krigeage, la prédiction est interpolante, alors les critères présentés précédemment donnent des erreurs nulles si le jeu de validation est composé des observations du plan d'expériences (critères égaux à 1 pour le R^2 et 0 pour les autres). Ainsi, si l'on souhaite qualifier le métamodèle de krigeage, un jeu de validation différent du plan d'expériences est nécessaire. Lorsque la réponse du simulateur est peu onéreuse, cela est envisageable. Cependant, pour les applications faisant intervenir la simulation numérique des fluides, ce coût est important et limite la construction d'un tel jeu.

Les méthodes utilisant uniquement les observations du plan d'expériences sont donc préférées en pratique. Parmi celles-ci, les méthodes de validations croisées (*cross-validation*) sont largement répandues dans le domaine des statistiques. Elles reposent sur un principe de ré-échantillonnage et sont utilisées pour qualifier la prédiction, choisir un métamodèle ou en détecter les instabilités (Dupuy et al., 2015).

K-fold cross-validation. Avec cette méthode, l'ensemble des observations du plan d'expériences \mathbf{P} sont réparties dans K sous-ensembles $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_K$ de taille (approximativement) égale. On définit la fonction $K(i)$ qui, pour chaque vecteur de paramètres $\mathbf{p}^{(i)} \in \mathbf{P}$, $1 \leq i \leq N_o$, renvoie le numéro du sous-ensemble auquel ce vecteur appartient. Pour chaque vecteur $\mathbf{p}^{(i)}$ du sous-ensemble $\mathbf{P}_{K(i)}$ une prédiction $m_K^{K(i)}(\mathbf{p}^{(i)})$ est construite, basée sur les observations des $K - 1$ sous-ensembles restant $\bigcup_{j \neq K(i)} \mathbf{P}_j$. Ainsi pour chaque observation du plan d'expériences, on peut comparer la réponse du simulateur et la réponse prédite par un métamodèle qui n'utilise pas cette observation pour être construit.

Le coefficient de corrélation quadratique de prédiction (*predictive squared correlation coefficient*) est défini comme (Schüürmann et al., 2008) :

$$Q^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_o} \left(y(\mathbf{p}^{(i)}) - m_K^{K(i)}(\mathbf{p}^{(i)}) \right)^2}{\sum_{i=1}^{N_o} (y(\mathbf{p}^{(i)}) - \bar{y})^2} \quad (3.47)$$

On peut remarquer que ce coefficient a la même expression que R^2 . Théoriquement, la valeur moyenne des réponses \bar{y} doit être celle des observations faisant partie du sous-ensemble $K(i)$ auquel le vecteur courant de la somme appartient. Cependant dans la pratique, on considère la valeur moyenne de l'ensemble des observations du plan d'expériences pour plus de simplicité. Il s'avère que cette simplification entraîne des estimations de la prédiction Q^2 plus conservatives (Schüürmann et al., 2008) car le dénominateur de la fraction Eqn. (3.47) aura ainsi tendance à être sous-estimé.

Lorsque Q^2 tend vers 1, le modèle est considéré comme précis.

On peut également définir une erreur quadratique moyenne et une erreur absolue moyenne de *cross-validation* notées RMSE_{CV} et MAE_{CV} . Pour chaque sous-ensemble une RMSE et une MAE sont calculées entre les réponses de ce sous-ensemble et la prédiction $m_K^{K(i)}$. Les erreurs de *cross-validation* sont les moyennes arithmétiques des erreurs de chaque sous-ensemble. On peut également les normaliser par l'amplitude de variation des observations pour obtenir des valeurs relatives.

Leave-one-out cross validation. Cette méthode est un cas particulier de la *K-fold cross-validation* pour lequel le nombre de sous-ensembles est égal au nombre d'observations du plan d'expériences. Ainsi une observation du plan d'expériences est utilisée comme jeu de validation et les $N_o - 1$ restantes sont utilisées pour construire le métamodèle. L'opération est répétée pour chaque observation. Lorsque N_o est élevé, outre son coût de calcul prohibitif, cette méthode peut surestimer la qualité prédictive du métamodèle.

Comme présenté par Dupuy et al. (2015), il est courant d'utiliser la *cross-validation* avec 10 sous-ensembles. De cette manière, 90% des observations servent à prédire les 10% restantes.

3.3.5 Critères d'enrichissement

Comme présenté précédemment, lorsque le moteur d'optimisation utilise un métamodèle comme carburant, il est possible d'obtenir des optima biaisés. Ce risque peut être minimisé en choisissant les méthodes d'échantillonnage et de métamodélisation adaptées comme le LHS et le krigeage.

Cependant, lorsque le coût d'évaluation d'une observation est élevé, il n'est pas toujours possible de respecter la règle empirique $N_o \sim 10N_d$. De plus, même si elle est respectée, il est possible que l'optimum soit difficile à prédire¹⁷ ou qu'il se trouve dans une région nécessitant plus d'observations pour une bonne prédiction.

Afin de résoudre ce problème persistant et ainsi obtenir des métamodèles précis et peu onéreux, des méthodes d'enrichissement (*adaptive sampling*) ont été développées (Forrester and Keane, 2009). En partant d'un plan d'expériences "grossier" \mathbf{P} et des réponses associées \mathbf{y} , ces méthodes vont ajouter itérativement des observations à \mathbf{P} en se basant sur les informations du métamodèle. La question se pose donc de savoir quelles informations retenir et comment choisir la ou les nouvelles observations à ajouter. En effet, ces nouvelles observations doivent remplir deux attentes (Ginsbourger, 2009; Liu et al., 2017b) :

1. améliorer la prédiction du minimum courant du métamodèle par une recherche **locale**. On parle alors d'**exploitation** des régions prometteuses.
2. améliorer la qualité **globale** de la prédiction sur la totalité de l'espace des paramètres. On parle alors d'**exploration**.

Différents critères d'enrichissement (*infill criteria*) remplissant l'une, l'autre ou les deux attentes ont donc été proposés dans la littérature. Lorsque le métamodèle est utilisé en tant que corrélation¹⁸, c'est l'exploration qui est prédominante (Picheny et al., 2010). Mais lorsque le métamodèle est le carburant à l'optimisation, c'est l'exploitation qui prime. Les régions de l'espace des paramètres nécessitant l'ajout d'observations sont donc plus restreintes, ce qui réduit le coût de construction de l'approximation. Dans la majorité des cas pratiques cependant, les critères qui assurent un bon compromis entre les deux attentes sont privilégiés afin d'éviter de se retrouver piégé dans un optimum local. L'algorithme EGO (*Efficient Global optimization*) de Jones et al. (1998) est la référence majeure pour ces approches d'enrichissement. Lorsque la stratégie d'enrichissement a pour but de réduire l'incertitude globale du métamodèle (exploration), elle prend parfois le nom de *Stepwise Uncertainty Reduction* (SUR) (Villemonteix et al., 2009; Bect et al., 2012; Picheny, 2015).

Le formalisme des métamodèles de krigeage a permis de développer pléthore de critères d'enrichissement. Cette partie présente donc les critères les plus utilisés actuellement. Comme indique précédemment, on considérera qu'optimiser la valeur de la réponse y revient à la **minimiser**.

Les critères les plus utilisés sont introduits brièvement ci-après. Une présentation plus détaillée est disponible dans l'Annexe D.3.3.

3.3.5.1 Critères mono-objectifs mono-observations

Les premières méthodes d'enrichissement développées, telles que l'algorithme EGO, sont dites à **enrichissement séquentiel** car à chaque itération une seule observation est ajoutée au plan d'expériences.

Lorsque le métamodèle est utilisé comme carburant à l'optimisation, on ne recherche plus le minimum de y mais celui de son approximation m_K . Intuitivement, on peut penser qu'enrichir le métamodèle proche de son minimum courant permette de capter plus

17. car très singulier ou proche d'une variation importante.

18. ce qui est une utilisation typique de la CFD dans les échangeurs.

précisément le minimum de y (Ginsbourger et al., 2010). Cependant, ce critère d'exploitation ne permet pas de s'affranchir des deux biais présentés car rien n'assure que le minimum courant ne soit pas un minimum local (Liu et al., 2017b) ou seulement un artefact du métamodèle (Ginsbourger et al., 2010).

Un des avantages des métamodèles probabilistes comme le krigeage, est qu'ils fournissent une estimation de l'incertitude de la prédiction. Pour le krigeage il s'agit de la variance s_K^2 . Ainsi, il est aisé d'enrichir le métamodèle dans les régions de l'espace des paramètres les plus incertaines en ajoutant le vecteur de paramètres qui maximise la variance de la prédiction (ou MSE)(Ginsbourger et al., 2010). Ce critère d'exploration, nommé *maximum mean squared error* ou MMSE (Picheny et al., 2010) est très local et tend à ajouter de nombreuses observations aux frontières de l'espace des paramètres car c'est là que se situent beaucoup de zones incertaines¹⁹. Il est donc jugé inefficace pour l'exploitation du métamodèle (Ginsbourger et al., 2010; Sasena et al., 2002; Liu et al., 2017b). Il reste toutefois le plus performant au sens de la RMSE et il fournit un critère d'arrêt à la stratégie d'enrichissement.

L'amélioration espérée (*expected improvement* - EI) a été proposée (Jones et al., 1998) comme un compromis entre exploration et exploitation. Ce critère repose sur les propriétés du processus gaussien. La valeur de l'amélioration attendue au vecteur $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ quantifie l'amélioration que l'on pourrait attendre si la réponse est évaluée en ce point de l'espace des paramètres. L'amélioration en $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ est définie comme :

$$\mathcal{I}(\mathbf{p}) = \max(\min(\mathbf{y}) - Y(\mathbf{p}), 0) \quad (3.48)$$

et l'amélioration espérée comme :

$$\text{EI}(\mathbf{p}) = \mathbb{E} [\mathcal{I}(\mathbf{p}) | Y(\mathbf{P}) = \mathbf{y}] \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} &= (\min(\mathbf{y}) - m_K(\mathbf{p})) F_{\mathcal{N}(0,1)} \left(\frac{\min(\mathbf{y}) - m_K(\mathbf{p})}{s_K(\mathbf{p})} \right) \\ &+ s_K(\mathbf{p}) f_{\mathcal{N}(0,1)} \left(\frac{\min(\mathbf{y}) - m_K(\mathbf{p})}{s_K(\mathbf{p})} \right) \end{aligned} \quad (3.50)$$

avec $F_{\mathcal{N}(0,1)}(\cdot)$ et $f_{\mathcal{N}(0,1)}(\cdot)$ la fonction de répartition et la densité de probabilité de la loi normale centrée réduite. L'EI a l'avantage d'être nul aux observations du plan d'expériences et d'être strictement positif ailleurs avec une amplitude qui augmente avec $s_K(\cdot)$ et qui diminue avec $m_K(\cdot)$. C'est ce critère qui est principalement utilisé dans l'algorithme EGO (Jones et al., 1998) et dans de nombreuses études (Sasena et al., 2002; Ginsbourger, 2009; Binois, 2015; Mohammadi, 2016; Liu et al., 2017b). En effet, il présente l'avantage de fournir une quantification de l'amélioration attendue ce qui permet de définir un critère d'arrêt de l'algorithme EGO (Jones et al., 1998; Huang et al., 2006).

Afin de bénéficier des avantages de la MMSE en terme d'exploration tout en compensant l'aspect trop local du critère, l'incertitude intégrée (*integrated mean squared error*) ou IMSE peut être considérée (Sacks et al., 1989; Picheny et al., 2010). Le vecteur de paramètres enrichissant le plan d'expériences est celui qui, une fois ajouté, va minimiser l'IMSE. L'estimation de ce critère requiert toutefois une intégration numérique souvent

19. En effet, le krigeage est par définition une méthode d'interpolation.

coûteuse, pouvant limiter son application.

La plupart des critères d'exploitations cherchent à localiser la position la plus probable du minimum de y pour y ajouter une observation. Villemonteix et al. (2009) formulent ce problème autrement : quelles observations sont les plus pertinentes afin d'améliorer la connaissance de ce minimum ? Ils ont donc proposé un critère qui mesure l'incertitude de localisation du minimum via l'entropie de Shannon, une entropie faible indiquant que le minimum est bien localisé. Le nouveau vecteur sera celui qui minimisera l'entropie une fois ajouté au plan d'expériences²⁰. Picheny (2015) propose un critère reposant sur le volume espéré d'une "excursion" qui serait inférieure au minimum courant une fois ajoutée au plan d'expériences.

3.3.5.2 Critères mono-objectifs multiobservations

Les critères présentés précédemment sont basiquement séquentiels. Cela veut dire qu'ils ne permettent de déterminer qu'une seule nouvelle observation à ajouter au plan d'expériences. Lorsque le simulateur est un solveur CFD, cela est désavantageux car les temps de calculs sont importants (jusqu'à plusieurs dizaines d'heures). Il serait donc intéressant de pouvoir réaliser plusieurs calculs simultanément (Ginsbourger et al., 2010). Des critères multiobservations (*batch infill criteria*) ou des combinaisons de plusieurs critères mono-observations ont donc été proposés dans la littérature.

Le critère le plus utilisé pour répondre à ces attentes est sans conteste l'amélioration espérée multipoints (*multi-points expected improvement* - q-EI) proposée par Ginsbourger et al. (2010). Le q-EI peut être vu comme l'application de l'EI à la variable aléatoire $\min(Y(\mathbf{P}_q))$ avec $\mathbf{P}_q = [\mathbf{p}^{(i)}]_{1 \leq i \leq q}$ un ensemble de q vecteurs. Ce critère ne se focalise pas uniquement sur un gain de précision immédiat mais également sur une exploration plus globale.

Il est également possible d'utiliser l'IMSE qui, de par sa formulation, se prête bien à une généralisation pour une utilisation en *batch* (Chevalier et al., 2014).

Une autre méthode pour obtenir plusieurs nouveaux vecteurs de paramètres est de réaliser une combinaison de plusieurs critères mono-objectifs mono-observations (Liu et al., 2012; Feng et al., 2015; Liu et al., 2017b).

3.3.5.3 Critères multiobjectifs

Les critères d'exploitation présentés précédemment se concentrent sur une seule fonction. Ceci fait sens dans le cadre de l'optimisation mono-objectif. Dans le cas multiobjectif, plusieurs métamodèles sont construits (un par objectif) et utilisés en tant que carburant à l'optimisation. La solution de ce type de problèmes est :

- le front de Pareto dans l'espace des objectifs (le meilleur compromis entre les différents objectifs),
- l'ensemble de Pareto dans l'espace des paramètres.

Ainsi, il apparaît évident qu'enrichir chaque métamodèle dans la zone du minimum de leur réponse respective n'est pas très efficace ici²¹. Intuitivement, construire une approxi-

20. Le critère IMSE se rapproche de cette stratégie car il considère un gain postérieur.

21. Particulièrement lorsque les fonctions objectifs sont très antagonistes comme c'est le cas pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge en thermique.

mation précise de chaque réponse pour l'ensemble de l'espace des paramètres semble être la méthode la plus fiable pour réaliser l'optimisation. Cependant une telle approche peut se révéler coûteuse numériquement, surtout quand le nombre de paramètres et d'objectifs augmentent (Binois, 2015).

Ainsi, des critères d'enrichissement mieux adaptés aux problèmes multiobjectifs ont été proposés. Pour la plupart, ces critères sont séquentiels et ne fournissent qu'une seule nouvelle observation à réaliser. En effet, la littérature fait état d'un manque de critères multiobjectifs et multiobservations (Martínez-Frutos and Herrero-Pérez, 2016).

Comme dans le cas mono-objectif, une façon intuitive d'enrichir les métamodèles est d'ajouter les vecteurs de paramètres de l'ensemble de Pareto (Shimoyama et al., 2012). Une difficulté repose sur le choix des nouvelles observations. D'autre part, tout comme sa version mono-objectif, cette méthode risque de concentrer les observations vers un optimum sans garantir qu'il s'agisse bien d'un optimum global (Shimoyama et al., 2012). On notera que cette approche permet de sélectionner plusieurs nouvelles observations.

Au vu des résultats probants de l'amélioration espérée dans le cas mono-objectif, une vision multiobjectif en a été proposée (Svenson, 2011; Binois, 2015). La difficulté réside dans le remplacement du minimum des observations par une grandeur faisant sens dans le cas multiobjectif. Pour cela, différentes expressions de la fonction d'amélioration \mathcal{I} ont été proposées (Svenson, 2011; Binois, 2015). Dans les présents travaux, l'amélioration de l'hypervolume²² (*Hypervolume Improvement*) est utilisée. Sa formulation est détaillée dans l'Annexe D.3.3. La nouvelle observation est telle que, une fois ajoutée au plan d'expériences, la probabilité d'amélioration de l'hypervolume (*Expected Hypervolume Improvement* - EHI) couverte par les observations non dominées du plan soit maximale. Emmerich et al. (2006) soulignent qu'une plus grande valeur de $\mathcal{I}_{\mathcal{H}}(\mathbf{p})$ conduit à une meilleure solution du point de vue du front de Pareto si l'espace des objectifs est normalisé. S'il ne l'est pas, ce qui est souvent le cas en pratique, la mesure de l'amélioration peut être biaisée par un des objectifs et une attention particulière doit être apportée à l'interprétation de la valeur. De plus, il requiert l'utilisation d'un paramètre extérieur pour le calcul de l'hypervolume.

Le critère précédent repose sur une approche heuristique de l'enrichissement car il est très complexe à mettre en œuvre. Picheny (2015) propose d'étendre la formulation du volume espéré d'excursion (EEV) aux cas multiobjectifs. Le volume d'excursion est donné par l'intégrale de la probabilité que le vecteur des réponses $\mathbf{y}(\mathbf{p})$ soit non-dominé par les observations non dominées du plan d'expérience, notées $\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}$, sachant les observations déjà réalisées. Formellement cela s'écrit :

$$ev(\mathbf{p}) = \int_{\mathcal{D}} \mathbb{P}[\mathbf{y}(\mathbf{p}) \not\leq \mathcal{P}_{\mathbf{Y}} \mid \mathbb{Y}(\mathbf{P}) = \mathbf{Y}] d\mathbf{p} \quad (3.51)$$

L'incertitude est mesurée par le volume dans l'espace des paramètres de l'ensemble d'excursion tel que son image dans l'espace des objectifs domine le front de Pareto courant (Binois, 2015). Quand $ev(\mathbf{p})$ est grand, la région de l'espace des paramètres est probablement meilleure que l'ensemble des observations du plan d'expériences actuel. Inversement, si le front de Pareto courant se rapproche du "réel", au sens du simulateur, alors le volume devient petit. A partir de cette mesure, un critère d'enrichissement est défini, basé sur le

22. notée $\mathcal{I}_{\mathcal{H}}(\mathbf{p})$ et dont l'expression est détaillée Section 3.4.1.1.

gain qu'apportera le nouveau vecteur des paramètres en terme de réduction de volume. De part la nécessité d'intégrer la probabilité sur l'espace des paramètres, le coût numérique de ce critère est élevé. Il a cependant l'avantage de ne pas être sensible à la différence d'échelle entre les objectifs (contrairement au précédent) et ne nécessite pas de paramètres extérieurs.

3.3.5.4 Choix d'un critère d'arrêt

Souvent dans la pratique, la stratégie d'enrichissement est utilisée afin d'obtenir un métamodèle remplissant des objectifs d'explorations ou d'exploitations avec un nombre limité d'observations. Dans des cas industriels, cette limite est imposée par les ressources de calcul à disposition et/ou le temps alloué pour réaliser l'optimisation (Ginsbourger, 2009). Le choix d'un critère d'arrêt pertinent reste une question ouverte dans la littérature (Picheny et al., 2010).

Les valeurs de l'EI, définies Eqn. (3.50), ou de la MMSE, définies Eqn. (D.26), donnent des informations quantitatives sur l'incertitude maximale et l'amélioration du métamodèle. Il est donc possible d'établir un critère d'arrêt basé sur ces informations. Dans l'algorithme EGO (Jones et al., 1998), le critère d'arrêt dépend de la valeur de l'EI du nouveau vecteur de paramètres \mathbf{p}' ajouté. Huang et al. (2006) proposent une version modifiée prenant en compte l'amplitude de la réponse :

$$\frac{\text{EI}(\mathbf{p}')}{|\max(\mathbf{y}) - \min(\mathbf{y})|} < \delta_{\text{EI}} \quad (3.52)$$

avec une tolérance fixée à 0.1%.

De la même manière, on peut définir une critère d'arrêt basé sur la valeur de la MMSE au nouveau vecteur de paramètres tel que :

$$\frac{s_K^2(\mathbf{p}')}{|\max(\mathbf{y}) - \min(\mathbf{y})|} < \delta_{\text{MMSE}} \quad (3.53)$$

avec une tolérance δ_{MMSE} à définir selon les cas.

Analyser l'information donnée par la valeur de l'amélioration espérée multipoint est plus ardu car il s'agit d'une probabilité jointe d'amélioration qui dépend du nombre d'observations q à trouver. Si q augmente, alors la valeur du critère également. On pourrait calculer l'indicateur :

$$\frac{1}{|\max(\mathbf{y}) - \min(\mathbf{y})|} \frac{q\text{-EI}(\mathbf{P}'_q)}{q} \leq \delta_{q\text{-EI}} \quad (3.54)$$

quantifiant l'apport de chacune des nouvelles observations à l'amélioration. Lorsque ce critère devient trop petit devant une tolérance $\delta_{q\text{-EI}}$, alors cela revient à dire que le coût numérique est trop important pour le bénéfice en terme d'amélioration espérée.

Dans la communauté de l'optimisation basée sur les métamodèles, il est plus courant de se fixer un nombre maximal d'observations possibles, dépendant des contraintes présentées précédemment (Ginsbourger, 2009; Picheny et al., 2010).

Dans les présents travaux, en fonction des cas traités l'arrêt de l'enrichissement repose soit sur un nombre d'observations maximal, soit sur les valeurs de la MMSE et du $q\text{-EI}$.

3.4 Analyse des résultats

La profusion de résultats générée par l'algorithme génétique et le nombre de dimensions définissant le problème d'optimisation nécessitent des outils adaptés pour l'analyse. Cette section présente des critères d'évaluation de la convergence de la solution du problème multiobjectif et des outils pour le dépouillement et l'analyse des fronts et des sets de Pareto.

3.4.1 Analyse de la convergence de la solution de l'AG

Afin de pouvoir s'assurer de la fiabilité des résultats de l'optimisation, la convergence de l'évolution de l'algorithme génétique, vers le front et le set de Pareto, doit être vérifiée.

Typiquement, dans la littérature (Buisson, 2008; Picheny, 2015), l'évolution du front de Pareto est suivie jusqu'à la stabilité. Cette évolution peut s'exprimer par exemple en terme de nombre d'individus dans le front de rang 1, qui va se stabiliser, et qui montre que l'algorithme génétique n'améliore plus la population. On peut également utiliser certains critères d'évaluation du front de Pareto qui sont présentés ci-après.

Les présents travaux proposent également de s'assurer de la convergence du set de Pareto, qui du point de vue de l'optimisation de forme, reste le résultat présentant le plus d'intérêt.

3.4.1.1 Évaluation des fronts de Pareto : mesure de l'hypervolume

La résolution du problème d'optimisation multiobjectif conduit, au mieux, à l'obtention du front de Pareto ($\mathcal{P}_{\mathcal{F}} \subset \mathcal{F}$) et de l'ensemble de Pareto ($\mathcal{P}_{\mathcal{D}} \subset \mathcal{D}$). *A minima* il s'agit d'une approximation de ces deux ensembles²³. L'utilisation de moteurs méta-heuristiques, qui sont de nature stochastique, peut, par exemple, conduire à des fronts et ensembles différents pour deux optimisations successives. Afin de pouvoir comparer qualitativement les résultats de l'optimisation, des métriques ont été développées. Ces métriques analysent le résultat de l'optimisation dans l'espace des objectifs.

Cette section présente une métrique unaire, la mesure de l'hypervolume, qui permet d'analyser une approximation du front de Pareto, soit directement, soit en la comparant au front de Pareto réel, si celui-ci est connu. Pour une liste plus complète, on pourra se reporter aux travaux de Van Veldhuizen (1999) et de Zitzler et al. (2003).

Dans la suite on considère que $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}$ est l'approximation du front de Pareto réel noté $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}^*$. Le nombre de vecteurs des objectifs formant $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}$ est donné par le cardinal de l'ensemble, noté $\text{card}(\mathcal{P}_{\mathcal{F}})$.

La mesure de l'hypervolume, proposée par Zitzler et al. (2003), est donnée par la mesure de Lebesgue, qui généralise la notion de volume à un espace de dimensions supérieures à trois. Elle quantifie le volume couvert par les vecteurs constituant $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}$. Afin de réaliser la mesure, un vecteur de référence $\mathbf{y}^{ref} \in \mathbb{R}^{N_{obj}}$ est nécessaire. Pour chaque vecteur du front $\mathbf{y}_i \in \mathcal{P}_{\mathcal{F}}$, un hypercube $\mathcal{H}(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}^{ref})$ est construit entre ce vecteur et le point de référence. La mesure d'hypervolume est calculée comme le volume de l'union des hypercubes :

$$\mathcal{H}(\mathcal{P}_{\mathcal{F}}, \mathbf{y}^{ref}) = \text{volume} \left(\bigcup_{i=1}^{\text{card}(\mathcal{P}_{\mathcal{F}})} \mathcal{H}(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}^{ref}) \right) \quad (3.55)$$

23. Pour certains moteurs, des preuves mathématiques de convergence existent. Pour les méta-heuristiques, il faut s'assurer de la convergence.

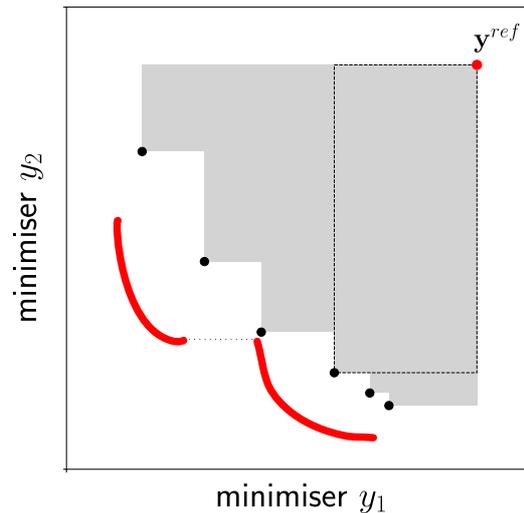


Figure 3.11 – Mesure d’hypervolume pour un cas bi-objectif. Le front de Pareto réel $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}^*$ apparaît en rouge. L’aire grise représente la mesure de Lebesgue entre les vecteurs de $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}^*$ (en noir) et le point de référence (en rouge). Le rectangle en pointillé représente l’hypercube d’un vecteur.

La figure Figure 3.11 illustre le calcul de l’hypervolume dans le cadre d’un problème bi-objectif. Idéalement, le point nadir serait choisi comme point de référence. Cependant son obtention est complexe dans le cadre de problème à plus de deux objectifs. Aussi un point dominant toutes les solutions du front peut être choisi. La valeur de la métrique reste toutefois sensible à l’amplitude des objectifs.

Cette métrique est largement utilisée pour vérifier la convergence du front de Pareto. En effet, on considère que le front est convergé quand la variation du critère entre deux générations tend vers 0.

Si le front de Pareto réel $\mathcal{P}_{\mathcal{F}}^*$ est connu, sa mesure d’hypervolume peut être utilisée pour normaliser les autres mesures (Jacquenot, 2010).

3.4.1.2 Évaluation des ensembles de Pareto

Les présents travaux proposent de suivre la convergence de l’ensemble de Pareto via un système de classes. Les individus de l’ensemble sont répartis dans différentes classes en fonction de chaque paramètre. La proportion d’individus de la population dans chaque classe est suivie au cours des générations. Lorsque cette proportion se stabilise pour chaque classe, on considère que la solution est convergée.

La Figure 3.12 illustre cette convergence. Les individus de l’ensemble de Pareto sont répartis en 5 classes en fonction du paramètre $e/2H$. À partir de la génération 50, la distribution des individus se stabilise autour d’une valeur moyenne (en pointillé) et les intervalles de confiance à 95% (en gris) assurent une faible dispersion.

Une des difficultés de cette méthode réside dans le choix des classes. Il est obligatoire d’avoir une connaissance *a priori* de la distribution pour pouvoir les déterminer. En effet, un nombre trop restreint de classes conduira à une mauvaise évaluation des distributions. Au contraire, si trop de classes sont définies, la convergence sera plus complexe à évaluer. Les classes peuvent être définies en utilisant les groupes issus de la classification des résultats de l’optimisation (voir Section 3.4.2.1).

La convergence est donc usuellement vérifiée une fois l’optimisation réalisée.

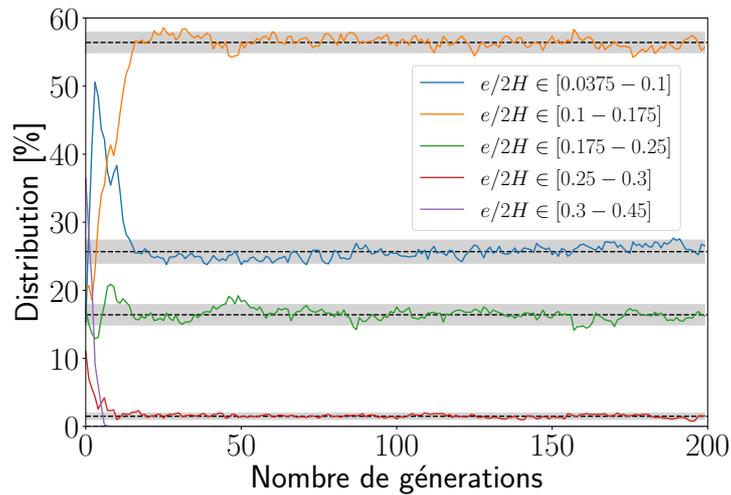


Figure 3.12 – Évolution de la distribution des individus, répartis en 5 classes, au cours des générations. La distribution moyenne est en pointillé et les intervalles de confiance à 95% sont en gris.

3.4.1.3 Synthèse

Le suivi, au long des générations, des critères d'évaluation des fronts de Pareto et de la distribution des individus de l'ensemble de Pareto, permet de s'assurer de la convergence de la population de l'algorithme génétique.

La section suivante présente les outils de visualisation et de traitement de ces solutions.

3.4.2 Classification et visualisation des résultats

Comme présenté dans la partie Section 3.2, l'algorithme génétique va faire évoluer une population pour atteindre le front de Pareto. Le nombre de solutions optimales, d'un point de vue pratique, est donc égal au nombre d'individus dans la population. Celui-ci étant généralement de plusieurs centaines, un outil permettant d'extraire un nombre fini de formes est nécessaire afin de pouvoir donner un sens pratique (industrialisation) aux solutions ainsi obtenues.

D'autre part, dans le cadre de l'optimisation multiparamétrique et multiobjectif, l'utilisateur est souvent confronté à la taille de l'espace dans lequel est défini le problème, constitué par l'union de \mathcal{D} et \mathcal{F} . Si cette taille est supérieure à trois, les méthodes classiques de visualisations (graphe) sont limitées pour représenter les résultats, et pour essayer de comprendre la physique du cas et les tendances d'évolution des objectifs en fonction des paramètres. Un outil permettant de représenter les ensembles de grandes dimensions est nécessaire.

Les deux problématiques peuvent être résolues en utilisant des outils basés sur l'apprentissage automatisé (*machine learning*) non supervisé²⁴. Typiquement, ces méthodes vont analyser un ensemble de données (dans notre cas les individus de la population) pour essayer d'en extraire des modèles de distribution, des classes comportant des comportements homogènes ou des règles d'association. Deux types d'outils vont être utilisés ; ils sont présentés brièvement par la suite :

24. On retrouve ces outils dans de nombreuses applications liées au *big data*.

- des outils de classification (*clustering*), qui vont permettre de partitionner les individus de la population en groupes, représentés par un seul individu généralisant les caractéristiques (paramètres et objectifs) des autres membres.
- des outil de visualisation, permettant de projeter les caractéristiques des individus du front de Pareto sur des dimensions accessibles à l'humain (graphes en deux dimensions).

3.4.2.1 Classification des solutions : *Clustering*

L'objectif des méthodes de *clustering* est de réaliser une classification des individus en groupes bien distincts les uns des autres. Au sein d'un même groupe, tous les individus sont homogènes. L'état de l'art de ces méthodes est vaste et il n'en existe *a priori* pas une universelle permettant de traiter tous les problèmes (El Attar, 2012). Dans les présents travaux, la méthode non probabiliste des *K*-moyennes (*K-means*) et la méthode probabiliste basée sur les mélanges gaussiens (*Gaussian mixtures*) sont utilisées.

Méthode des *K*-moyennes. Cette méthode a pris le nom de *K-means* suite aux travaux de MacQueen (1967). Elle partitionne les individus en *K* groupes (*clusters*), selon un processus itératif. Le nombre de groupes est spécifié par l'utilisateur. L'homogénéité des individus au sein d'un même groupe est mesurée avec la distance euclidienne. Ainsi, la méthode va créer des groupes d'individus minimisant la distance euclidienne par rapport à leur centre.

Dans un premier temps, *K* individus sont aléatoirement choisis parmi la population en tant que centres de groupe. Ensuite, les autres individus sont assignés au centre le plus proche d'eux afin de former les groupes. Des nouveaux centres sont alors définis, comme étant les barycentres de chaque groupe. Les individus sont à nouveau assignés à chaque centre. Les deux dernières étapes sont répétées tant que la tolérance sur la variation de la position des centres n'est pas atteinte. La Figure 3.13 illustre ce processus itératif pour des individus définis dans un espace à deux dimensions et formant trois groupes identifiables visuellement.

Cette méthode a l'avantage d'être simple à mettre en œuvre. Cependant, comme le nombre de groupes doit être défini par l'utilisateur, il faut avoir une connaissance *a priori* de la distribution des individus. Si l'on définit un nombre de groupes *K* trop important, l'algorithme va obligatoirement créer *K* groupes, ce qui peut conduire à un sur-partitionnement des individus. De plus, comme le centre du groupe est défini au final par son barycentre, celui-ci peut ne pas être proche d'un individu, comme c'est le cas du groupe bleu à l'itération 5 sur la Figure 3.13. Cela pose un problème dans notre cas car une forme représentative du groupe est recherchée. Enfin, comme l'homogénéité est mesurée par la distance euclidienne entre les individus et le centre, il est possible que la méthode assigne à un groupe des individus qui appartiennent visuellement à un autre.

Méthode basée sur les mélanges gaussiens. Ces méthodes sont plus simplement appelées modèles de mélanges gaussiens (*Gaussian mixture models*). Elles vont estimer la distribution des individus en les modélisant comme étant la combinaison linéaire de *K* distributions gaussiennes simples, appelées **composantes du mélange** (El Attar, 2012). Chaque composante représente un groupe, et suit une loi de probabilité gaussienne. Chaque composante est donc définie par une moyenne (centre du groupe), une matrice de

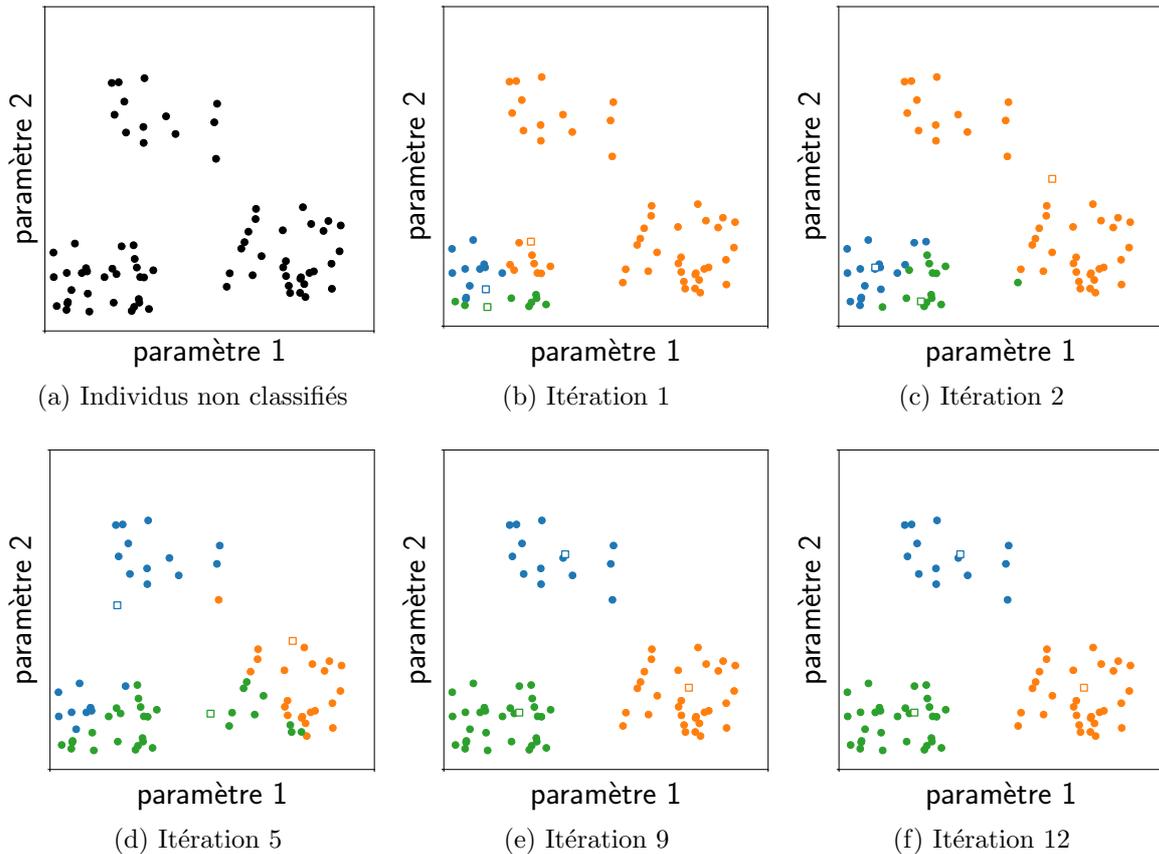


Figure 3.13 – Processus de création des groupes par la méthode des K -means pour des individus définis par deux paramètres et formant trois groupes identifiables. Les couleurs identifient les groupes et les symboles carrés vides les centres de groupe.

covariance (dispersion autour du centre) et une proportion de mélange (pondération de la combinaison linéaire), formant les **paramètres** du modèle.

A priori, la répartition des individus entre les différents groupes n'est pas connue. Un apprentissage non supervisé va donc permettre, à partir des caractéristiques des individus, de déterminer les paramètres définissant les composantes. Ils sont ainsi estimés de telle sorte qu'ils maximisent la vraisemblance de la répartition des individus entre les différentes composantes²⁵. Cependant, comme cette fonction de vraisemblance est difficile à déterminer (Bishop, 2006, Chap. 9), l'algorithme espérance-maximisation (*expectation-maximization* - EM), proposé par Dempster et al. (1977) est usuellement utilisé. Afin de maximiser la vraisemblance, cet algorithme va répéter deux étapes jusqu'à convergence :

- une étape de calcul de l'espérance conditionnelle de la fonction de vraisemblance (étape E), qui dépend des paramètres du modèle ;
- une étape de maximisation de cette espérance conditionnelle (étape M) permettant d'affiner les paramètres du modèle.

La convergence est atteinte lorsque l'évolution de la valeur de l'espérance entre deux itérations est en deçà d'une tolérance. Des preuves mathématiques de la convergence existent (Bishop, 2006, Chap. 9). Au départ de cette procédure itérative, les paramètres

²⁵. C'est la même idée générale que celle utilisée pour estimer les paramètres d'un métamodèle de krigeage.

du modèle sont définis le plus souvent via une pré-classification reposant sur la méthode de K -moyennes.

Les résultats de cette méthode restent sensibles aux valeurs initiales des paramètres du modèle. De plus, comme pour la méthode de K -moyennes, le nombre de composantes K est défini par l'utilisateur et cela peut conduire à un sur-partitionnement des individus.

Des extensions de la méthode existent, permettant notamment d'éviter certains singularités engendrées par l'EM et de ne pas sur-partitionner la population (Bishop, 2006, Chap. 10). Ces extensions ont été utilisées dans les présents travaux.

Synthèse. Volontairement, cette section se limite à la présentation des grands concepts théoriques des deux méthodes de *clustering* utilisées dans ces travaux. En effet, celles-ci étant déjà implémentées dans de nombreux langages de script scientifiques²⁶, elles ont été seulement considérées du point de vue utilisateur. On pourra se référer au livre de Bishop (2006) pour plus d'informations, notamment les chapitres 9 et 10.

D'un point de vue ingénieur, ces méthodes permettent de condenser l'information portée par les nombreux individus du front et de l'ensemble de Pareto et de pouvoir **extraire un nombre fini de formes**, qui sera ensuite analysé plus précisément.

3.4.2.2 Visualisation des solutions : *Self-Organizing Maps*

Lorsque le nombre de dimensions du problème d'optimisation (espace des paramètres et espace des objectifs) est supérieur à trois, il devient complexe de réaliser des visualisations classiques telles que des graphes en deux ou trois dimensions. En effet, cela conduit à n'utiliser que certains paramètres ou objectifs et donc à se priver d'informations (Tušar and Filipič, 2015).

La méthode des *Self-Organizing Maps* (SOM), introduite par Kohonen (1982), est largement utilisée pour la visualisation d'un ensemble de grandes dimensions, tel que la population issue d'un algorithme génétique. Elle repose sur un réseau de neurones qui va, grâce à un apprentissage non supervisé, organiser les individus. Les individus sont projetés sur plusieurs plans, et regroupés par similarité : deux individus qui se ressemblent se trouveront côte à côte sur ce plan. Les données sont alors représentées par un ensemble de cartes portant chacune une information. La Figure 3.14 illustre le rendu de cette méthode pour une population composée d'individus à trois paramètres et deux objectifs.

La lecture d'une SOM est analogue à celle d'une carte géographique : la couleur portée par chaque carte change avec les informations mais la position des points analysés reste inchangée entre deux cartes, comme l'illustre la Figure 3.14.

Par exemple, l'individu en haut en droite des cartes est caractérisé par une valeur maximale du paramètre 1, une valeur moyenne du paramètre 2, une valeur minimale du paramètre 3. Il maximise l'objectif 1 et possède une forte valeur pour l'objectif 2. On peut également remarquer que les individus ont, pour une grande majorité, une valeur maximale du paramètre 1, indiquant qu'il s'agit d'un paramètre important.

Construction des cartes. Les SOM sont construites en utilisant un réseau de neurones organisés dans l'espace selon un treillis hexagonal ou carré. La position des neurones est fixe. A chaque neurone est associé un vecteur dit *prototype*, qui est l'image d'un (ou plusieurs) individu(s) de la population renvoyée par le réseau (Soulat et al., 2013).

26. Python et R par exemple

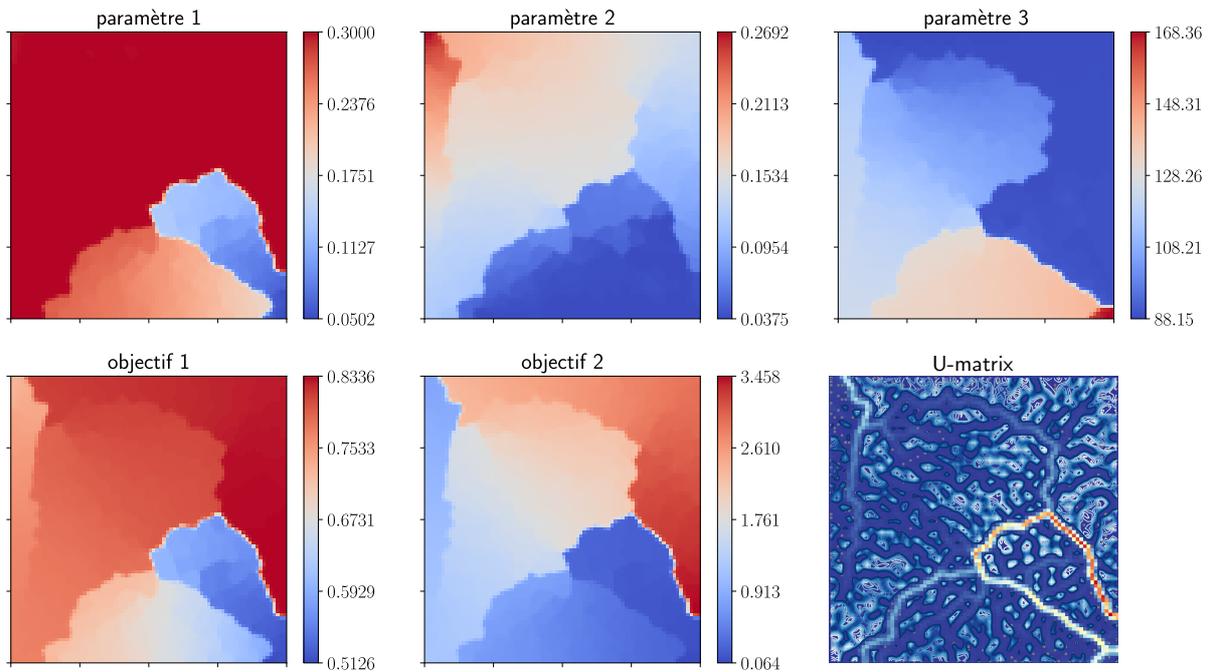


Figure 3.14 – Exemple de *Self-Organizing Maps* pour des individus définis par trois paramètres et deux objectifs. La *U-matrix* est également représentée. On cherche à maximiser l'objectif 1 et à minimiser l'objectif 2. La *U-matrix* met bien en évidence un groupe très différent, caractérisé par une faible valeur du paramètre 1.

L'apprentissage non supervisé va chercher à déterminer les vecteurs prototypes tels qu'ils soient une image fidèle des individus et que deux neurones voisins soient similaires. La notion de similitude repose sur la distance euclidienne.

L'apprentissage est peut être séquentiel (un seul individu de la population est traité à chaque itération) ou matriciel (tous les individus sont traités simultanément). En pratique, la méthode matricielle est privilégiée car, bien que plus coûteuse numériquement, elle garantit un résultat plus déterministe que la méthode séquentielle (Soulat, 2010, Chap. 4).

Finalement, la méthode va faire apparaître des zones cohérentes sur chaque carte, avec des individus qui vont être similaires.

La taille du réseau de neurones est importante. Si elle est inférieure à la taille de la population, alors un effet de moyenne est introduit et un neurone va représenter plusieurs individus. Si elle est supérieure à la taille de la population, certains neurones résulteront d'une interpolation des individus voisins. Ces deux effets sont surtout problématiques lorsque l'on traite des populations fortement discontinues (Soulat, 2010). En pratique, on préconise que la taille du réseau soit égale au nombre d'individus.

Informations extraites des SOM. Indirectement, lors de l'apprentissage, la méthode va réaliser un *clustering* de la population. Il est donc également possible d'extraire une classification des SOM.

Ainsi, les SOM tendent à regrouper des individus qui se ressemblent et à les positionner côte à côte sur les cartes. Cependant, dans certains cas, il peut arriver que deux zones soient contiguës sur les cartes, mais qu'elles présentent des discontinuités de caractéristiques. Afin de les mettre en évidence, la *U-matrix* est utilisée. Sur une carte,

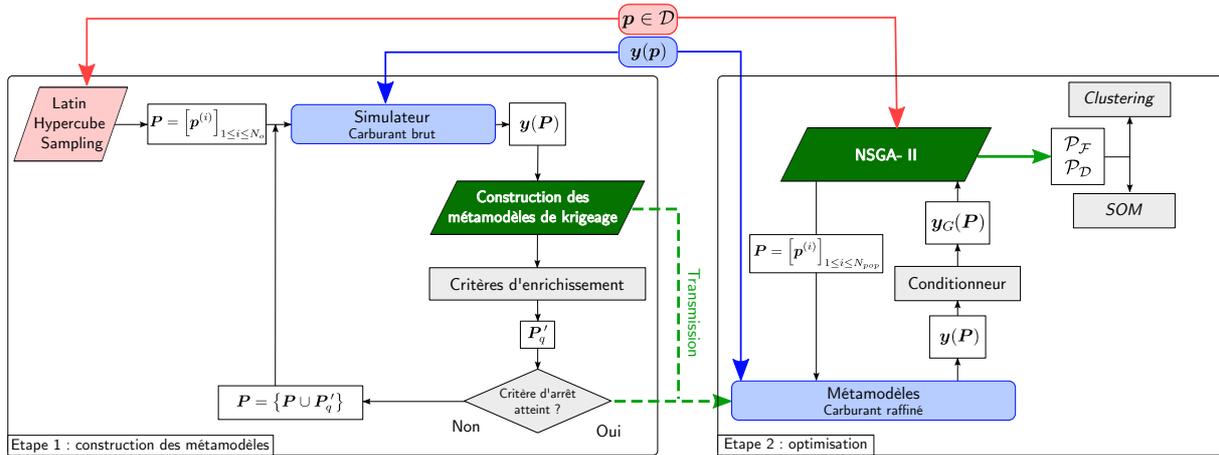


Figure 3.15 – Représentation schématique de l'articulation des différents outils de la chaîne d'optimisation.

de même type que les SOM, un critère basé sur la distance euclidienne (au sens des caractéristiques : paramètres et objectifs) entre les neurones voisins est calculé. Les frontières entre les groupes les plus différents sont caractérisées par une grande valeur de ce critère. La U -matrix de la Figure 3.14 fait apparaître une zone très différente caractérisée par une faible valeur du paramètre 1. Il est alors possible d'identifier rapidement les différentes zones et de déterminer des solutions singulières.

Enfin, il est possible de visualiser rapidement les corrélations entre les paramètres et les objectifs. L'identification des paramètres critiques est également possible. C'est le cas, par exemple, du paramètre 1 de la Figure 3.14, qui si l'on cherche à maximiser l'objectif 1, doit nécessairement avoir une valeur maximale, les zones rouges des deux cartes étant topologiquement similaires.

3.5 Synthèse des outils

Dans ce chapitre, le cadre de l'optimisation multiparamétrique et multiobjectif a été formalisé. Une liste non exhaustive d'outils permettant de résoudre les problèmes d'optimisation multiobjectifs a été introduite. Dans les présents travaux, ont été retenus :

- l'algorithme génétique NSGA-II en tant que moteur d'optimisation, pour sa capacité à traiter directement les problèmes multiobjectifs via une population et pour ses opérateurs génétiques conduisant à une approximation fidèle et bien répartie du front de Pareto ;
- un métamodèle de krigeage en tant que carburant raffiné, associé à un solveur de mécanique des fluides, pour sa base stochastique permettant d'estimer la vraisemblance de l'approximation et fournissant un cadre à de nombreux critères d'enrichissement.

L'inconvénient du NSGA-II, qui demande de nombreuses évaluations d'individus est donc contrebalancé par le faible coût de réponse du métamodèle. Cela permet donc de pouvoir utiliser un solveur de mécanique des fluides en tant que carburant brut. Des méthodes et des critères, qui permettent de s'assurer de la convergence de l'algorithme génétique, ont été présentés.

Deux types d'outils d'analyse ont également été introduits. Le *clustering* permet de condenser l'information portée par l'ensemble des individus du set et du front de Pareto, afin de mettre en évidence un nombre fini de formes optimales. Les *Self-Organizing Maps* génèrent une visualisation plus simple de l'ensemble des individus et des informations qu'ils portent.

L'articulation des méthodes est illustrée sur la Figure 3.15. L'optimisation est réalisée en deux étapes. La première consiste à construire les métamodèles du carburant brut (le solveur de mécanique des fluides). Pour cela, une méthode d'échantillonnage par hypercube latin (LHS) est utilisée conjointement à une stratégie d'enrichissement, reposant sur plusieurs critères. Dans la seconde étapes, les métamodèles sont ensuite utilisés en tant que carburants raffinés pour alimenter le moteur d'optimisation NSGA-II. Les résultats de l'optimisation sont analysés par SOM et *clustering*.

Les présents travaux utilisent une implémentation en C++ de l'algorithme NSGA-II. Elle permet l'intervention d'un carburant extérieur (dans ce cas le métamodèle) via un appel de routines. Les données sont échangées au travers de fichiers texte. Les méthodes d'échantillonnage par hypercube latin et de krigeage ont l'avantage d'être déjà implémentées dans de nombreux outils,²⁷ parmi lesquels le code de statistique R (R Core Team, 2012). C'est celui-ci qui a été utilisé dans les présents travaux via les packages `DiceKriging` et `DiceOptim` pour le krigeage (Roustant et al., 2012) et `DiceDesign` pour les plans d'expériences (Dupuy et al., 2015). Le package `GPareto` (Binois and Picheny, 2016) a également été utilisé pour les critères multiobjectifs. La mesure de l'hypervolume est réalisée grâce au code statistique R. Le *clustering* utilise le package `scikit-learn` de Python (Pedregosa et al., 2011) et les *Self-Organizing Maps* reposent également sur une implémentation Python, grâce au package `sompy`²⁸.

27. comme MATLAB (MATLAB, 2010) ou OpenTURNS (Baudin et al., 2015)

28. <https://github.com/sevamoo/SOMPY>

Deuxième partie

Contributions

CHAPITRE 4

Présentation des configurations de test de l'étude

Ce chapitre décrit les différentes configurations utilisées dans les présents travaux. L'objet technologique de base est un échangeur air/eau à plaques munies de perturbateurs. Deux configurations 2D définies à l'échelle locale (traitées par CFD) et deux configurations multiéchelles (une traitée par une méthode 0D et une par CFD) sont présentées. L'approche CFD est validée dans ce chapitre.

Sommaire

4.1	Introduction	86
4.2	Présentation de la configuration ONESIDE	87
4.2.1	Géométrie	87
4.2.2	Mise en données	87
4.2.3	Post-traitement des résultats	90
4.2.4	Maillage	92
4.2.5	Validation expérimentale	95
4.3	Présentation de la configuration TWOSIDE	100
4.3.1	Géométrie	100
4.3.2	Mise en données	101
4.3.3	Maillage	102
4.3.4	Post-traitement	103
4.3.5	Modélisation de l'encrassement	104
4.4	Présentation de la configuration ECH-0D	110
4.4.1	Caractéristiques de l'échangeur	111
4.4.2	Modélisation thermo-hydraulique	111
4.5	Présentation de la configuration ECH-3D	114
4.5.1	Géométrie de l'échangeur	114
4.5.2	Mise en données	115
4.5.3	Étude de sensibilité au maillage de la partie distribution . . .	120
4.5.4	Post-traitement pour l'optimisation	120

4.1 Introduction

Le Chapitre 2 a permis de mettre en évidence les problématiques liées à l'optimisation de forme des échangeurs de chaleur. La "forme" de l'intensificateur a un impact important sur les performances thermohydrauliques de l'échangeur. Le Chapitre 3 a présenté et justifié l'emploi des outils mathématiques permettant de réaliser l'optimisation.

Le cas de base d'un **échangeur air/eau à plaques et perturbateurs, à courants croisés** est considéré dans les présents travaux. Il concentre les différentes problématiques abordées précédemment, à savoir : la forme des intensificateurs, l'aspect multiéchelle, les effets de la distribution et les effets de l'encrassement. L'étude de cet échangeur caractéristique est menée à travers quatre configurations de complexité croissante, deux locales et deux multiéchelles :

- configuration ONESIDE, qui représente une configuration classique, en deux dimensions, d'un perturbateur (*rib*) transversal à l'écoulement. Des études expérimentales existent et permettent de valider la modélisation. Cette configuration est utilisée pour tester différents simulateurs.
- configuration TWOSIDE, qui est une complexification de la configuration ONE-SIDE, constituée de deux *ribs* opposés et alternés, plus proche d'un cas réel d'intensificateur. Les résultats permettent de construire des corrélations pour l'échangeur complet.
- configuration ECH-0D, qui représente un échangeur air/eau à plaques et perturbateurs, à courants croisés idéalisé (soumis aux hypothèses de la Section 2.2.2) alimenté par les corrélations de la configuration TWOSIDE.
- configuration ECH-3D, qui ajoute la prise en compte d'un distributeur à la configuration précédente.

Ce chapitre présente ces quatre configurations et les approches de modélisation retenues.

Code_Saturne (EDF R&D, 2018a) est le solveur de mécanique des fluides utilisé pour simuler la majorité des configurations. Il s'agit d'un code *open-source* généraliste, massivement parallèle, qui peut traiter des écoulements monophasiques, laminaires ou turbulents, incompressibles ou faiblement dilatables. Il se base sur une discrétisation spatiale de type volumes finis colocalisés (la pression, la vitesse et les grandeurs scalaires sont résolues au même point) au centre des cellules. Différents modules prenant en compte des physiques particulières sont disponibles. Le code est également adapté pour des simulations avec transfert thermique pouvant inclure un couplage thermique fluide/solide. L'Annexe A.3 décrit plus précisément ce solveur.

Lors de la mise en œuvre de simulations numériques des fluides, certaines "bonnes pratiques" sont recommandées (Wintergerste et al., 2002; ERCOFTAC, 2000). Celles-ci permettent d'avoir confiance dans le résultat obtenu. Parmi les considérations de ces "bonnes pratiques" on peut mentionner le choix du domaine de simulation et la pertinence des conditions aux limites associées, la réalisation d'un maillage adéquat et le choix de modèles physiques pertinents (pour la turbulence notamment). Dans ce chapitre, les choix mis en œuvre sont présentés pour chaque configuration et certaines comparaisons sont réalisées pour le modèle de turbulence et le maillage, sur la base de la configuration ONESIDE.

4.2 Présentation de la configuration ONESIDE

Les perturbateurs d'écoulement, qui seront nommés par leur terme anglais *ribs* par la suite, ont été étudiés expérimentalement (Han et al., 1978; Rau et al., 1998; Wang and Sunden, 2005) et numériquement (Iaccarino et al., 2002; Sewall et al., 2006; Keshmiri et al., 2016). Ils sont généralement de section carrée et positionnés de manière périodique et transversalement à l'écoulement pour générer des perturbations de la couche limite dynamique et ainsi intensifier le transfert thermique (comme le montre la Figure 4.1(a)).

Les objectifs de cette première configuration sont :

- de valider la modélisation thermohydraulique, réalisée avec *Code_Saturne*. ;
- de fournir une simulation simple permettant de tester la robustesse de la méthode d'optimisation à des changements de simulateur.

Cette section présente la géométrie, les paramètres et certains résultats de la simulation numérique ainsi que leurs comparaisons à des résultats expérimentaux.

4.2.1 Géométrie

Dans cette configuration, un canal en deux dimensions de hauteur H est considéré. Les perturbateurs sont positionnés sur la paroi inférieure, la paroi supérieure étant laissée lisse. Les *ribs*, visibles sur la Figure 4.1(a), ont une section trapézoïdale définie par la hauteur h_{rib} , la largeur en pied E et la largeur en tête e . La hauteur du *rib* est normalisée par la hauteur du canal, que l'on prendra égale à l'unité ; les largeurs le sont par le diamètre hydraulique d'un canal plan $D_H = 2H$. Les *ribs* se répètent le long du canal avec un pas (*pitch*) L . Le domaine solide est également considéré (en gris Figure 4.1(b)) avec une épaisseur de plaque constante égale à $e_p = 0.05H$.

L'objectif étant d'optimiser la forme de ce perturbateur, une plage de variation pour chaque paramètre de la section est définie, la hauteur du canal et le pas entre *ribs* restant constants :

$$H = 1 \quad (4.1)$$

$$L/H = 1.8 \quad (4.2)$$

$$e_p/H = 0.05 \quad (4.3)$$

$$h_{rib}/H \in [0.05; 0.3] \quad (4.4)$$

$$e/2H \in \left[0.05 \frac{L}{2H}; 0.7 \frac{L}{2H} \right] \quad (4.5)$$

$$E/2H \in \left[0.9 \frac{e}{2H}; 0.8 \frac{L}{2H} \right] \quad (4.6)$$

L'angle ψ sera utilisé pour l'analyse des résultats car plus représentatif. Il est défini comme :

$$\psi = \tan^{-1} \left(\frac{E - e}{2h_{rib}} \right) + \frac{\pi}{2} \quad (4.7)$$

4.2.2 Mise en données

La géométrie étant périodique, le domaine de calcul se limite à un unique motif de longueur L , comme indiqué par la ligne discontinue rouge de la Figure 4.1(a). Il se compose

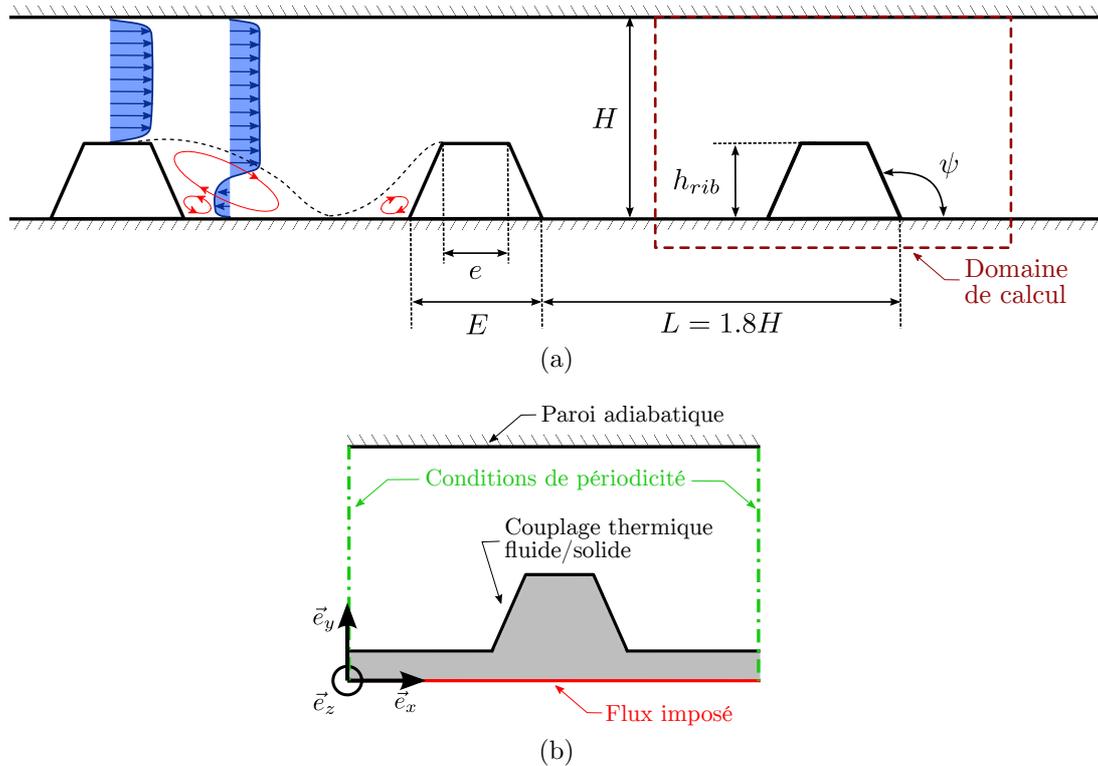


Figure 4.1 – Représentation schématique (non à l'échelle) de la configuration ONESIDE - (a) Dimensions des *ribs* et topologie typique de l'écoulement - (b) Conditions appliquées aux limites du domaine de calcul, la thermique dans le solide (gris) est simulée et un couplage avec le fluide (blanc) est réalisé.

d'un domaine fluide (air) et d'un domaine solide (acier). On considère que le *rib* et la plaque sont une seule et même pièce. La simulation cherche à déterminer les performances thermohydrauliques du motif une fois le régime permanent atteint.

4.2.2.1 Écoulement et propriétés physiques

La simulation est réalisée en similitude. Les propriétés sont donc normalisées en conséquence. L'hypothèse de périodicité utilisée conduit à considérer la température comme un scalaire passif et les propriétés du fluide en sont donc indépendantes¹. On se place à une vitesse de l'écoulement de référence, à une masse volumique du fluide et à une capacité thermique massique égales à l'unité. La viscosité et la conductivité thermique du fluide sont définies telles que la similitude pour les nombres de Reynolds et de Prandtl soit assurée. Pour le solide, la conductivité thermique et la capacité thermique sont normalisées et respectent le même ratio solide/fluide que les propriétés réelles. Comme un état permanent est recherché, la masse volumique du solide sera prise égale à celle du fluide². Les différentes propriétés sont résumées dans le Tableau 4.1.

Le nombre de Reynolds est défini par rapport au diamètre hydraulique et à la vitesse

1. Si l'on considère un échangeur air/eau possédant une efficacité de 0.8 et dont les températures d'entrée (chaud et froid) sont respectivement de 553 K et 280 K, la variation de température entrée/sortie pour le coté chaud (air) est de 150 K. Les propriétés physiques varient alors d'environ 30% entre l'entrée et la sortie. Ainsi cette hypothèse est relativement forte. Toutefois, elle est largement utilisée dans l'industrie, notamment dans la méthode ε -NUT (voir Section 2.2.2.1).

2. Cette hypothèse a l'avantage d'assurer la stabilité du solveur.

Variable	Symbole	Unité	Valeur
Fluide			
Vitesse	U_{ref}	m.s^{-1}	1
Nombre de Reynolds	Re_{DH}	[–]	20 000
Masse volumique	ρ_h	kg.m^{-3}	1
Viscosité	μ_h	Pa.s	$\frac{\rho U_{ref} 2H}{Re_{DH}}$
Capacité thermique massique	$c_{p,h}$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	1
Nombre de Prandtl	Pr	[–]	0.71
Conductivité thermique	λ_h	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$\frac{c_p \mu}{Pr}$
Solide			
Masse volumique	ρ_s	kg.m^{-3}	$1 \rho_h$
Capacité thermique massique	$c_{p,s}$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$0.4 c_{p,h}$
Conductivité thermique	λ_s	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$6\,000 \lambda_h$

Tableau 4.1 – Propriétés physiques pour la configuration ONESIDE.

de référence de l'écoulement comme :

$$Re_{DH} = \frac{\rho U_{ref} 2H}{\mu} \quad (4.8)$$

Il fixé à 20 000. Si l'on considère un échangeur à plaques composé de 12 canaux de 0.40 m de largeur, et dont l'air circule à 550 K, cela équivaut à un débit masse de 1.5 kg.s^{-1} , correspondant à une circulation standard pour ce type d'échangeur. D'autre part, il reste proche du nombre de Reynolds de l'écoulement utilisé par Wang and Sunden (2005) dans leur expérience et qui servira de cas de validation.

4.2.2.2 Conditions aux limites

La Figure 4.1(b) résume les conditions aux limites appliquées au domaine de calcul qui sont décrites dans ce paragraphe.

Parois et interfaces. La paroi inférieure est soumise à une densité de flux de chaleur égale à $\varphi = 1 \text{ W.m}^{-2}$ tandis que la paroi supérieure est soumise à une condition de flux nul (adiabatique). L'interface entre le domaine fluide et le domaine solide est réalisée via une condition de couplage thermique, propre à *Code Saturne* assurant la conservation du flux de chaleur et la continuité de la température (voir Annexe A.3). Une condition d'adhérence est appliquée à la paroi supérieure et à l'interface.

Périodicité. L'utilisation d'un seul motif requiert une condition de périodicité dans la direction de l'écoulement (\vec{e}_x), qui va de la gauche vers la droite. L'hypothèse de périodicité pour le champ de vitesse est valable après cinq motifs environ (Rau et al., 1998). Les champs de pression et de température nécessitent un changement de variable faisant apparaître un terme source (voir Annexe A.4) pour être considérés périodiques

(Patankar et al., 1977). Ainsi la simulation repose sur la composante périodique de ces deux grandeurs. La température dans le solide est également soumise à cette condition de périodicité. Une étape de "dé-périodisation" est nécessaire avant le post-traitement.

Symétrie. *Code_Saturne* étant un code volumes finis dont les grandeurs sont résolues au centre des cellules, il nécessite une cellule en trois dimensions. Les simulations 2D sont possibles en ne considérant qu'une seule cellule dans la direction \vec{e}_z et en appliquant des conditions de symétrie aux faces de normale $\vec{n} = (0, 0, 1)$. La dimension des cellules dans cette direction est prise égale à 1. Ainsi pour la suite, on ne considère pas cette dimension.

4.2.2.3 Modèles de turbulence

Comme indiqué dans la Section 2.2.3.2, deux modèles de turbulence sont considérés pour les tensions de Reynolds : le $k - \omega$ SST et le modèle $B1 - \overline{v^2}/k$. Aucune loi de paroi n'est utilisée. Les flux thermiques turbulents sont modélisés par le SGDH avec un nombre de Prandtl turbulent de 1.0.

4.2.2.4 Paramètres numériques

Bien que la simulation cherche à reproduire un comportement stationnaire, le calcul est réalisé en utilisant un schéma temporel instationnaire pour des questions de stabilité. Le pas de temps, constant en temps et espace, est pris égal à $\Delta t = 0.005$ s. Il a été déterminé afin d'assurer que le nombre de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) soit inférieur à 10. Le nombre de pas de temps est fixé de sorte à atteindre un état stationnaire.

La résolution des variables de pression, vitesse et grandeurs turbulentes utilise les solveurs linéaires par défaut³. Pour la température, une méthode de gradient biconjugué stabilisée (BICGStab2) est utilisée, afin d'assurer la stabilité numérique du couplage monolithique fluide/solide.

Les termes convectifs, pour toutes les équations, sont traités par un schéma spatial centré. Les gradients sont calculés par une méthode itérative (EDF R&D, 2018b, pp. 34). Un algorithme SIMPLEC est utilisé pour le couplage vitesse-pression.

4.2.3 Post-traitement des résultats

L'optimisation repose sur des fonctions objectif scalaires. Il est donc important d'extraire pour chaque simulation une ou des grandeurs représentatives du comportement thermohydraulique du motif périodique.

La première étape du post-traitement des résultats de la simulation consiste à "dé-périodiser" les champs de température et de pression. Les deux grandeurs d'intérêt, que sont le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge, sont ensuite extraites des simulations.

Étant donné que les simulations sont réalisées en quasi-2D avec une dimension selon \vec{e}_z égale à l'unité, la notion de surface est ramenée à la longueur ou à la hauteur du motif. Le nombre de Nusselt, ramené au pas L du motif, se calcule comme :

$$Nu = \frac{\Phi D_H}{\lambda_h L (\bar{T}_w - \frac{1}{2} (\bar{T}_i + \bar{T}_o))} \quad (4.9)$$

3. Méthode de Jacobi pour la vitesse et les grandeurs turbulentes et méthode de gradient conjugué pour la pression.

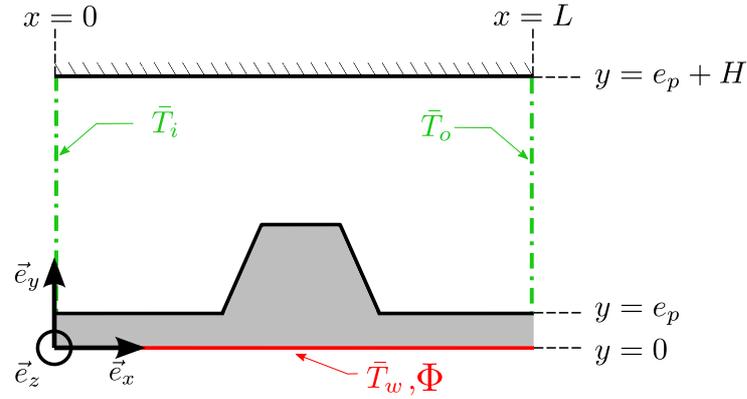


Figure 4.2 – Représentation schématique des informations extraites de la simulation pour le calcul du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge.

avec Φ le flux imposé et \bar{T}_w la température moyenne à la limite inférieure du domaine de calcul (en rouge sur la Figure 4.2). Cette moyenne est pondérée par la surface :

$$\bar{T}_w = \frac{1}{L} \int_0^L T_w(x, y = 0) dx \quad (4.10)$$

\bar{T}_i et \bar{T}_o sont les températures débitantes moyennes en entrée et sortie du motif (en vert sur la Figure 4.2). Elles se calculent comme :

$$\bar{T}_i = \frac{\int_{e_p}^{e_p+H} \rho_h u_x(x = 0, y) T(x = 0, y) dy}{\int_{e_p}^{e_p+H} \rho_h u_x(x = 0, y) dy} \quad (4.11)$$

$$\bar{T}_o = \frac{\int_{e_p}^{e_p+H} \rho_h u_x(x = L, y) T(x = L, y) dy}{\int_{e_p}^{e_p+H} \rho_h u_x(x = L, y) dy} \quad (4.12)$$

La différence de température étant prise entre la paroi inférieure du solide et le cœur de l'écoulement pour le calcul du nombre de la Nusselt, celui-ci comprend également la contribution de la conduction dans la plaque.

Le coefficient de perte de charge se calcule par :

$$C_f = \frac{\Delta P_{i,o}}{0.5 \rho_h U_{ref}^2} \frac{D_H}{L} \quad (4.13)$$

avec $\Delta P_{i,o}$ la variation de pression statique entre l'entrée et la sortie. Cette donnée est directement accessible dans *Code_Saturne* car elle est une conséquence de la périodicité. U_{ref} , la vitesse débitante moyenne, se calcule comme :

$$U_{ref} = \frac{1}{H} \int_{e_p}^{e_p+H} u_x(x = 0, y) dy \quad (4.14)$$

Le nombre de Nusselt est normalisé par une valeur de référence $Nu_0 = 43.3$, issue d'une simulation d'un canal lisse dans les mêmes conditions. De même, le coefficient de perte de charge est normalisé par un coefficient de référence $C_{f0} = 0.007$.

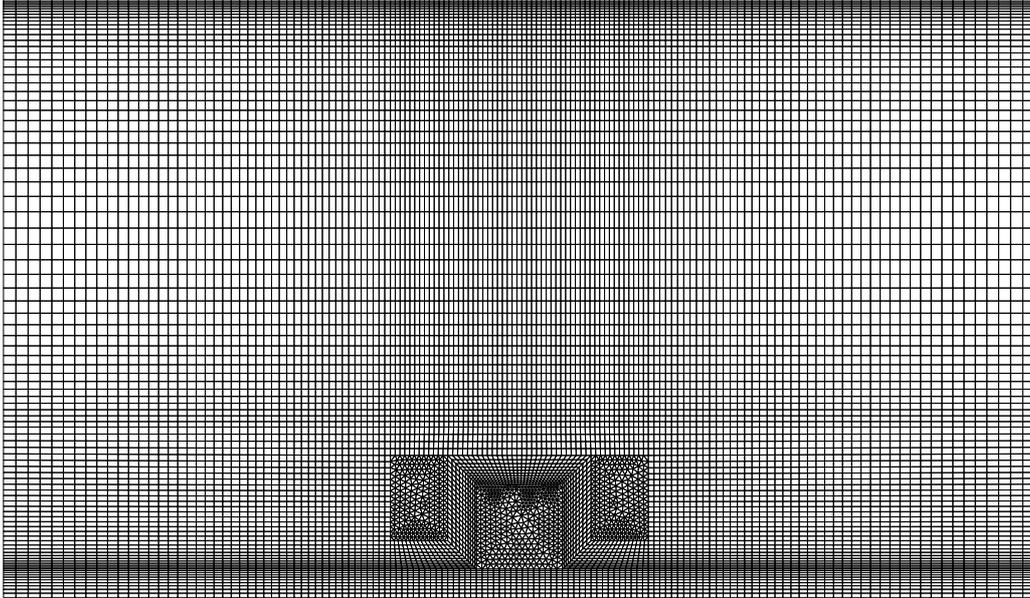


Figure 4.3 – Exemple de maillage de la configuration ONESIDE pour le cas 5. Il s'agit du maillage obtenu avec la stratégie 2, conduisant à 13 914 cellules.

Cas	h_{rib}/H	$e/2H$	$E/2H$	N_{cell}
1	0.1610	0.5255	0.6671	131 550
2	0.2484	0.4460	0.4761	131 570
3	0.2999	0.3692	0.4579	136 550
4	0.3000	0.1716	0.2709	118 070
5	0.1500	0.0750	0.0750	87 250

Tableau 4.2 – Dimensions normalisées des cinq cas utilisés dans l'étude de sensibilité au maillage et nombre de cellules du maillage de la stratégie 9.

4.2.4 Maillage

Le maillage utilisé est un maillage *Bas-Reynolds*, dont le premier point de calcul se trouve dans la sous-couche visqueuse. Comme le montre la Figure 4.3, il est constitué d'hexaèdres dans la majorité du domaine de calcul et de prismes dans les zones qui seront soumises à des déformations importantes (*rib* et alentours) lors du changement de forme.

Afin de respecter les démarches des "bonnes pratiques", une étude de sensibilité au maillage est généralement réalisée afin de rendre les résultats de la simulation le plus indépendants possible de la discrétisation spatiale utilisée. Cependant dans le cadre de l'optimisation, il est invraisemblable de la mener pour toutes les formes possibles de l'espace des paramètres. Ainsi, il a été décidé dans un premier temps, d'utiliser une stratégie de maillage conduisant à une discrétisation spatiale représentant un bon compromis entre précision et temps de calcul pour réaliser les simulations. Pour chaque simulation, la valeur maximale de y^+ a été contrôlée comme indicateur de la qualité du maillage⁴. Une fois le métamodèle construit et l'optimisation réalisée, la méthode de *clustering* a mis en évidence quatre formes, sur lesquelles l'étude de sensibilité a été réalisée *a posteriori*. Cela permet de s'assurer de la fiabilité des simulations sur plusieurs formes représentatives et donc de pouvoir plus facilement généraliser les conclusions.

4. la valeur reste inférieure à 2.

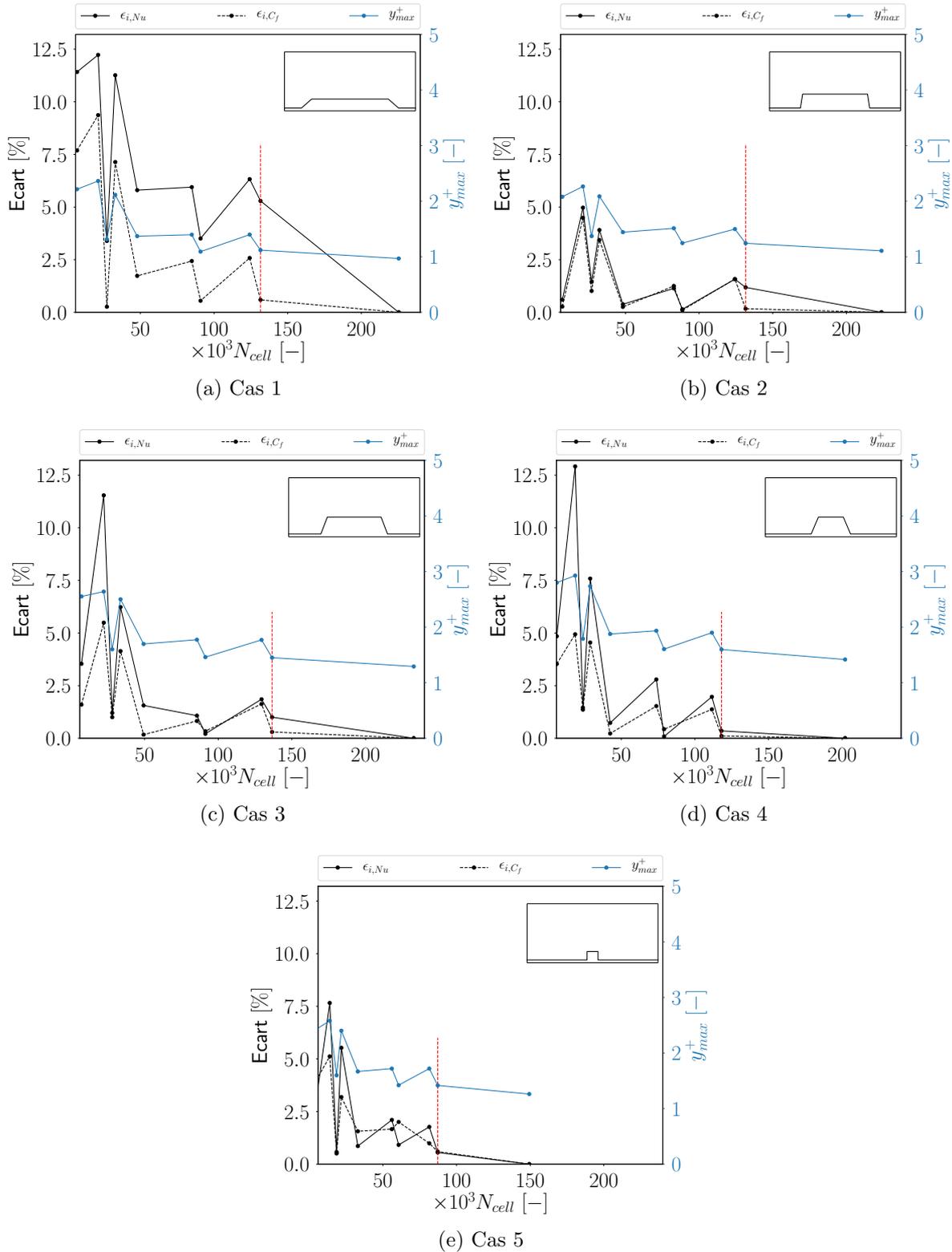


Figure 4.4 – Étude de sensibilité au maillage pour les simulations utilisant le modèle de turbulence $k - \omega$ SST pour les cinq formes. L'évolution des écarts $\epsilon_{i,Nu}$ (trait noir continu) et de ϵ_{i,C_f} (trait noir pointillé) en fonction du nombre de cellules du maillage est représentée sur l'axe de gauche. L'axe de droite représente l'évolution de y_{max}^+ (en bleu). Le trait pointillé rouge représente la stratégie de maillage (n° 9) qui a été utilisée pour l'optimisation. La forme du *rib* est illustrée en haut à droite.

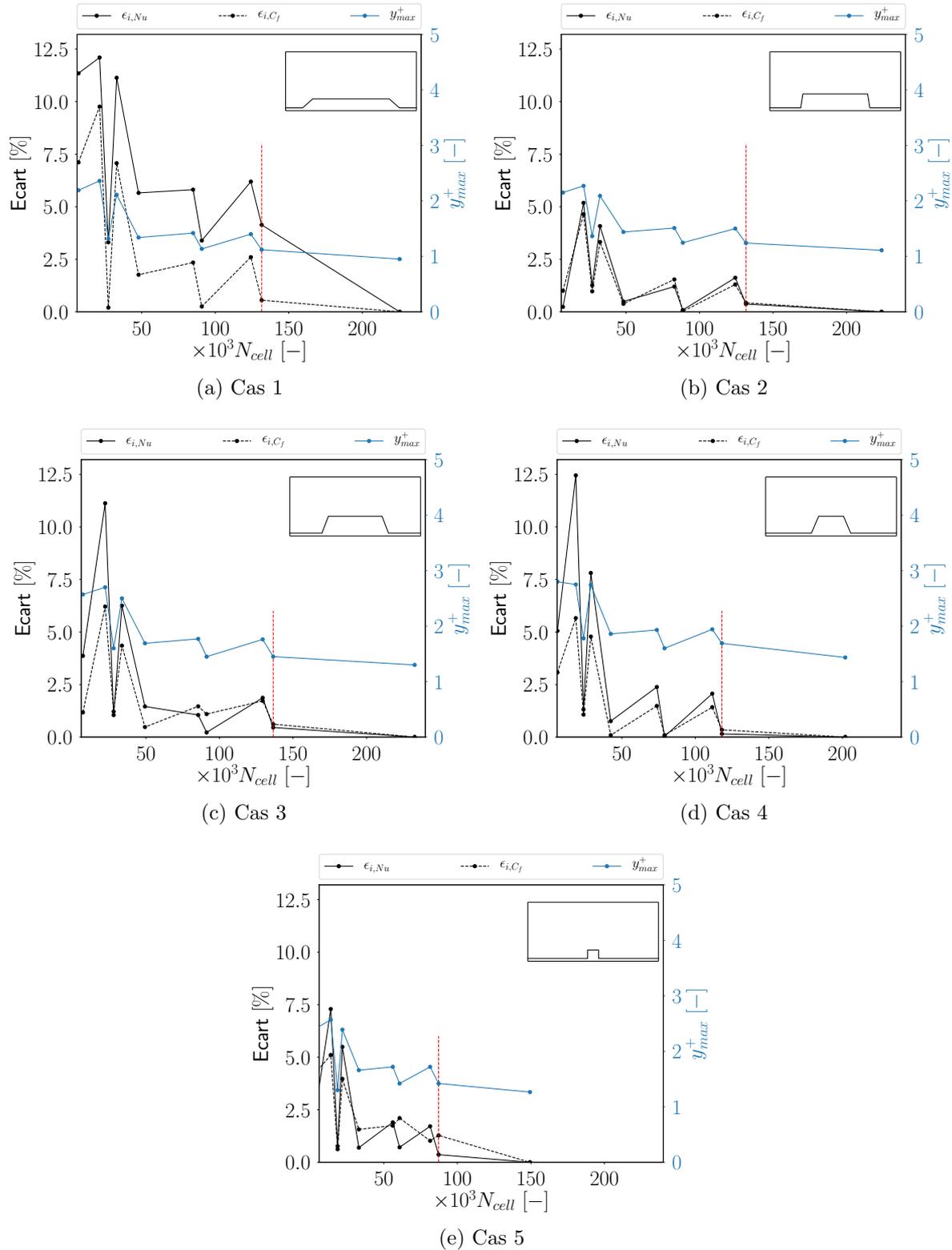


Figure 4.5 – Étude de sensibilité au maillage pour les simulations utilisant le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$ pour les cinq formes. L'évolution des écarts $\epsilon_{i,Nu}$ (trait noir continu) et de ϵ_{i,C_f} (trait noir pointillé) en fonction du nombre de cellules du maillage est représentée sur l'axe de gauche. L'axe de droite représente l'évolution de y_{max}^+ (en bleu). Le trait pointillé rouge représente la stratégie de maillage (n° 9) qui a été utilisée pour l'optimisation. La forme du *rib* est illustrée en haut à droite.

Les quatre jeux de paramètres caractérisant les formes sont présentés dans le Tableau 4.2. Le dernier cas reprend la forme d'un des deux cas de validation (Wang et al., 2007). Pour l'étude, différentes tailles de cellule en proche paroi et au centre de l'écoulement ont été testées au travers de dix stratégies de maillage, numérotées dans l'ordre croissant du nombre de cellules.

L'étude de sensibilité a été menée pour des simulations utilisant les deux modèles de turbulence, dont les résultats sont visibles sur les Figures 4.4 et 4.5. Elle se concentre sur l'évolution du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge, en fonction du nombre de cellules du maillage. Les résultats sont exprimés comme l'écart, en pourcent, par rapport aux valeurs issues du maillage le plus fin (numéro 10), supposé être la référence. Ces écarts s'expriment pour la stratégie i comme :

$$\epsilon_{i,Nu} = \frac{|Nu_i - Nu_{10}|}{Nu_{10}} \quad (4.15)$$

$$\epsilon_{i,C_f} = \frac{|C_{f,i} - C_{f,10}|}{C_{f,10}} \quad (4.16)$$

L'évolution de la valeur maximale de y^+ est également analysée.

Les figures mettent en évidence une forte sensibilité des résultats à la valeur de y_{max}^+ : lorsqu'elle diminue, les écarts diminuent. La différence entre les stratégies 7 et 9 repose sur la diminution de la taille des cellules au centre de l'écoulement. Cette diminution influence peu la précision des résultats. Cela est cohérent car les phénomènes physiques prédominants se produisent en proche paroi. Certaines stratégies de maillage plus grossières conduisent à des écarts faibles, mais néanmoins non systématiques. Elles ne sont donc pas suffisamment robustes et peu adaptées dans le cadre de l'optimisation. Dans l'ensemble des cas présentés, la stratégie de maillage 9, utilisée pour l'optimisation, conduit à des écarts inférieurs⁵ à 2.5%, à une valeur de y_{max}^+ comprise entre 1 et 2 ainsi qu'à un comportement robuste quelle que soit la forme. Les deux modèles de turbulence présentent la même sensibilité au maillage.

4.2.5 Validation expérimentale

La validation d'une modélisation, par confrontation à des données expérimentales, est une étape indispensable lors de la réalisation de simulations. Cependant dans le cadre de l'optimisation de forme, il est impossible de réaliser une telle validation pour chaque forme. Il est courant d'utiliser une configuration de référence suffisamment représentative et de supposer que le comportement sera similaire pour l'ensemble des géométries explorées par l'optimisation.

Dans les présents travaux, deux études expérimentales analysant des performances thermohydrauliques d'un canal muni de perturbateurs sont utilisées. La première (Rau et al., 1998) traite de l'analyse thermique de la configuration et la seconde aborde les aspects aérodynamiques (Wang et al., 2007). Les travaux de Rau et al. (1998) sont régulièrement utilisés dans la littérature pour ce type de validation et ceux de Wang et al. (2007) présentent de nombreux éléments permettant d'analyser le champ aérodynamique.

5. Hormis pour le nombre de Nusselt du cas 1.

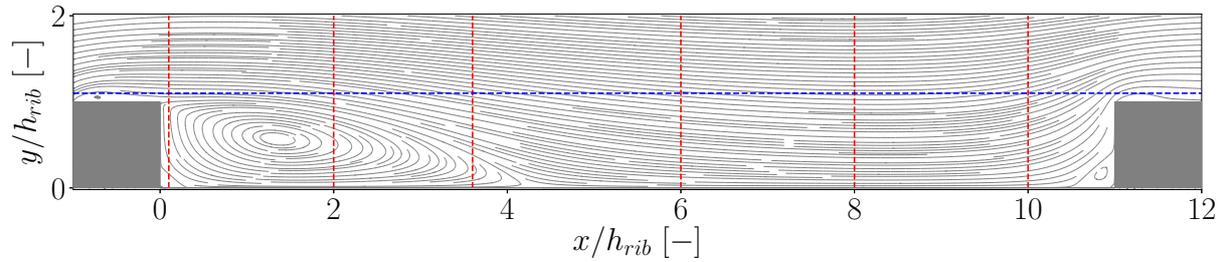


Figure 4.6 – Lignes de courant obtenues avec le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$. Les lignes pointillées rouges représentent les différentes positions axiales en lesquelles sont extraits les différents profils. La position verticale est indiquée par la ligne pointillée bleue.

4.2.5.1 Dispositifs expérimentaux

Dans leurs expériences, Wang et al. (2007) utilisent des perturbateurs de section carrée en plexiglas⁶ et de dimensions $7.5\text{mm} \times 7.5\text{mm}$. Ils les positionnent dans un canal carré de dimensions $50\text{mm} \times 50\text{mm}$. Ils font circuler de l'air à une vitesse telle que le nombre de Reynolds, basé sur le diamètre hydraulique d'une section carrée⁷, soit égal à 20 000. L'analyse aérodynamique repose sur des mesures de vélocimétrie à imagerie de particules (*Particle Image Velocimetry - PIV*). Cela leur permet d'obtenir les champs de vitesse instantanée et moyenne, ainsi que les gradients de vitesse. Les profils de vitesse en différentes positions, ainsi que des informations sur les grandeurs turbulentes (tensions de Reynolds) sont extraits. Les incertitudes de mesures sont estimées à $\pm 2\%$ pour la vitesse, $\pm 5\%$ pour les gradients de vitesse et $\pm 10\%$ pour les tensions de Reynolds.

Rau et al. (1998) utilisent également des perturbateurs de section carrée en plexiglas mais de dimensions $5\text{mm} \times 5\text{mm}$. Ils les positionnent dans un canal carré de dimensions $50\text{mm} \times 50\text{mm}$. L'air s'écoule à une vitesse telle que le nombre de Reynolds, basé sur le diamètre hydraulique d'une section carrée, soit égal à 30 000. L'analyse thermique vise à déterminer le nombre de Nusselt. Ils réalisent pour cela des mesures de température par thermographie à cristaux liquides (*Liquid Crystal Thermography*). Cela leur permet de visualiser le champ de température sur la paroi inférieure du canal grâce à une caméra et ainsi d'extraire un nombre de Nusselt local. Une condition de flux uniforme est appliquée sur la paroi inférieure du canal par l'intermédiaire d'une feuille en Inconel. Afin d'avoir un écoulement périodique, les mesures sont réalisées entre le septième et le huitième *rib*. Les incertitudes de mesures sur le nombre de Nusselt sont estimées à $\pm 5\%$.

4.2.5.2 Mise en données

Afin de valider la modélisation, une simulation en deux dimensions d'un motif de *rib* est réalisée. Les jeux de paramètres qui représentent les configurations expérimentales sont $h_{rib}/H = 0.10$, $e/2H = E/2H = 0.05$ avec $L/H = 1.2$ pour l'analyse thermique et $h_{rib}/H = 0.15$, $e/2H = E/2H = 0.075$ avec $L/H = 1.8$ pour l'analyse aérodynamique. Les simulations sont réalisées en similitude avec la mise en données décrite Section 4.2.2. Quelques modifications sont toutefois apportées pour se rapprocher de la configuration expérimentale.

6. Ils considèrent ainsi que les *ribs* ne participent pas à augmenter la surface d'échange et qu'ils créent uniquement des perturbations.

7. $D_H = H$.

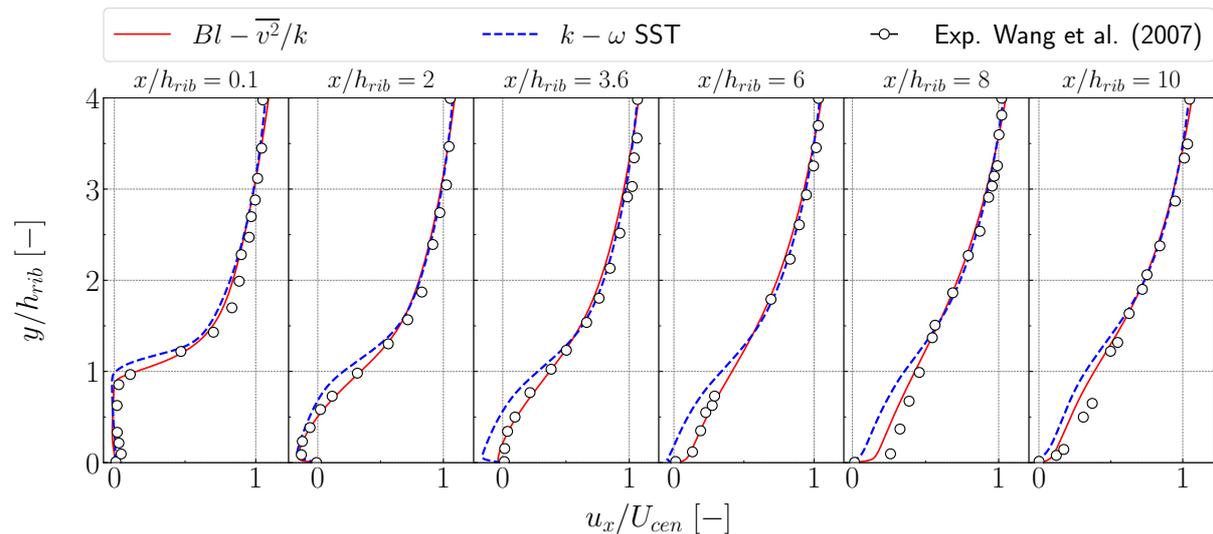


Figure 4.7 – Comparaison des profils de vitesse moyenne axiale pour différentes positions x/h_{rib} . Les données expérimentales sont issues de Wang et al. (2007) - Figure 5.

Le diamètre hydraulique d'un canal 2D est égal à $D_H = 2H$. Il existe donc un facteur 2 avec celui de l'expérience (canal carré). Afin de conserver une vitesse d'écoulement semblable, le nombre de Reynolds est donc fixé à 60 000 et 40 000. Le *rib* et la plaque ont des propriétés physiques différentes afin de représenter au mieux l'expérience. La conductivité du *rib* est fixée à $7\lambda_h$ afin de simuler le comportement du plexiglas, celle du solide restant inchangée.

Les maillages sont issus de la stratégie 9 présentée précédemment.

Le post-traitement des résultats de la simulation est conforme à celui utilisé pour extraire les informations des essais expérimentaux, dont le détail est disponible dans les deux articles (Rau et al., 1998; Wang et al., 2007).

4.2.5.3 Comparaison

Les résultats des simulations utilisant les deux modèles de turbulence et les résultats de l'expérience sont comparés. Afin de correspondre aux résultats expérimentaux, les dimensions sont normalisées par la hauteur du *rib*. Les lignes de courant de la Figure 4.6 mettent en évidence le phénomène majeur de décollement et de ré-attachement de la couche limite en aval du *rib*. La réduction de section induite par la présence de l'obstacle accélère le fluide et une zone de recirculation se forme. Les lignes pointillées en rouge et bleu mettent en évidence les différentes positions en lesquelles seront extraites les informations.

Les Figures 4.7 et 4.8 présentent, en plusieurs positions axiales, les profils de la vitesse moyenne axiale (u_x) et de la composante de cisaillement du tenseur des contraintes de Reynolds ($-u'v'$) normalisées grâce à une vitesse moyenne de référence U_{cen} , prise au centre de l'écoulement ($y/h_{rib} = 10/3$). Expérimentalement (Wang et al., 2007), le point de ré-attachement est observé à $x/h_{rib} = 3.6$. La présence d'une vitesse négative, pour cette position, montre que le modèle $k - \omega$ SST surestime la taille de la circulation. Le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ semble mieux la prédire. On distingue toutefois une légère vitesse négative à cette position, indiquant une légère surestimation. L'observation de la composante de cisaillement montre également une meilleure prédiction du $Bl - \overline{v^2}/k$. Numériquement,

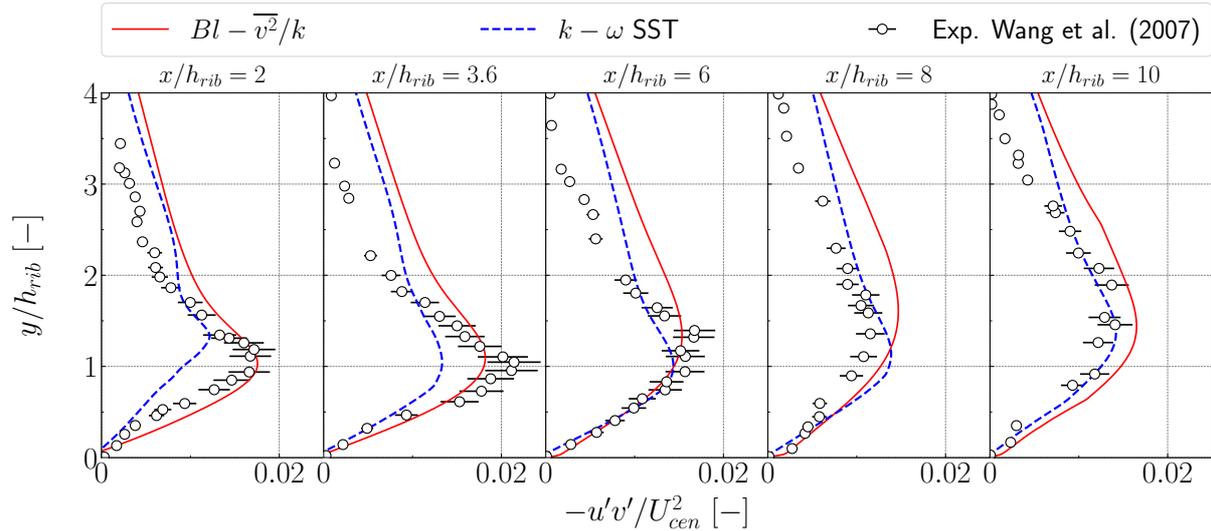


Figure 4.8 – Comparaison des profils de la composante de cisaillement du tenseur des contraintes de Reynolds pour différentes positions x/h_{rib} . Les données expérimentales sont issues de Wang et al. (2007) - Figure 10.

cette composante est reconstruite à partir des gradients de vitesse et de l'énergie cinétique turbulente grâce à l'hypothèse de Boussinesq pour les deux modèles. Le transport de la grandeur $\overline{v^2}$ ⁸ permet une meilleure estimation de l'anisotropie de la turbulence par rapport au modèle $k - \omega$ SST. Le $Bl - \overline{v^2}/k$ semble mieux prédire l'intensité et la position des extrema de cisaillement.

La Figure 4.9(a) montre le profil de la vitesse moyenne verticale à une hauteur $y/h_{rib} = 1.1$, mise en évidence par la ligne bleue en pointillés sur la Figure 4.6. Expérimentalement, le minimum est observé peu avant le point de ré-attachement. Le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ prédit correctement la position du minimum mais surestime son intensité. Comme précédemment, le modèle $k - \omega$ SST surestime la recirculation et localise le minimum de vitesse verticale à une valeur de x/h_{rib} plus grande.

Le coefficient de frottement à la paroi, calculé à partir du cisaillement à la paroi τ_w comme

$$\frac{\tau_w}{0.5\rho U_{cen}^2} \quad (4.17)$$

est visible sur la Figure 4.9(b). Le passage à zéro de ce coefficient indique le point de ré-attachement et expérimentalement, il se situe à $x/h_{rib} = 3.6$. Le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ l'estime à un peu plus de 4, ce qui confirme les résultats des Figures 4.6 et 4.7. De plus, il prédit correctement l'intensité du coefficient après ce point. En amont du ré-attachement, l'intensité du coefficient est trop importante mais la position du pic est bien évaluée. Le modèle $k - \omega$ SST surestime largement la position du point de ré-attachement et du pic. De plus, les intensités du coefficient sont également sous estimées.

La technique de mesure expérimentale utilisée par Rau et al. (1998) permet d'extraire le profil local du nombre de Nusselt à l'interface fluide/solide, visible sur la Figure 4.10, et de le comparer aux résultats des simulations réalisées avec les deux modèles de turbulence. Le nombre de Nusselt est normalisé par la valeur issue de la corrélation de Dittus-Boelter⁹.

8. qui est strictement similaire à la composante $v'v'$ du tenseur de Reynolds pour un canal plan (Manceau et al., 2000).

9. voir Eqn. (4.27)

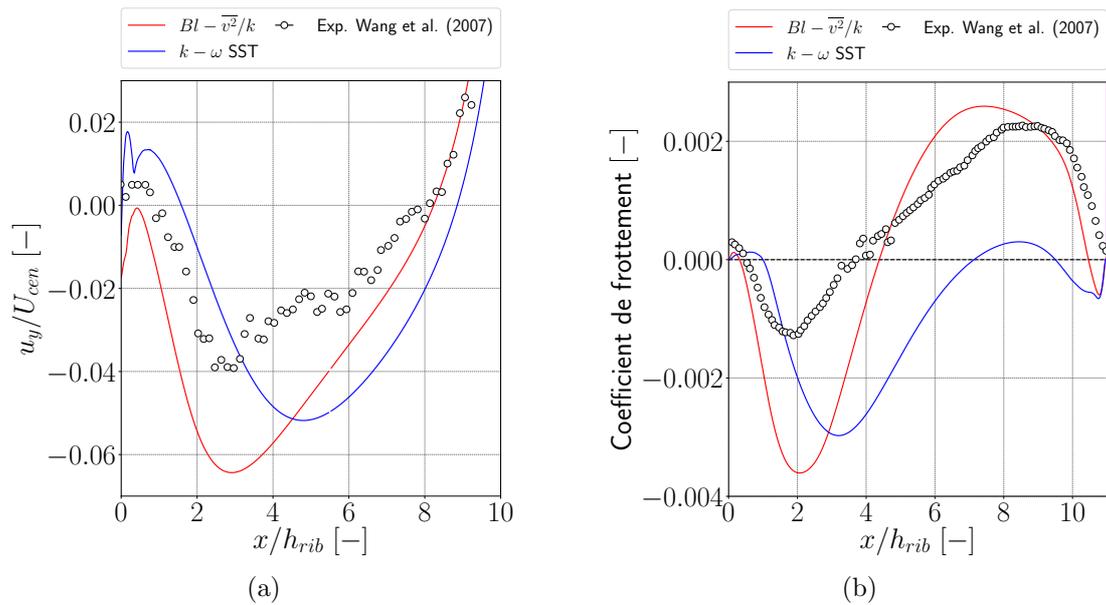


Figure 4.9 – (a) - Comparaison des profils de vitesse moyenne verticale pour $y/h_{rib} = 1.1$. Les données expérimentales sont issues Wang et al. (2007) - Figure 6. - (b) Comparaison des profils du coefficient de frottement à la paroi. Les données expérimentales sont issues Wang et al. (2007) - Figure 4.

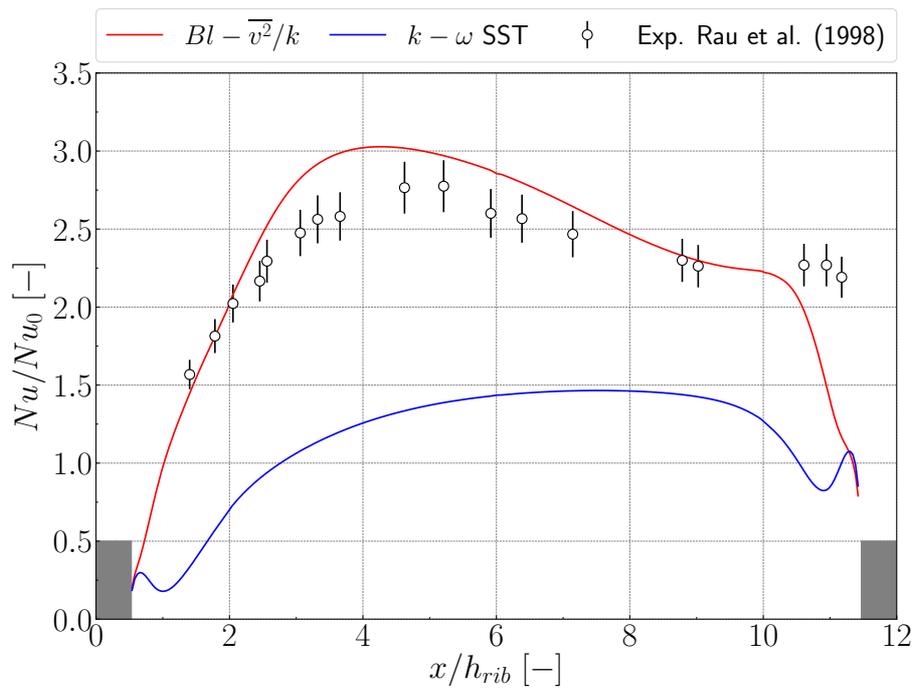


Figure 4.10 – Comparaison des profils du nombre de Nusselt local. Les données expérimentales sont issues de Rau et al. (1998) - Figure 15 avec $p/e = 12$.

La moins bonne prédiction du champ de vitesse et de l'anisotropie de la turbulence par le modèle $k - \omega$ SST conduit à une sous-estimation du nombre de Nusselt local. Le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ prédit correctement la zone de maximum, proche du point de ré-attachement. La légère surestimation peut s'expliquer par un effet 3D qui n'est pas pris en compte par la simulation. Les résultats sont clairement en faveur du $Bl - \overline{v^2}/k$, ce qui peut s'expliquer par le transport de la quantité $\overline{v^2}$ représentative de la composante normale du tenseur des contraintes de Reynolds. En effet, les travaux de Casarsa et al. (2002) montrent une bonne corrélation entre les évolutions de ces deux grandeurs selon \vec{e}_x .

4.2.5.4 Synthèse

Les résultats de cette comparaison, et les informations disponibles dans la littérature, permettent de conclure que le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ est approprié pour les cas de transferts thermiques présentant des décollements et rattachements de couches limites. Le modèle $k - \omega$ SST reste un choix standard qui donne des résultats acceptables. Il a l'avantage d'être plus robuste que le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$, critère très important dans le cadre de l'optimisation.

4.3 Présentation de la configuration TWOSIDE

La configuration précédente, bien que simple et documentée dans la littérature, n'est pas souvent rencontrée dans les échangeurs de chaleur. En pratique, il est plus courant de considérer des perturbateurs sur les deux parois (inférieure et supérieure) du canal, alternés ou alignés.

Cette seconde configuration étudie une disposition alternée. Elle a pour objectif principal de permettre la **construction de corrélations** pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge en fonction des paramètres de la forme et du nombre de Reynolds caractérisant l'écoulement. Ces corrélations sont ensuite utilisées dans deux modèles d'échangeur plus globaux reposant sur une méthode globale (configuration ECH-0D) ou sur des simulations numériques (configuration ECH-3D). De plus, cette configuration est utilisée pour simuler l'encrassement d'un intensificateur dans des conditions similaires à celles rencontrées dans les EGR coolers.

Cette section présente la géométrie, la mise en données pour la simulation numérique des fluides ainsi que le modèle d'encrassement mis au point durant les présents travaux de thèse.

4.3.1 Géométrie

Cette configuration considère elle aussi un canal en deux dimensions de hauteur H . Les *ribs* sont positionnés sur les parois inférieures et supérieures en alternance, comme l'illustre la Figure 4.11(a). Leur section est trapézoïdale, définie par la hauteur h_{rib} , la largeur en pied E et la largeur en tête e . L'épaisseur de la plaque est prise égale à $e_p = 1/14H$.

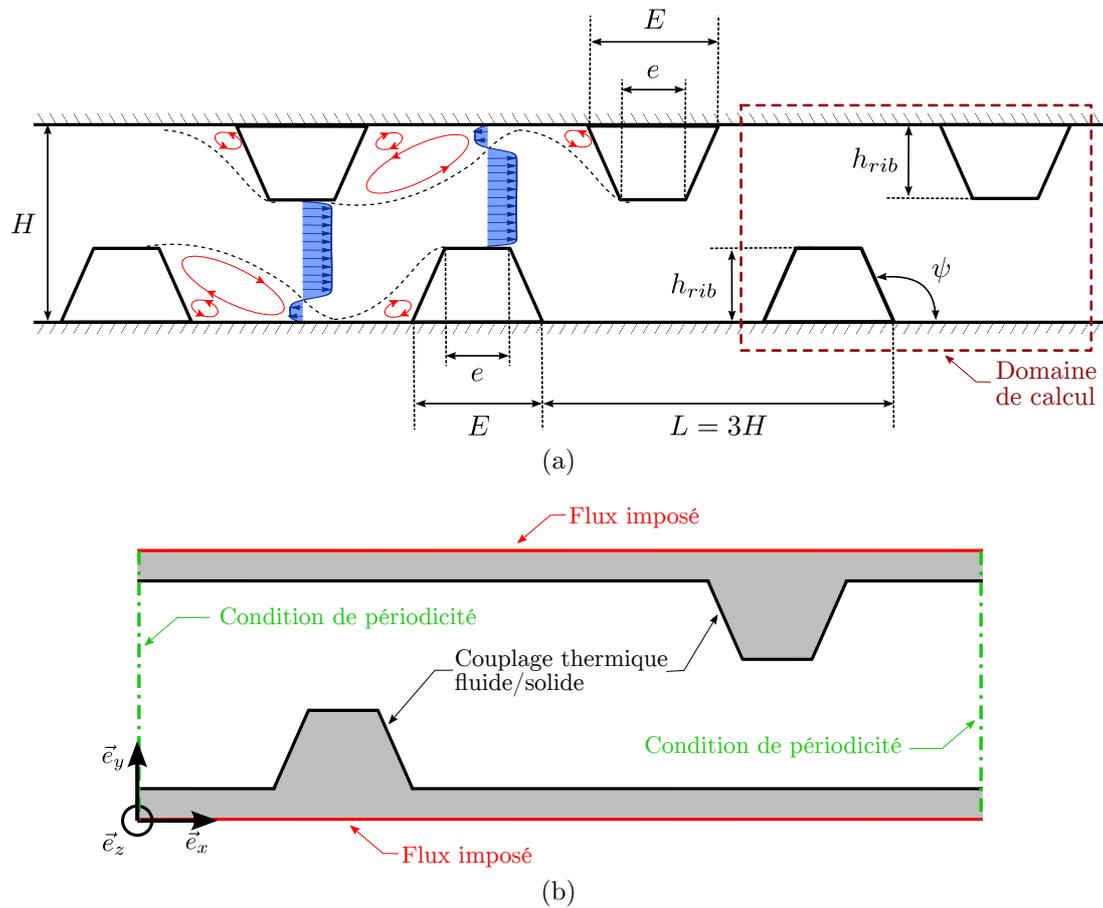


Figure 4.11 – Représentation schématique (non à l'échelle) de la configuration TWOSIDE - (a) Dimensions des *ribs* et exemple typique de l'écoulement - (b) Conditions appliquées aux limites du domaine de calcul, la thermique dans le solide (gris) est simulée et un couplage avec le fluide (blanc) est réalisé.

Les plages de variations pour les paramètres sont :

$$H = 1 \quad (4.18)$$

$$L/H = 3 \quad (4.19)$$

$$e_p/H = 1/14 \quad (4.20)$$

$$h_{rib}/H \in [0.05; 0.3] \quad (4.21)$$

$$e/2H \in \left[0.05 \frac{L}{4}; 0.6 \frac{L}{4} \right] \quad (4.22)$$

$$E/2H \in \left[0.9 \frac{e}{2H}; 0.7 \frac{L}{4} \right] \quad (4.23)$$

L'angle ψ est défini par l'Eqn. (4.7).

4.3.2 Mise en données

Comme précédemment, la géométrie est périodique et le domaine de calcul se limite à un motif alterné de longueur L mis en évidence par la ligne pointillée rouge de la Figure 4.11(a).

Variable	Symbole	Unité	Valeur
Fluide			
Vitesse	U_{ref}	m.s^{-1}	1
Nombre de Reynolds	Re_{D_H}	[–]	[3 000 ; 13 000]
Masse volumique	ρ_h	kg.m^{-3}	1
Viscosité	μ_h	Pa.s	$\frac{\rho U_{ref} 2H}{Re_{D_H}}$
Capacité thermique massique	$c_{p,h}$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	1
Nombre de Prandtl	Pr	[–]	0.7
Conductivité thermique	λ_h	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$\frac{c_p \mu}{Pr}$
Solide			
Masse volumique	ρ_s	kg.m^{-3}	1
Capacité thermique massique	$c_{p,s}$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$0.48 c_{p,h}$
Conductivité thermique	λ_s	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	$371.3 \lambda_h$

Tableau 4.3 – Propriétés de l'écoulement pour la configuration TWOSIDE.

4.3.2.1 Écoulement et propriétés physiques

La simulation est réalisée en similitude de nombre de Reynolds et de Prandtl. Les propriétés sont normalisées et résumées dans le Tableau 4.3. Dans cette configuration, le nombre de Reynolds varie entre 3 000 et 13 000 afin de construire la corrélation. Les propriétés physiques du solide sont celles de l'acier inoxydable.

4.3.2.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont représentées par la Figure 4.11(b). Les parois inférieure et supérieure sont soumises à une densité de flux de chaleur imposée $\varphi = 1 \text{ W.m}^{-2}$. Les autres conditions sont similaires à celles décrites Section 4.2.2.2.

4.3.2.3 Modèles de turbulence

Le modèle pour les tensions de Reynolds est le $Bl - \overline{v^2}/k$ sans loi de paroi. Les flux thermiques turbulents sont modélisés par le SGDH avec un nombre de Prandtl turbulent de 1.0.

4.3.2.4 Paramètres numériques

Les paramètres sont similaires à ceux décrits Section 4.2.2.4, hormis pour les termes convectifs des équations de transport des grandeurs turbulentes, qui sont traités par un schéma décentré amont de premier ordre (*upwind*) dans une optique de stabilité.

4.3.3 Maillage

Cette configuration dérivant directement de la configuration ONESIDE, les conclusions de l'étude de sensibilité au maillage ont été adoptées ici. La stratégie de maillage 9 a donc

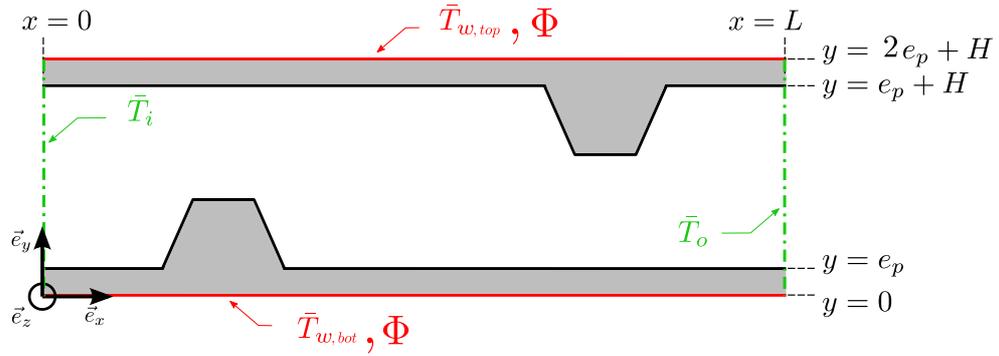


Figure 4.12 – Représentation schématique des informations extraites de la simulation pour le calcul du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge.

été appliquée. Comme précédemment, la valeur maximale de y^+ a été utilisée comme indicateur de qualité au cours des simulations.

4.3.4 Post-traitement

Le post-traitement des résultats des simulations est semblable à celui de la configuration ONESIDE.

Pour la configuration ONESIDE, bien que la simulation soit réalisée avec un schéma temporel instationnaire, le résultat final obtenu est constant en fonction du temps. Pour la présente configuration TWOSIDE, les interactions entre les recirculations fluides conduisent à des champs qui vont périodiquement varier au cours du temps. Afin de pouvoir extraire les valeurs scalaires des objectifs, les champs physiques sont moyennés en temps à partir du moment où le comportement périodique s'établit. Une attention particulière a été apportée afin de s'assurer que le nombre de périodes utilisées pour réaliser cette moyenne soit suffisant.

D'autre part, dans cette configuration, le changement de condition à la limite supérieure entraîne un changement dans le post-traitement du nombre de Nusselt. En utilisant les informations de la Figure 4.12, il s'exprime désormais comme¹⁰ :

$$Nu = \frac{2\Phi D_H}{\lambda_h 2L (\bar{T}_w - \frac{1}{2} (\bar{T}_i + \bar{T}_o))} \quad (4.24)$$

avec :

$$\bar{T}_w = \frac{\bar{T}_{w,bot} + \bar{T}_{w,top}}{2} \quad (4.25)$$

$$= \frac{1}{2L} \int_0^L [T_w(x, y = 0) + T_w(x, y = 2e_p + H)] dx \quad (4.26)$$

Les températures débitantes moyennes en entrée (\bar{T}_i) et en sortie (\bar{T}_o) sont données par les Eqns. (4.11) et (4.12). Comme précédemment, l'expression du nombre de Nusselt considère la conduction dans les demi-plaques inférieures et supérieures.

Les expressions du coefficient de perte de charge et de la vitesse débitante moyenne sont données par les Eqns. (4.13) et (4.14).

10. on rappelle que la dimension selon \vec{e}_z est égale à l'unité et que la notion de surface est ramenée à la longueur du motif

Le nombre de Nusselt est normalisé en utilisant la valeur issue de la corrélation de Dittus-Boelter (Bergman et al., 2011, pp. 544) :

$$Nu_0 = 0.023Re_{DH}^{0.8}Pr^{1/3} \quad (4.27)$$

et le coefficient de perte de charge est normalisé en utilisant la valeur issue de la corrélation de Blasius (Thulukkanam, 2013, pp 307) :

$$C_{f0} = 0.3164Re_{DH}^{-0.25} \quad (4.28)$$

4.3.5 Modélisation de l'encrassement

Cette configuration est également utilisée pour modéliser les effets d'un éventuel encrassement de l'intensificateur. Comme indiqué Section 2.1.4.3, les présents travaux se concentrent sur l'encrassement dans les EGR coolers. Il s'agit principalement d'un encrassement particulière piloté par la thermophorèse.

Le modèle présenté ici s'inspire des travaux de Paz et al. (2013). Il n'a pas pour objectif de proposer une description exhaustive de tous les phénomènes et d'être prédictif. En effet, l'élaboration d'un tel modèle est un travail à part entière. Il cherche simplement à décrire une tendance des mécanismes d'encrassement permettant l'application de la méthode d'optimisation et de conclure sur la robustesse de celle-ci¹¹. Ainsi, ne sont considérés que deux des phénomènes majeurs décrits Section 2.1.4.3 :

- la thermophorèse pour les mécanismes de dépôt ;
- l'arrachement par un bilan entre les forces aérodynamiques et les forces d'adhésion.

Cette section présente le modèle et son implémentation en vue d'une utilisation avec *Code_Saturne*.

4.3.5.1 Modèle d'encrassement

Le présent modèle considère donc l'encrassement par l'influence concurrentielle d'un mécanisme de dépôt et d'un mécanisme d'arrachement au travers de deux débits surfaciques J_{dep} et J_{arr} (Henry and Minier, 2014). Grâce à l'outil CFD, il est possible de déterminer ces quantités pour chaque face de l'interface fluide/solide du domaine discrétisé (en noir sur la Figure 4.11(b)). Ainsi le profil du dépôt peut être estimé par simulation et celui-ci prend en compte les particularités de l'écoulement (comme les points d'arrêt ou les zones de recirculation). On identifie dans la suite les quantités exprimées à la face grâce à la position \vec{x} du centre de gravité de celle-ci.

Dépôt. Comme dans le modèle de Paz et al. (2013), la vitesse de dépôt par thermophorèse est exprimée grâce au modèle théorique de Talbot et al. (1980) :

$$u_{th}(\vec{x}) = -\frac{2C_S}{1 + 3C_mKn} \frac{\frac{\lambda_h}{\lambda_p} + C_tKn}{1 + 2\frac{\lambda_h}{\lambda_p} + 2C_tKn} \frac{\mu_h C_C \nabla T(\vec{x})}{\rho_h T_{int}(\vec{x})} \quad (4.29)$$

où $T_{int}(\vec{x})$ est la température de la face à l'interface et $\nabla T(\vec{x})$ est le gradient de température entre la face et le fluide qui s'exprime pour un canal de hauteur H :

$$\nabla T(\vec{x}) = \frac{\bar{T} - T_{int}(\vec{x})}{H/2} \quad (4.30)$$

11. Cela est détaillé au Chapitre 6.

avec \bar{T} la température débitante moyenne du domaine, s'exprimant en fonction des valeurs entrée/sortie comme :

$$\bar{T} = \frac{\bar{T}_i + \bar{T}_o}{2} \quad (4.31)$$

avec \bar{T}_i et \bar{T}_o données par les Eqns. (4.11) et (4.12). Kn est le nombre de Knudsen, qui compare le libre parcours moyen des molécules du fluide l et le diamètre de la particule encrassante d_p comme :

$$Kn = \frac{2l}{d_p} \quad (4.32)$$

avec

$$l = 2 \frac{\mu_h}{\rho_h} \sqrt{\frac{\pi M_h}{\mathcal{R} T_{film}}} \quad (4.33)$$

où M_h est la masse molaire du fluide, \mathcal{R} la constante des gaz parfaits¹² et T_{film} la température de film qui s'exprime en fonction de la température débitante moyenne et de la température de paroi moyenne de toutes les faces \bar{T}_{int} :

$$T_{film} = \frac{\bar{T} + \bar{T}_{int}}{2} \quad (4.34)$$

λ_h est la conductivité thermique du fluide, ρ_h sa masse volumique et μ_h sa viscosité dynamique. Ces propriétés sont évaluées à une température égale à T_{film} . λ_p est la conductivité thermique de la particule. On considère de plus que toutes les particules, et de fait le dépôt, ont les mêmes propriétés physiques. Les constantes du modèle, issues de la théorie cinétique (Talbot et al., 1980), sont :

$$C_S = 1.17 \quad (4.35)$$

$$C_t = 2.18 \quad (4.36)$$

$$C_m = 1.14 \quad (4.37)$$

et C_C le facteur de correction de Stokes-Cunningham (Paz et al., 2013) :

$$C_C = 1 + Kn(1.257 + 0.4 \exp(1.1Kn)) \quad (4.38)$$

A partir de la vitesse définie par l'Eqn. (4.29), il est possible de définir le débit surfacique de dépôt J_{dep} comme (Paz et al., 2013) :

$$J_{dep}(\vec{x}) = u_{th}(\vec{x}) S_d C_b \quad (4.39)$$

avec S_d la probabilité qu'une particule qui entre en contact avec la paroi y adhère et C_b la concentration massique en particules du fluide. Conformément aux travaux de Paz et al. (2013), on considère que la probabilité d'adhésion est égale à l'unité¹³ et que la concentration reste constante¹⁴.

12. égale à $8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$

13. Ce qui correspond au cas le plus défavorable pour l'encrassement,

14. On ne considère pas l'appauvrissement (ou l'enrichissement) du fluide en particules dû au dépôt (ou à la resuspension) le long du motif.

Arrachement. Dans le présent modèle et contrairement à celui de Paz et al. (2013), l'arrachement n'est pas défini grâce à des coefficients expérimentaux. En effet, la variété des formes traitées par l'optimisation ne permet pas de réaliser suffisamment d'expériences pour que de tels coefficients soient représentatifs. Un arrachement reposant sur un bilan entre les forces d'adhésion et aérodynamiques a été préféré.

Les forces d'adhésion sont exprimées par les forces de Van der Walls entre la particule de diamètre d_p et la paroi¹⁵, qui sont définies comme (Henry and Minier, 2014) :

$$F_{VdW} = -\frac{A_{Ham}d_p/2}{6d_{pp}^2} \quad (4.40)$$

avec A_{Ham} la constante de Hamaker, qui représente le potentiel d'interactions entre un couple de matériaux particule/paroi, et d_{pp} la distance de séparation entre la particule et la paroi.

Les forces aérodynamiques se limitent à la force de traînée exercée par le fluide sur la particule. L'anisotropie du coefficient de traînée proche d'une paroi est considérée (Henry and Minier, 2014). L'expression de la force de traînée F_{drag} est donc scindée en deux termes, un tangentiel et l'autre normal à la paroi, par l'introduction de deux coefficients de traînée $C_{drag,\parallel}$ et $C_{drag,\perp}$:

$$F_{drag}(\vec{x}) = \frac{1}{2}\rho_h \frac{\pi d_p^2}{4} (C_{drag,\perp}(\vec{x}) + C_{drag,\parallel}(\vec{x})) u_\tau(\vec{x})^2 \quad (4.41)$$

avec ρ_h la masse volumique du fluide et u_τ la vitesse de frottement à la paroi. La valeur des coefficients de traînée dépend du nombre de Reynolds associé au diamètre de la particule :

$$Re_{d_p} = \frac{\rho_h u_\tau(\vec{x}) d_p}{\mu_h} \quad (4.42)$$

On a ainsi (Henry and Minier, 2014) :

$$C_{drag,\perp}(\vec{x}) = 3.39 \frac{24}{Re_{d_p}} \quad (4.43)$$

et

$$C_{drag,\parallel}(\vec{x}) = \begin{cases} 1.7009 \frac{24}{Re_{d_p}} & \text{si } Re_{d_p} < 0.1 \\ 1.7009 \frac{24}{Re_{d_p}} (1 + 0.916 Re_{d_p}) & \text{si } 0.1 \leq Re_{d_p} < 5 \\ 1.7009 \frac{24}{Re_{d_p}} (1 + 0.158 Re_{d_p}^{2/3}) & \text{si } 5 \leq Re_{d_p} < 250 \end{cases} \quad (4.44)$$

$$1.7009 \frac{24}{Re_{d_p}} (1 + 0.916 Re_{d_p}) \quad \text{si } 0.1 \leq Re_{d_p} < 5 \quad (4.45)$$

$$1.7009 \frac{24}{Re_{d_p}} (1 + 0.158 Re_{d_p}^{2/3}) \quad \text{si } 5 \leq Re_{d_p} < 250 \quad (4.46)$$

Les Eqns. (4.43) et (4.44) sont obtenues analytiquement tandis que les Eqns. (4.45) et (4.46) sont des formules empiriques.

Le bilan entre ces forces est ensuite réalisé au niveau de chaque face du domaine discrétisé. Si $F_{drag}(\vec{x}) \leq F_{VdW}$ alors il n'y a pas d'arrachement. Dans le cas contraire, des particules sont ré-entraînées par l'écoulement. Le débit surfacique d'arrachement J_{arr} s'exprime comme une proportion du débit surfacique de dépôt. Au final, on obtient :

$$J_{arr}(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si } F_{drag}(\vec{x}) \leq F_{VdW} \\ C_{arr} J_{dep}(\vec{x}) & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.47)$$

$$C_{arr} J_{dep}(\vec{x}) \quad \text{sinon} \quad (4.48)$$

avec C_{arr} le coefficient de proportion, fixé arbitrairement dans les présents travaux.

15. Pour être exhaustif, il faudrait également considérer la force de Van der Walls particule/particule lorsque toute la paroi est encrassée. Cela n'a pas été fait dans un souci de simplicité.

Épaisseur de dépôt et résistance thermique. La notion de "pas de temps" d'encrassement Δt_f intervient lorsque l'on souhaite calculer l'accroissement du dépôt après un certain temps de fonctionnement. On considère que cet accroissement se produit selon la direction \vec{e}_y , indiquée sur la Figure 4.11(b). À partir des deux débits surfaciques, il est aisé d'obtenir, pour chaque face du domaine discrétisé, cet accroissement Δe_f :

$$\Delta e_f(\vec{x}) = (J_{dep}(\vec{x}) - J_{arr}(\vec{x})) \frac{\Delta t_f}{\rho_p} \quad (4.49)$$

avec ρ_p la masse volumique du dépôt (égal à celui de la particule). Connaissant l'épaisseur initiale e_f^i , l'épaisseur du dépôt pour chaque face au bout de Δt_f vaut :

$$e_f(\vec{x}) = e_f^i(\vec{x}) + \Delta e_f(\vec{x}) \quad (4.50)$$

Finalement, la résistance thermique par unité de surface que génère cet encrassement est déterminée :

$$R_{th}(\vec{x}) = \frac{e_f(\vec{x})}{\lambda_p} \quad (4.51)$$

Propriétés physiques et constantes. Certaines propriétés physiques et constantes intervenant dans les équations précédentes restent à définir. Les propriétés des particules et du dépôt sont issues des travaux de Paz et al. (2013) et fixées à $\lambda_p = 0.07 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, $\rho_p = 36.5 \text{ kg.m}^{-3}$. De même, le diamètre des particules et la concentration du fluide sont $d_p = 500 \cdot 10^{-9} \text{ m}$ et $C_b = 1 \cdot 10^{-3} \text{ kg.m}^{-3}$. La constante de Hamaker pour le couple de matériaux particule/paroi et la distance de séparation sont tirées des travaux de Abarham et al. (2010) et fixées à $A_{Ham} = 1 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ et $Z = d_p/50$. Le coefficient de proportion d'arrachement est arbitrairement fixé à $C_{arr} = 0.8$.

4.3.5.2 Implémentation : déformation de l'interface et couplage temporel

Le modèle d'encrassement défini précédemment a été implémenté dans le solveur *Code_Saturne*.

Prise en compte de l'accroissement du dépôt au niveau du maillage. L'avantage de disposer d'un profil du dépôt qui dépend de l'écoulement est qu'il est possible de modifier l'interface fluide/solide en conséquence. C'est l'idée du modèle que proposent Paz et al. (2013). Dans leur cas, l'accroissement de la couche encrassante est réalisé par la transformation de cellules initialement fluides en cellules solides ayant les propriétés du dépôt. Dans les présents travaux, la méthode de déformation de maillage par RBF, présentée dans l'Annexe B, est utilisée pour considérer l'évolution du dépôt.

Soit $e_f(\vec{x})$ un profil de dépôt à l'interface fluide/solide définissant, pour chaque face, la variation de position de leur centre de gravité. La formulation RBF permet de définir, à partir du déplacement connu d'un certain nombre de points de contrôle, un champ de déplacement continu. L'application de ce champ de déplacement à un maillage permet de le déformer. En considérant les centres de gravité des faces comme des **points de contrôle** et la variation de position induite par l'encrassement comme leur déplacement, il est possible de déplacer l'interface fluide/solide et de déformer le maillage en conséquence.

Afin d'assurer la stabilité du processus de déformation, deux étapes de "lissage" du profil sont introduites. En effet, l'application face par face du modèle peut, à cause du

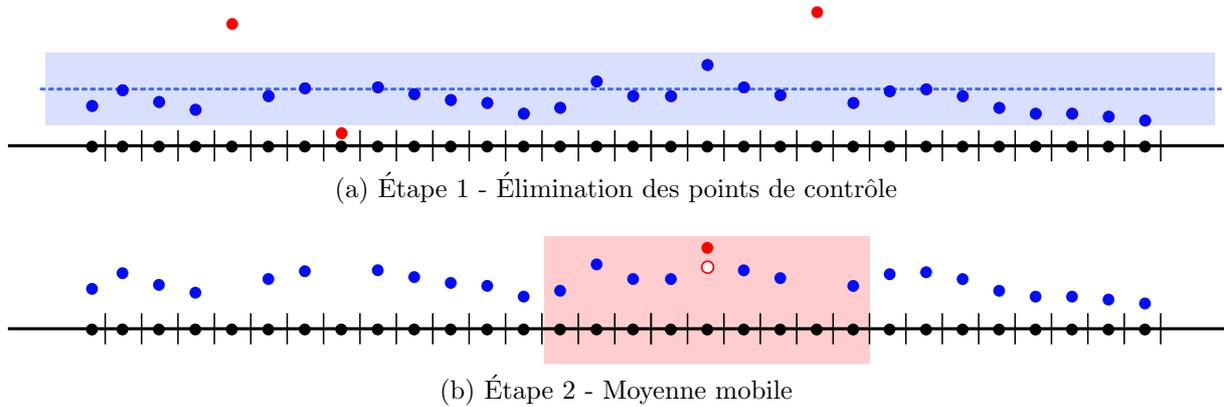


Figure 4.13 – Représentation schématique des deux étapes de lissage. La ligne noire représente l'interface fluide/solide, les traits verticaux identifient les faces et les points noirs les centres de gravité. Les points de couleur indiquent la position des centres suite à l'accroissement de l'épaisseur du dépôt - (a) La ligne bleue pointillée identifie le déplacement moyen et la zone bleue l'intervalle de confiance à 95%. Les points bleus sont conservés et les points rouges sont éliminés - (b) La zone rouge indique les points utilisés pour la moyenne mobile, le point rouge identifie la position avant application de la moyenne et le point blanc après moyenne.

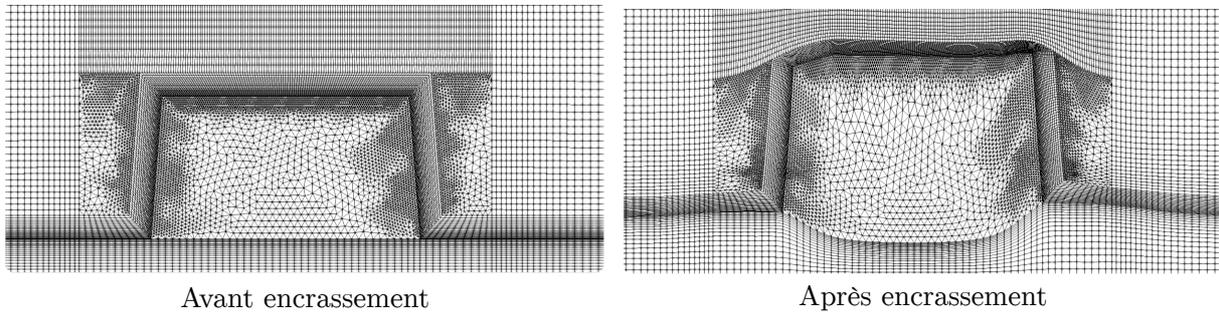


Figure 4.14 – Illustration de la déformation du maillage suite à l'encrassement

comportement binaire de l'arrachement, conduire à de fortes variations de prédiction de l'épaisseur du dépôt. La première étape, visible sur la Figure 4.13(a), consiste à éliminer les points de contrôle dont le déplacement, par rapport au déplacement moyen, n'est pas compris dans un intervalle de confiance à 95%¹⁶. La seconde étape, illustrée par la Figure 4.13(b), consiste à réaliser une moyenne mobile afin de modifier le déplacement des points de contrôle en prenant en compte la valeur de leurs voisins. La mise en œuvre de la méthode a mis en évidence un bon comportement pour une moyenne mobile sur 35 points. Une étape similaire est effectuée dans le modèle de Paz et al. (2013). Une fois ces étapes effectuées, la mise en données du *morphing* et la déformation du maillage sont réalisées. La Figure 4.14 illustre le rendu de cette méthode de déformation.

Contrairement au modèle de Paz et al. (2013), la méthode de déformation des présents travaux ne permet pas d'ajouter un nouveau solide avec des propriétés différentes, modélisant le dépôt. La prise en compte de l'effet du dépôt sur le comportement thermique de l'intensificateur se fait via l'ajout d'une résistance thermique à l'interface fluide/solide. Cela est réalisé dans *Code_Saturne* par la surcharge du coefficient d'échange calculé par le solveur (voir Annexe A.3.3). Afin de respecter l'adimensionalisation de la simulation, la

16. il est défini, pour une valeur moyenne m et un écart-type σ comme $I95 = m \pm 1.96\sigma$.

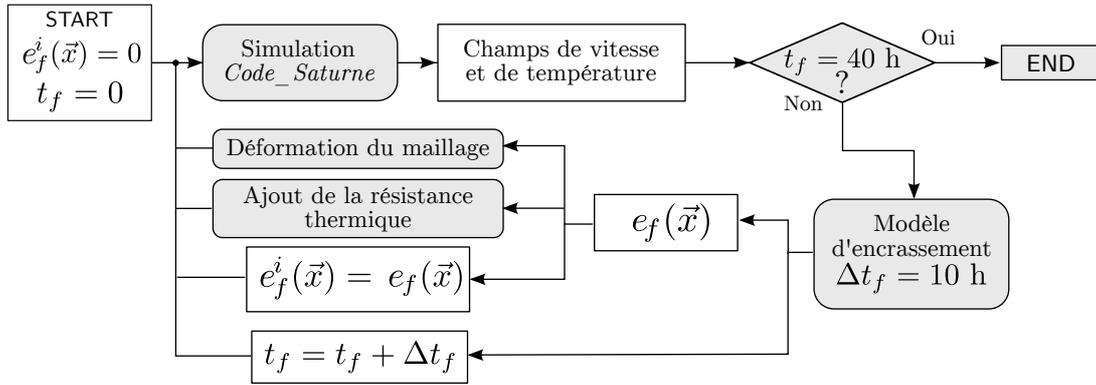


Figure 4.15 – Illustration du processus d’encrassement avec l’avancée en temps et les étapes de déformation du maillage et d’ajout de la résistance thermique.

résistance thermique de l’Eqn. (4.51) est normalisée comme :

$$\tilde{R}_{th}(\vec{x}) = \frac{e_f(\vec{x})}{H} \frac{1}{1.57\lambda_h} \quad (4.52)$$

avec la valeur de λ_h définie dans le Tableau 4.3.

Couplage temporel L’avancée en temps du modèle d’encrassement peut être réalisée de deux façons : un couplage fort qui la synchronise à chaque pas en temps avec la simulation fluide/solide instationnaire, ou bien en réalisant un couplage faible avec une succession d’états ”permanents”.

La dynamique de l’encrassement étant beaucoup plus lente (quelques heures) que celle de l’écoulement (de l’ordre de la seconde), la seconde approche a été utilisée avec un pas de temps d’encrassement $\Delta t_f = 10$ h. Ainsi, après avoir atteint un état permanent (moyenné), le post-traitement des champs de vitesse et de température moyens avec le modèle présenté précédemment, permet d’obtenir les débits surfaciques puis l’accroissement du dépôt Δe_f à 10 h et enfin le profil du dépôt. Après la prise en compte de cet accroissement sur le maillage et la résistance thermique à l’interface, une nouvelle simulation est réalisée jusqu’à atteindre le régime permanent. Le post-traitement est réalisé à nouveau puis l’accroissement de l’épaisseur du dépôt est obtenu. On recommence la procédure jusqu’à atteindre un critère d’arrêt, défini dans les présents travaux, par une valeur de temps maximale $t_{max} = 40$ h. La Figure 4.15 résume ce processus.

4.3.5.3 Avantages et limites

L’utilisation de la méthode de *morphing* pour prendre en compte l’encrassement de la surface permet de considérer, en plus de l’influence thermique, l’impact de la couche encrassante sur l’écoulement, comme illustré sur la Figure 4.16. Les champs de vitesses et de différence de température¹⁷ sont représentés avant ($t = 0$ h) et après ($t = 40$ h) encrassement. Après l’encrassement, la section de passage du fluide est réduite et l’écoulement accélère. Le dépôt sur le *rib* conduit à augmenter la taille de la recirculation. La différence de température augmente à l’état encrassé et le champ de température au sein du fluide devient plus homogène.

17. par rapport à la température moyenne des parois inférieure et supérieure

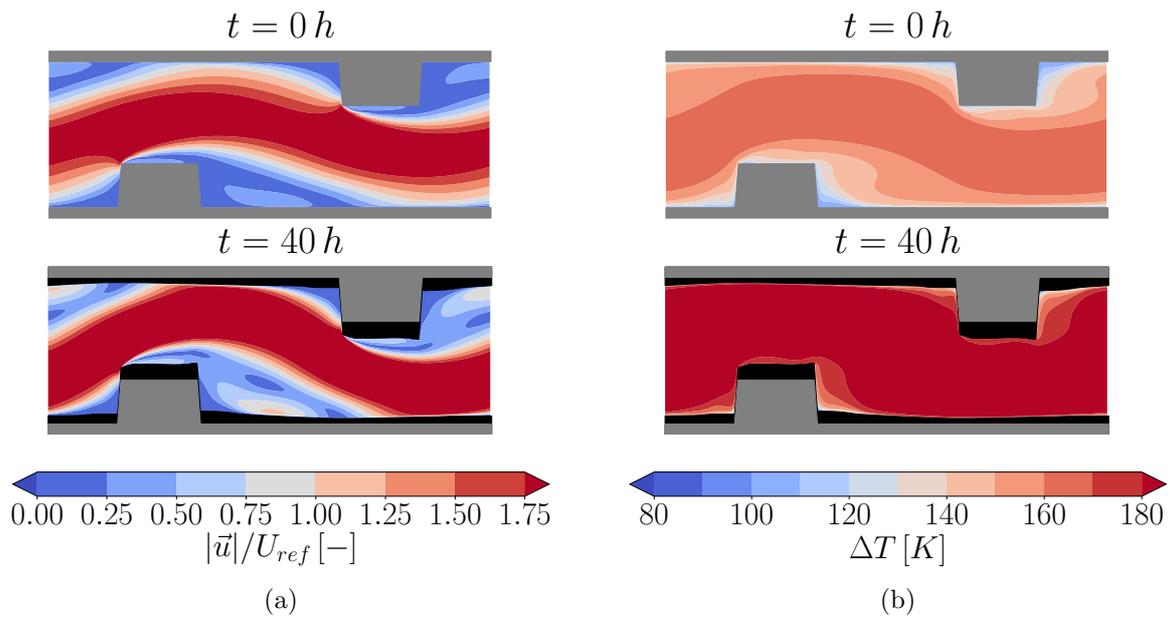


Figure 4.16 – Représentation des champs de vitesse (a) et de différence de température (b) dans le fluide avant et après encrassement. Le solide est en gris et le dépôt est représenté en noir.

Cependant, cette méthode reste limitée à des petites déformations et lorsqu'elles sont trop importantes, elle conduit à des cellules à volume négatif. Une étape de remaillage de la forme serait donc à prévoir dans ce cas. D'autre part, le mécanisme d'arrachement, qui repose uniquement sur le bilan des forces et dont le débit surfacique d'arrachement est fonction de J_{dep} , ne représente pas aussi bien l'arrachement que les modèles empiriques de la littérature. Il se peut donc que les profils d'encrassement obtenus soient parfois incorrects.

Il convient toutefois de rappeler que ce modèle ne se veut pas prédictif mais cherche avant tout à indiquer des tendances globales afin de pouvoir considérer l'encrassement dans un processus d'optimisation multiphysique.

4.4 Présentation de la configuration ECH-0D

Comme l'a mis en évidence l'étude bibliographique réalisée au Chapitre 2, il existe peu d'études cherchant à optimiser les performances globales de l'échangeur en modifiant une forme locale. Afin de réaliser une telle étude, la configuration ECH-0D présente un **échangeur air/eau à plaques à courants croisés**. Le côté air (côté chaud) est muni de perturbateurs transversaux à l'écoulement décrits par la configuration TWOSIDE. Le côté eau (côté froid) est laissé lisse. Cet échangeur, illustré par la Figure 4.17, est considéré idéal car il respecte les hypothèses formulées Section 2.2.2. Les canaux sont supposés distribués uniformément en débit et le diffuseur n'est pas représenté.

Les caractéristiques géométriques et la modélisation de cet échangeur sont présentées dans cette section.

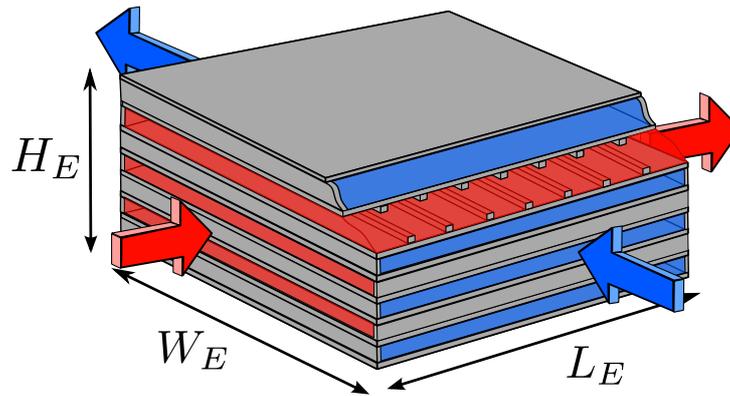


Figure 4.17 – Représentation schématique (non à l'échelle) de la configuration ECH-0D (bleu : eau froide, rouge : air chaud).

Variable	Symbole	Unité	Valeur
Coté chaud : Air			
Débit masse	\dot{m}_h	kg.s ⁻¹	0.56
Température d'entrée	$T_{i,h}$	K	553.15
Pression d'entrée	$P_{i,h}$	Pa	300 000
Coté froid : Eau			
Débit masse	\dot{m}_c	kg.s ⁻¹	2.86
Température d'entrée	$T_{i,c}$	K	353.15
Pression d'entrée	$P_{i,c}$	Pa	100 000

Tableau 4.4 – Propriétés des écoulements dans l'échangeur ECH-0D.

4.4.1 Caractéristiques de l'échangeur

Le fluide chaud est de l'air ayant une température et une pression d'entrée $T_{i,h}$ et $P_{i,h}$. Il circule à un débit masse \dot{m}_h . L'eau de refroidissement circule à un débit \dot{m}_c pour une température et une pression d'entrée $T_{i,c}$ et $P_{i,c}$. Le Tableau 4.4 résume les caractéristiques de ces écoulements.

Les plaques séparant les canaux sont en acier, dont la conductivité thermique est supposée constante et égale à $\lambda_s = 16.56 \text{ W.m}^2.\text{K}$.

L'échangeur est constitué de 12 canaux chauds ($N_{ch,h}$) et de 13 canaux froids ($N_{ch,c}$). La hauteur d'un canal (chaud ou froid) est de $H = 7 \text{ mm}$, et l'épaisseur des plaques est $e_p = 1 \text{ mm}$. Un canal chaud comporte 20 *ribs* et le pas entre *ribs* est égal à $L = 3H = 21 \text{ mm}$. Les dimensions de l'échangeur sont $H_E = 0.201 \text{ m}$ et $W_E = L_E = 0.42 \text{ m}$. La forme des *ribs* est définie par la configuration TWOSIDE (voir Section 4.3).

4.4.2 Modélisation thermo-hydraulique

La modélisation de cet échangeur utilise la méthode ε -NUT, présentée Section 2.2.2, et cherche à déterminer l'efficacité ε de l'échangeur et la perte de charge ΔP_{ech} en fonction des deux côtés. La relation donnant l'efficacité en fonction du nombre d'unité de transfert

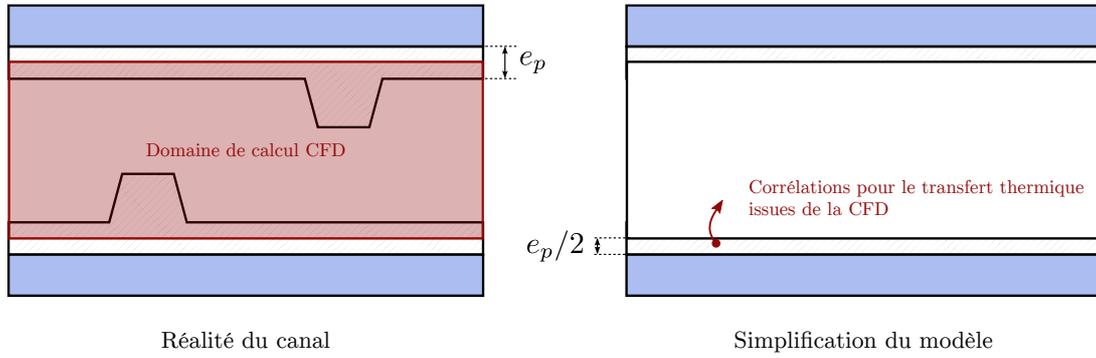


Figure 4.18 – Représentation schématique (non à l'échelle) de la simplification utilisée dans le modèle pour le calcul du coefficient d'échange global U .

et des débits calorifiques s'exprime comme (Thulukkanam, 2013, pp. 58) :

$$\varepsilon = 1 - \exp[-(1 + C^*)NUT] \times \left[I_0(2NUT\sqrt{C^*}) + \sqrt{C^*}I_1(2NUT\sqrt{C^*}) - \frac{1 - C^*}{C^*} \sum_{n=2}^{\infty} C^{*n/2} I_n(2NUT\sqrt{C^*}) \right] \quad (4.53)$$

avec $I_n(\cdot)$ la fonction de Bessel modifiée de première espèce.

Le calcul du NUT fait intervenir les coefficients d'échange convectif entre l'air et le solide et entre l'eau et le solide. Côté air, la corrélation utilisée dépend des paramètres de la forme et du nombre de Reynolds et est issue de la configuration TWOSIDE (voir Chapitre 6). Le coefficient de perte de charge C_f , permettant le calcul de la perte de charge, est également issu de la corrélation obtenue grâce à la configuration TWOSIDE. Côté eau, les canaux sont lisses et le nombre de Reynolds approche 3 000. Pour cette valeur, les corrélations de Dittus-Boetler et de Blasius ne sont pas applicables. Sont alors utilisées les corrélations de Petukhov (Bergman et al., 2011, pp. 522) pour le coefficient de frottement :

$$C_{f,c} = (0.790 \ln Re_{D_H} - 1.64)^{-2} \quad (4.54)$$

et de Gnielinski (Bergman et al., 2011, pp. 545) pour le nombre de Nusselt :

$$Nu_{D_H,c} = \frac{(C_{f,c}/8)(Re_{D_H} - 1000)Pr}{1 + 12.7\sqrt{C_{f,c}/8}(Pr^{2/3} - 1)} \quad (4.55)$$

L'algorithme 1 présente la succession des étapes conduisant à l'obtention des performances de l'échangeur. Comme indiqué dans la Section 2.2.2, l'utilisation de cette méthode nécessite une procédure itérative afin de converger vers une température moyenne entre l'entrée et la sortie à une tolérance près, fixée à 5 K (test de la ligne 13). Cette température moyenne est alors utilisée pour déterminer les propriétés des fluides.

L'expression du coefficient d'échange global U définie par l'Eqn. (4.60), fait intervenir la conductivité thermique du solide pour une demi-épaisseur de plaque uniquement, comme l'illustre la Figure 4.18. En effet, une partie est déjà prise en compte dans la valeur du nombre de Nusselt issue de la configuration TWOSIDE, de part la simulation du

couplage thermique fluide/solide.

Algorithme 1 : Calcul de l'efficacité et de la perte de charge totale de l'échangeur Thulukkanam (2013)

Entrée : Paramètres du *ribs* : $\mathbf{p} = (h_{rib}, e, E)$

Entrée : Caractéristiques géométriques de l'échangeur : $W_E, L_E, N_{ch,h}, N_{ch,c}, H, L$

Entrée : Caractéristiques de l'écoulement côté chaud (air) : $\dot{m}_h, T_{i,h}$ et $P_{i,h}$

Entrée : Caractéristiques de l'écoulement côté froid (eau) : $\dot{m}_c, T_{i,c}$ et $P_{i,c}$

Sortie : Performances de l'échangeur : ε et ΔP_{ech}

1 Initialisation des températures et pressions de référence, T_{ref} et P_{ref} , aux valeurs d'entrées : $T_{ref,(h,c)} = T_{i,(h,c)}$ et $P_{ref,(h,c)} = P_{i,(h,c)}$

2 Calcul des propriétés physiques λ, ρ, c_p, μ et du nombre de Prandtl Pr des deux fluides en fonction des T_{ref} et P_{ref} .

3 Calcul des vitesses et nombres de Reynolds :

$$U_{deb,h} = \frac{\dot{m}_h}{N_{ch,h} W_E H \rho_h}, \quad Re_{D_{H,h}} = \frac{\rho_h U_{deb,h} D_H}{\mu_h} \quad (4.56)$$

$$U_{deb,c} = \frac{\dot{m}_c}{N_{ch,h} W_E H \rho_c}, \quad Re_{D_{H,c}} = \frac{\rho_h U_{deb,c} D_H}{\mu_c} \quad (4.57)$$

4 Obtention du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge, à partir des **corrélations** de la configuration TWOSIDE, pour le côté chaud :

$$Nu_{D_{H,h}} = f_{TS}(\mathbf{p}, Re_{D_{H,h}}, Pr) \quad (4.58)$$

$$C_{f,h} = f_{TS}(\mathbf{p}, Re_{D_{H,h}}) \quad (4.59)$$

5 Obtention du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge pour le côté froid grâce aux Eqns. (4.54) et (4.55)

6 Calcul des débits calorifiques minimal C_{min} , maximal C_{max} et leur ratio C^* par les Eqns. (2.11), (2.12) et (2.13)

7 Calcul du coefficient d'échange global U

$$\frac{1}{U} = \frac{D_H}{Nu_{D_{H,h}} \lambda_h} + \frac{D_H}{Nu_{D_{H,c}} \lambda_c} + \frac{e_p/2}{\lambda_s} \quad (4.60)$$

8 Calcul de la surface d'échange $S_{tot} = 2L_E W_E N_{ch,h}$

9 Calcul du nombre d'unités de transfert :

$$NUT = \frac{U S_{tot}}{C_{min}} \quad (4.61)$$

10 **Calcul de l'efficacité ε via l'Eqn. (4.53)**

11 **Calcul des pertes de charge ΔP_{ech} grâce à l'Eqn. (2.19) pour les deux cotés**

12 Calcul des températures de sortie :

$$T_{o,h} = T_{i,h} - \frac{\varepsilon C_{min}(T_{in,h} - T_{in,c})}{\dot{m}_h c_{p,h}} \quad (4.62)$$

$$T_{o,c} = T_{i,c} + \frac{\varepsilon C_{min}(T_{in,h} - T_{in,c})}{\dot{m}_c c_{p,c}} \quad (4.63)$$

13 **Si** $(T_{ref,(h,c)} - 0.5(T_{i,(h,c)} + T_{o,(h,c)})) \leq tolerance$:

$$T_{ref,(h,c)} = 0.5(T_{i,(h,c)} + T_{o,(h,c)})$$

retour ligne 2

Sinon :

Fin

L'implémentation de l'Alg. 1 a été faite en langage Python, la relation ε -NUT de l'Eqn. (4.53) étant disponible dans le package `ht.hx` (Bell, 2016). Les propriétés des fluides ont été déterminées avec le package CoolProp¹⁸ (Bell et al., 2014). Le calcul des corrélations ($f_{TS}(\cdot)$) a été réalisé par un appel à un script en langage R, contenant les informations des métamodèles préalablement construits.

4.5 Présentation de la configuration ECH-3D

Comme présenté dans le Chapitre 2, la mécanique des fluides numérique peut être utilisée pour modéliser les échangeurs de chaleur en utilisant des milieux poreux. Dans ces approches, la partie active de l'échangeur est considérée comme un milieu poreux avec des coefficients de perte de charge et des coefficients d'échange thermique issus de corrélations. Celles-ci reposent encore dans la majorité des cas sur des études expérimentales, ce qui limite l'utilisation de ce type de simulations pour des formes novatrices.

Les présents travaux proposent donc une approche dite **multiniveau**, couplant des simulations à l'échelle locale (intensificateur) à des simulations à l'échelle globale de l'échangeur s'inspirant des approches poreuses pour la partie active. Cela permet de considérer conjointement les effets de la distribution et des formes locales sur les performances thermohydrauliques de l'échangeur. La distribution est prise en compte grâce à la modélisation du diffuseur côté air. Les corrélations pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge, obtenues sur la base des simulations réalisées avec la configuration TWOSIDE, sont utilisées pour déterminer les coefficients de la partie active. La dépendance de ces corrélations au nombre de Reynolds permet de considérer l'influence de la non-uniformité de distribution du débit entre les canaux, sur les performances de la partie active.

L'échangeur considéré est toujours un **échangeur air/eau à plaques à courants croisés**. Cette section présente la géométrie de l'échangeur et la mise en données de la configuration. La distribution entre les canaux étant fortement impactée par la résolution de l'écoulement dans le diffuseur, une étude de sensibilité au maillage est réalisée.

4.5.1 Géométrie de l'échangeur

Une représentation schématique de la partie active et de la partie distribution du fluide chaud est visible sur la Figure 4.19. L'écoulement des fluides chaud (air) et froid (eau) est considéré ainsi que la conduction dans les plaques. Le fluide chaud s'écoule selon la direction \vec{e}_x et le fluide froid selon la direction \vec{e}_z .

La partie active est identique à celle présentée dans la Section 4.4. Elle est constituée d'un empilement de plaques formant 12 canaux chauds et 13 canaux froids de hauteur $H = 7$ mm, de longueur et de largeur égale $L_E = W_E = 0.42$ m. L'épaisseur d'une plaque est $e_p = 1$ mm. La hauteur totale de l'échangeur est $H_E = 0.201$ m. Les canaux froids sont laissés lisses alors que les canaux chauds sont munis de *ribs* qui ne sont pas représentés pour la simulation et dont la forme est définie par la configuration TWOSIDE.

Une hypothèse d'uniformité de distribution est posée pour l'eau coté froid. La partie distribution ne concerne donc que le fluide chaud. Sa largeur est identique à celle de la partie active W_E . Elle est constituée de trois zones. La première est l'orifice d'entrée qui

18. <http://www.coolprop.org/>

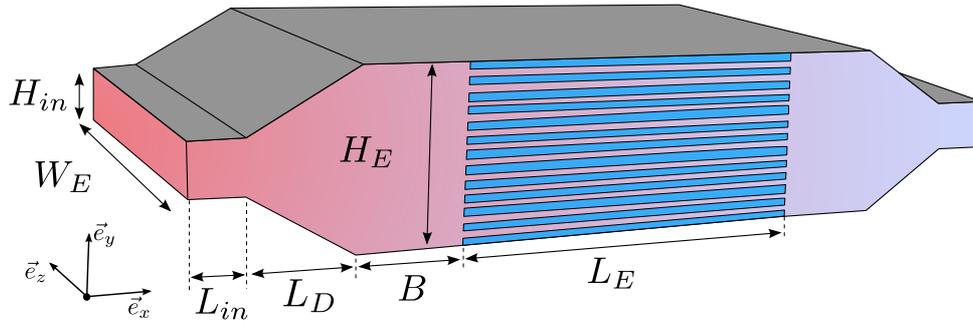


Figure 4.19 – Représentation schématique (non à l'échelle) de la configuration ECH-3D et des dimensions associées. La partie active est au centre, les canaux froids étant représentés en bleu.

possède une hauteur $H_{in} = 0.3H_E$ et une longueur $L_{in} = 0.5H_{in}$. Elle est suivie par le diffuseur qui passe de la hauteur H_{in} à la hauteur H_E sur une longueur L_D variable. Le diffuseur se termine par une zone de longueur $B = 0.3H_E$ et de hauteur H_E assurant la connexion avec la partie active. La partie de récupération du fluide en sortie de canaux chauds est le symétrique de celle d'entrée par rapport au plan médian. La longueur du diffuseur, qui sera utilisée comme paramètre de l'optimisation, est comprise dans la plage :

$$L_D/H_{in} \in [2; 5] \quad (4.64)$$

4.5.2 Mise en données

On considère un plan de symétrie de la géométrie à mi-hauteur d'échangeur dans la direction \vec{e}_y . Cela permet de ne considérer que la moitié de l'échangeur, soit six canaux chauds et six canaux froids et demi, afin de diminuer le coût des simulations. Le maillage est présenté dans un premier temps, car il conditionne la stratégie de simulation multi-niveau. Les conditions aux limites et de volumes ainsi que les propriétés physiques sont ensuite explicitées.

4.5.2.1 Maillage

L'approche multiniveau mise en place nécessite un maillage particulier. En effet, plutôt que de reproduire les intensificateurs dans les canaux et de simuler l'écoulement autour, ceux-ci sont simplement supprimés et leurs effets sur le comportement thermohydraulique sont déterminés à partir des corrélations du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge. Toutefois, ces corrélations sont définies à partir d'une vitesse moyenne et d'une température moyenne débitante dans le canal (voir Section 4.3.4). Ainsi, il faut pouvoir extraire ces quantités de la simulation. Chaque canal est donc discrétisé spatialement en n'utilisant qu'une seule cellule dans la hauteur, comme l'illustre la partie droite de la Figure 4.20. De fait, la vitesse et la température au centre de la cellule sont représentatives du comportement moyen dans le canal. Il en va de même pour les canaux froids et les plaques. La partie active est donc majoritairement constituée d'hexaèdres.

La discrétisation de la partie distribution, visible sur la partie gauche de la Figure 4.20, repose sur un maillage *Bas-Reynolds* au niveau de toutes les parois¹⁹. La géométrie du diffuseur a permis d'utiliser exclusivement des cellules hexaédriques. Une étude de sensibilité au maillage de cette partie est présentée Section 4.5.3.

19. y compris à l'entrée des canaux chauds

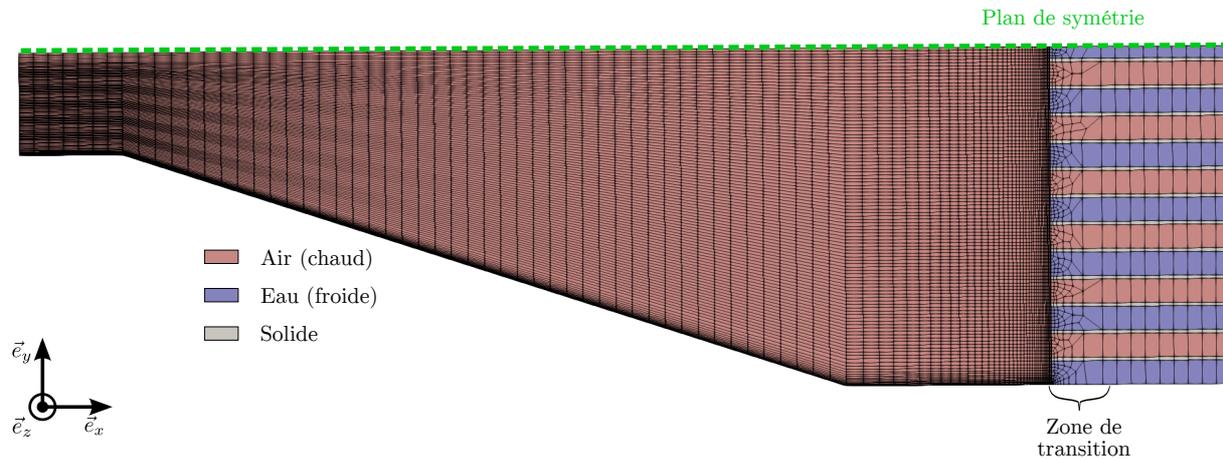


Figure 4.20 – Représentation du maillage de la configuration ECH-3D (seule l'entrée est représentée, la sortie étant identique). Les canaux (partie active) sont à droite de la zone de transition.

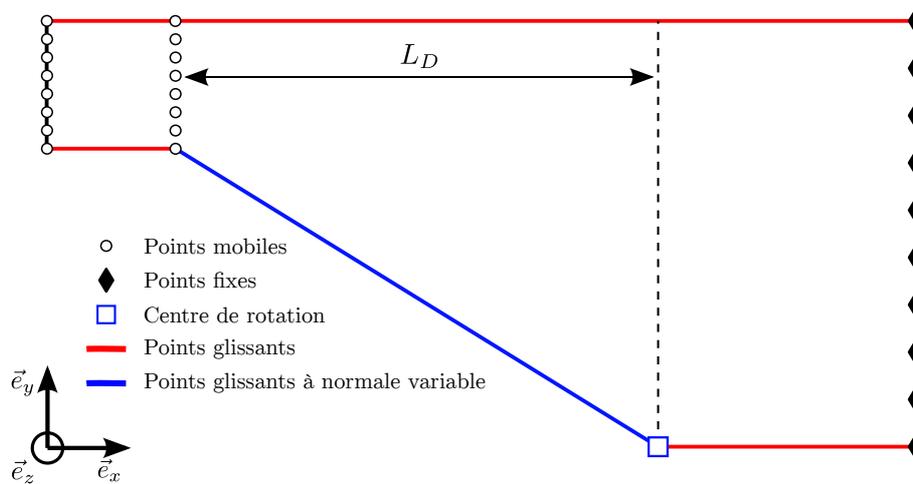


Figure 4.21 – Représentation schématique de la mise en données pour la déformation de la configuration ECH-3D. Seule la partie de distribution est représentée.

Un point critique dans la réalisation de ce maillage concerne la liaison entre les cellules de la partie distribution et celles de la partie active. En effet, les cellules y sont soumises à un brusque agrandissement. Une zone de transition a donc été appliquée comme l'illustre la Figure 4.20.

Le maillage utilisé pour les simulations, obtenu suite à l'étude de sensibilité est constitué de 3 700 000 cellules.

La stratégie de maillage utilisée n'est pas suffisamment robuste pour pouvoir la rendre automatique dans un processus d'optimisation. De plus, le temps nécessaire à la réalisation d'une simulation est élevé au vu de la taille du maillage. Ces deux points ont conduit à utiliser une méthode de déformation par RBF²⁰ pour passer d'une longueur du diffuseur à une autre au cours de l'optimisation. Seule la partie distribution requiert une déformation. La Figure 4.21 illustre la mise en données du *morphing*. Des points mobiles (\circ) sont prescrits au niveau des plans à l'entrée et à la sortie de l'orifice, et se déplacent dans la

20. présentée dans l'Annexe B.

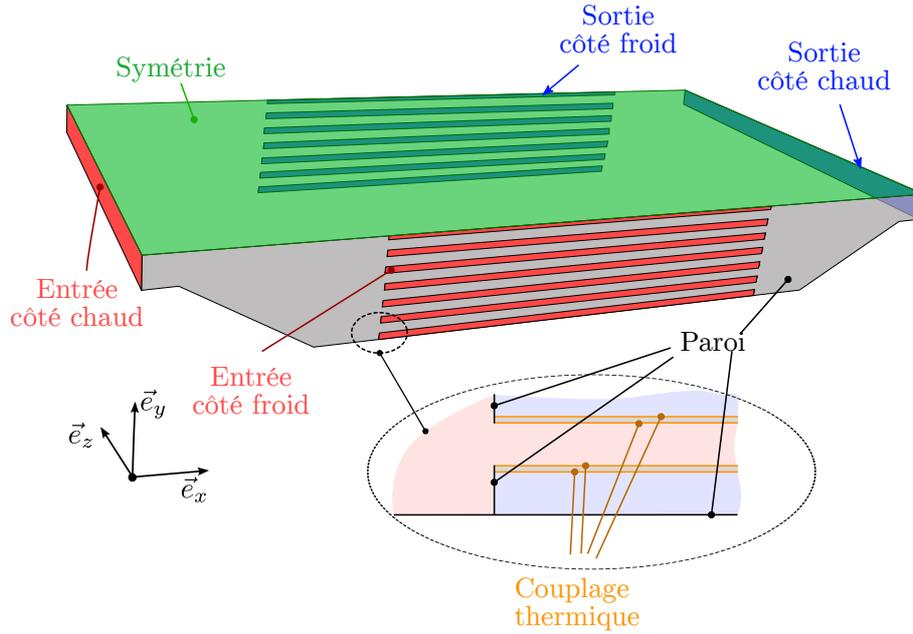


Figure 4.22 – Représentation schématique des conditions aux limites de la configuration ECH-3D. Le détail entouré indique les conditions à l’interface des parties distribution et active ainsi qu’entre les canaux et les plaques.

direction \vec{e}_x pour agrandir ou diminuer la longueur du diffuseur. Des points fixes (\blacklozenge) sont utilisés au plan d’interface entre la partie active et la partie distribution pour contenir la déformation à celle-ci. Les lignes rouges indiquent des plans de glissement pour lesquels le vecteur normal est fixe et vaut $\vec{n} = (0, \pm 1, 0)$. La ligne bleue identifie un plan de glissement dont la direction du vecteur normal varie avec la longueur L_D . Cette variation est associée à un centre de référence (\square)²¹. Tous les nœuds du maillage situés sur les différents plans présentés sont susceptibles d’être utilisés en tant que points de contrôle. La sélection des points de contrôle repose sur un algorithme glouton dont la tolérance est fixée à $8 \cdot 10^{-4}$ par rapport au déplacement maximal induit par la déformation. Le rayon d’action est fixé à $2H_E$. Le maillage initial utilisé est défini par une longueur de diffuseur $L_D/H_{in} = 3.5$.

4.5.2.2 Conditions aux limites et de volumes

Les conditions aux limites appliquées pour la simulation de l’échangeur sont illustrées sur la Figure 4.22. Comme indiqué précédemment, une condition de symétrie (verte) est appliquée à mi-hauteur d’échangeur.

Une condition de vitesse d’entrée (rouge) dans la direction \vec{e}_x est définie pour le fluide côté chaud. Le profil de vitesse imposé est uniforme. Le débit masse est fixé à $\dot{m}_h = 0.262 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ et la température à $T_{i,h} = 553.15 \text{ K}$. La condition de sortie (bleue) utilisée annule les flux (thermiques et de matière) ré-entrant dans le domaine à cet endroit.

Une condition de vitesse d’entrée (rouge) imposée est également utilisée pour le côté froid, mais cette fois-ci dans la direction \vec{e}_z . Le débit masse total est fixé à $\dot{m}_c = 1.43 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ et il est divisé uniformément entre les canaux. La température est fixée à $T_{i,c} = 353.15 \text{ K}$. La condition de sortie (bleue) est de même nature que celle du côté chaud.

Des conditions de parois adiabatiques avec adhérence du fluide sont appliquées aux frontières extérieures (gris). Les mêmes conditions sont appliquées aux interfaces entre la

21. voir l’Annexe B pour plus de précision.

partie distribution, les canaux froids et les plaques, comme l'indique le détail entouré de la Figure 4.22.

Une condition de couplage thermique est appliquée aux interfaces entre les plaques et les canaux chauds et froids (en orange sur le détail). Le coefficient d'échange thermique, normalement calculé à partir des informations de l'écoulement, est ici modifié²² en fonction des informations des corrélations TWOSIDE pour le côté chaud, et Gnielinski pour le côté froid.

Enfin, des conditions volumiques de pertes de charge sont appliquées dans chacun des canaux (chauds et froids). Celles-ci s'expriment comme un terme source de gradient de pression et se calculent, en fonction du coefficient de perte de charge comme :

$$\vec{\nabla}P = -\frac{1}{2}\rho_h \frac{C_f}{D_H} |\vec{u}| \vec{u} \quad (4.65)$$

avec $|\vec{u}|$ la norme du vecteur vitesse. C_f est obtenu à partir des corrélations TWOSIDE pour le côté chaud, et Petukhov pour le coté froid.

4.5.2.3 Écoulement et propriétés physiques

On considère que les propriétés des fluides et du solide sont indépendantes de la température pour simplifier la simulation. Le fluide chaud est de l'air et ses propriétés sont évaluées à une température de 553.15 K et une pression de $3 \cdot 10^5$ Pa correspondant aux valeurs d'entrée.

Le fluide froid est de l'eau et ses propriétés sont évaluées pour une température de 353.15 K et une pression de $1 \cdot 10^5$ Pa.

Les propriétés de l'acier inoxydable sont utilisées pour le solide. Toutefois, comme pour la configuration ECH-0D, il faut tenir compte du fait que la corrélation du nombre de Nusselt, pour le côté chaud, considère déjà la conductivité d'une demi-épaisseur de plaque. Ainsi la conductivité du solide a été doublée pour que la résistance thermique globale soit correcte.

Une particularité existe pour la masse volumique du côté froid et du solide. En effet, comme un état permanent est recherché et pour des raisons de stabilité de la simulation, la masse volumique de chaque domaine est prise égale à celle de l'air. La vitesse de l'eau est modifiée en conséquence pour obtenir le débit masse et le nombre de Reynolds souhaités.

Le Tableau 4.5 résume les propriétés de chaque domaine, exprimées en fonction de celles de l'air.

4.5.2.4 Modélisation de la turbulence

Le choix du modèle de turbulence est essentiellement lié à l'écoulement dans la partie distribution. Ce type de géométrie entraîne une recirculation dont la taille dépend de l'angle du diffuseur. Des études (El-Behery and Hamed, 2011) ont montré que les modèles similaires au $B1 - \overline{v^2}/k$ semblent prometteurs pour simuler ces écoulements et que le modèle $k - \omega$ SST donne des résultats acceptables. Ce dernier a été préféré pour des questions de stabilité.

22. voir l'Annexe A.3.3

Variable	Symbole	Unité	Valeur
Côté chaud : Air			
Masse volumique	ρ_h	kg.m ⁻³	1.89
Viscosité	μ_h	Pa.s	$2.9 \cdot 10^{-5}$
Capacité thermique massique	$c_{p,h}$	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	1077
Nombre de Prandtl	Pr	[-]	0.7
Conductivité thermique	λ_h	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	$c_{p,h}\mu_h/Pr = 0.045$
Côté froid : Eau			
Masse volumique	ρ_c	kg.m ⁻³	ρ_h
Viscosité	μ_c	Pa.s	$30\mu_h$
Capacité thermique massique	$c_{p,c}$	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	$4 c_{p,h}$
Conductivité thermique	λ_c	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	$14 \lambda_h$
Solide			
Masse volumique	ρ_s	kg.m ⁻³	ρ_h
Capacité thermique massique	$c_{p,s}$	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	$0.48 c_{p,h}$
Conductivité thermique	λ_s	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	$742 \lambda_h$

Tableau 4.5 – Propriétés physiques pour la configuration ECH-3D.

4.5.2.5 Paramètres numériques

La simulation vise à atteindre un état stationnaire, mais le calcul est réalisé en utilisant un schéma temporel instationnaire pour des questions de stabilité. Le pas de temps, constant en temps et espace, est pris égal à $\Delta t = 0.0004$ s. Il a été déterminé afin d'assurer que les nombres de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) et de Fourier soient inférieurs à 10. Le nombre de pas de temps est fixé de sorte à atteindre un état stationnaire (environ 80 000).

Les variables de pression, de vitesse et des grandeurs turbulentes sont résolues grâce aux solveurs linéaires par défaut²³. Pour la température, une méthode de gradient bi-conjugué stabilisée (BICGStab2) est utilisée, associée à un pré-conditionneur polynomial (EDF R&D, 2018b). Cela assure la stabilité numérique du couplage monolithique fluide/solide.

Les termes convectifs, pour toutes les équations, sont traités par un schéma décentré amont d'ordre 1 (*upwind*) afin d'assurer la stabilité de la résolution. Les gradients sont calculés par une méthode itérative (EDF R&D, 2018b, pp. 34). Un algorithme SIMPLEC est utilisé pour le couplage vitesse-pression.

4.5.2.6 Implémentation

Comme présenté dans la Section 4.5.2.1, la taille du maillage est importante. Afin d'accélérer les simulations du processus d'optimisation, des reprises de calculs sont effectuées à partir d'une simulation déjà convergée. L'utilisation de l'outil de déformation de maillage permet de les réaliser sans interpoler les champs physiques²⁴.

23. Méthode de Jacobi pour la vitesse et les grandeurs turbulentes et méthode de gradient conjugué pour la pression.

24. La Section 5.4 présente le gain de temps apporté par cette approche.

Les corrélations pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge sont construites en utilisant des métamodèles de krigeage. Pour les utiliser au cours de la simulation avec *Code_Saturne*, une étape de communication est ajoutée par l'intermédiaire des sources utilisateurs. A chaque pas de temps, le nombre de Reynolds de chaque canal chaud est communiqué aux métamodèles qui renvoient la valeurs des coefficients. Celle-ci est alors utilisée pour mettre à jour les coefficients d'échange aux interfaces et la valeur des pertes de charge. Plus d'information sur cette communication est disponible dans l'Annexe A.3.4.

4.5.3 Étude de sensibilité au maillage de la partie distribution

La résolution de l'écoulement dans la partie distribution est essentielle pour prédire correctement la répartition du débit entre les différents canaux chauds. Une étude de sensibilité au maillage est réalisée afin de s'affranchir au maximum des effets de la discrétisation spatiale sur les résultats de la simulation. Elle repose sur différentes tailles de cellule en proche paroi et au centre de l'écoulement conduisant à huit stratégies de maillage différentes, numérotées dans l'ordre croissant du nombre de cellules.

Cette étude est menée pour une partie distribution caractérisée par une longueur de diffuseur $L_D = 3.5H_{in}$ (correspondant à la forme initiale utilisée pour le *morphing*). Elle se concentre sur l'évolution des débits masse dans chaque canal en fonction du nombre de cellules du maillage. Les résultats sont exprimés comme l'écart, en pourcent, par rapport aux valeurs issues de la stratégie de maillage la plus fine (numéro 8) :

$$\epsilon_{i,j} = \frac{|\dot{m}_{i,j} - \dot{m}_{8,j}|}{\dot{m}_{8,j}} \quad (4.66)$$

avec $i \in [1; 8]$ le numéro de la stratégie de maillage et $j \in [1; 6]$ le numéro du canal²⁵. La valeur maximale de y^+ pour chaque stratégie est également étudiée.

Les résultats de l'étude de sensibilité sont présentés sur la Figure 4.23. L'évolution des écarts est peu corrélée à la valeur de y_{max}^+ . Cela signifie que la taille des cellules au centre du diffuseur est importante pour obtenir une bonne description de l'écoulement et des recirculations. La quatrième stratégie représente un bon compromis entre précision des résultats et taille du maillage ($\simeq 3\,700\,000$ cellules), avec une valeur maximale de y^+ de l'ordre de trois. Elle a donc été retenue.

4.5.4 Post-traitement pour l'optimisation

Le but de cette simulation est de déterminer les performances de l'échangeur, exprimées à travers l'efficacité et les pertes de charge de chacun des fluides. Le post-traitement des résultats vise donc à évaluer ces quantités.

Conformément à l'Eqn. (2.14) page 25, l'efficacité ε est le rapport entre la puissance échangée et la puissance maximale échangeable. La seconde se calcule via l'Eqn. (2.15). La puissance réellement échangée est extraite de la simulation depuis le côté chaud comme :

$$\Phi = \dot{m}_h c_{p,h} (\bar{T}_o - \bar{T}_i) \quad (4.67)$$

avec \bar{T}_i et \bar{T}_o les températures débitantes moyennes en entrée et sortie du côté chaud (voir Figure 4.22). On rappelle que les températures débitantes à travers une surface S orientée

25. Les canaux sont numérotés dans l'ordre croissant de \vec{e}_y (1 est au bord, 6 est au centre)

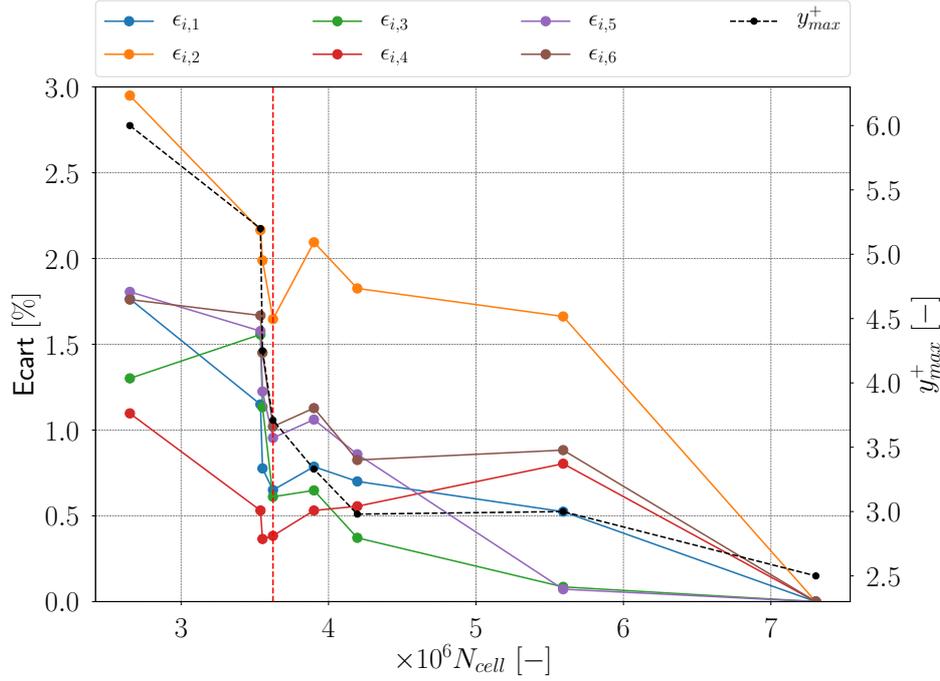


Figure 4.23 – Étude de sensibilité au maillage pour la configuration ECH-3D. L'évolution de $\epsilon_{i,j}$ (lignes continues en couleur) en fonction du nombre de cellules du maillage est représentée sur l'axe de gauche. L'axe de droite représente l'évolution de y_{max}^+ (en noir pointillé). Le trait pointillé rouge représente la stratégie de maillage (n° 4) qui a été retenue.

se calculent comme :

$$\bar{T} = \frac{\int_S \rho \vec{u} T \cdot d\vec{S}}{\int_S \rho \vec{u} \cdot d\vec{S}} \quad (4.68)$$

La perte de charge s'exprime comme la différence de pression statique moyenne entre l'entrée (i) et la sortie (o) à laquelle on ajoute la différence de pression dynamique :

$$\Delta P = (\bar{P}_i - \bar{P}_o) + \frac{1}{2} \left(\frac{\int_{S_i} \rho |\vec{u}| \vec{u} \cdot d\vec{S}_i}{S_i} + \frac{\int_{S_o} \rho |\vec{u}| \vec{u} \cdot d\vec{S}_o}{S_o} \right) \quad (4.69)$$

avec S_i et S_o les surfaces d'entrée et de sortie orientées selon une normale sortante du domaine.

L'écart-type de la distribution Υ , donnée par l'Eqn. (2.23) à la page 36, est également extrait des simulations.

L'analyse des simulations, réalisées avec un schéma en temps instationnaire, a mis en évidence l'apparition de tourbillons instationnaires causée par les décollements de coin au niveau du diffuseur. Ce phénomène bien connu de la littérature (Jeyapaul, 2011) est mis en évidence par la Figure 4.24. Elle montre les lignes de courant au centre du diffuseur et proche d'une paroi latérale pour trois instants. Alors que la recirculation au centre varie peu, les tourbillons proches de la paroi sont instationnaires. Une analyse a montré que ces variations ont un impact négligeable sur les résultats globaux (ϵ et ΔP) car leur temps caractéristique est bien plus court que celui mis par le fluide pour traverser la partie active. Néanmoins, les valeurs de Υ variant au cours du temps avec ces tourbillons, une

moyenne temporelle est réalisée pour cette grandeur.

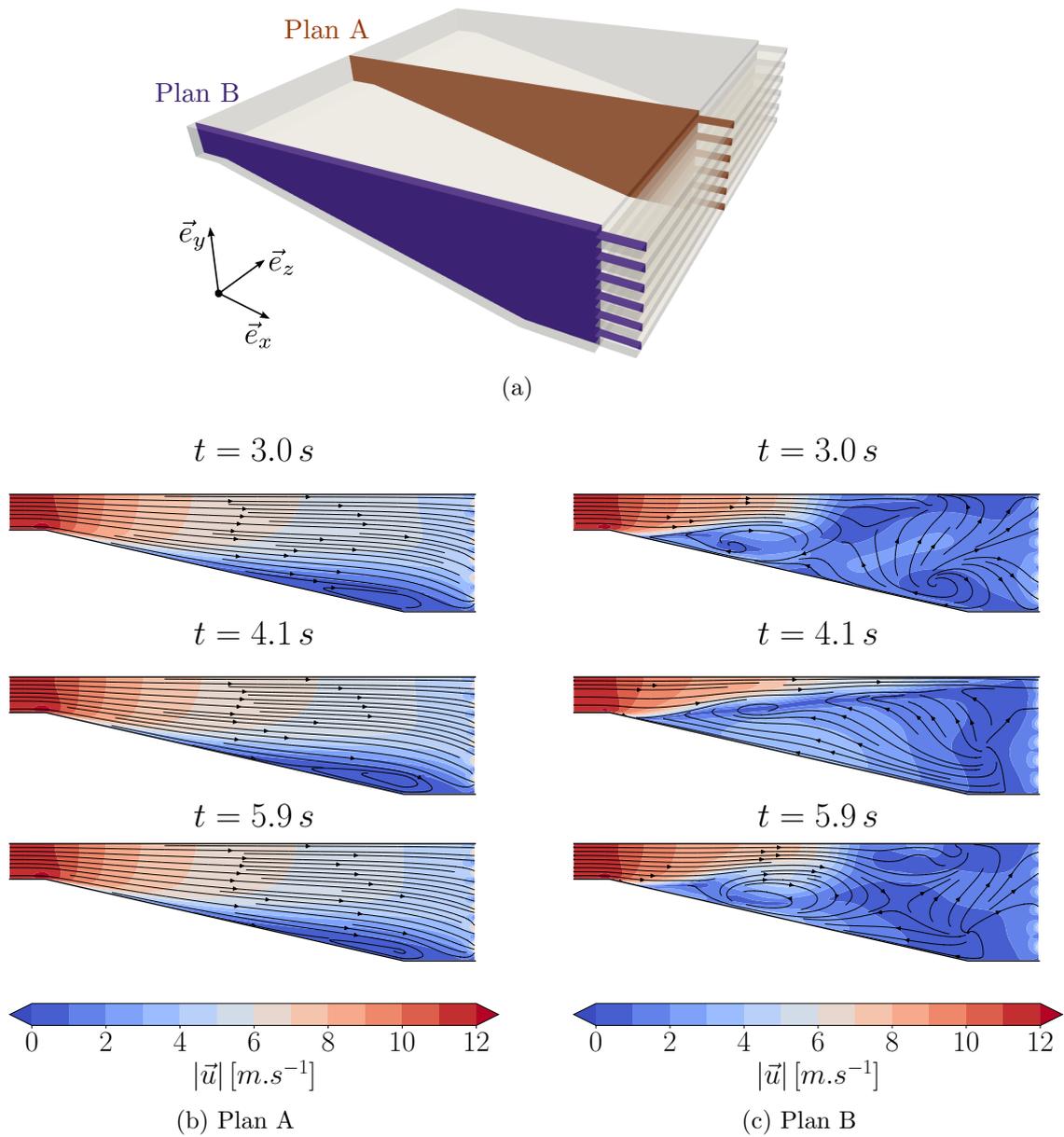


Figure 4.24 – Variations des lignes de courant au centre du diffuseur et proche d'une paroi latérale pour trois instants. Le champ de vitesse moyenne est également représenté par les courbes de niveaux en couleur.

CHAPITRE 5

Robustesse aux paramètres de modélisation

Ce chapitre présente une analyse du comportement des métamodèles et des résultats de l'optimisation lorsque le simulateur change. Trois axes sont explorés : le changement du modèle de turbulence, le changement de la méthode de propagation de la variation de la forme sur le maillage et le changement du solveur CFD utilisé.

Sommaire

5.1	Introduction	124
5.1.1	Problème d'optimisation	124
5.1.2	Changement de variable	125
5.2	Optimisation de référence	126
5.2.1	Construction du métamodèle et optimisation	127
5.2.2	Analyse des résultats	128
5.3	Robustesse aux modèles de turbulence	130
5.3.1	Simulations numériques	130
5.3.2	Résultats de l'optimisation	130
5.3.3	Analyse des surfaces de réponse	133
5.3.4	Conclusions et perspectives	136
5.4	Méthode de déformation de maillage	137
5.4.1	Avantages et inconvénients du morphing	137
5.4.2	Mise en données	138
5.4.3	Comparaison des résultats	141
5.4.4	Conclusions et perspectives	150
5.5	Utilisation d'un autre solveur CFD	151
5.5.1	Mise en données	151
5.5.2	Comparaison des plans d'expériences et des métamodèles	152
5.5.3	Analyse des résultats de l'optimisation	152
5.5.4	Comparaison des formes et conclusion	155
5.6	Conclusions du chapitre	156

5.1 Introduction

Comme présenté dans les chapitres précédents, lorsque le simulateur est un solveur de mécanique des fluides, la réponse qu'il donne est fortement dépendante de la mise en données utilisée. Les bonnes pratiques de simulations (Wintergerste et al., 2002) recommandent, entre autres, de bien réaliser le maillage, de bien choisir les paramètres numériques ou encore d'utiliser le modèle de turbulence le plus adapté à la physique modélisée. Lors de la phase de préparation des simulations, des études de sensibilité sont réalisées conduisant à une mise en données représentant un compromis coût/précision.

Cependant, quelle est l'influence de ces différents choix sur la capacité de la méthode utilisée dans les présents travaux à déterminer une solution optimale? Cette solution optimale est-elle toujours la même?

Ce chapitre cherche à répondre à ces questions en analysant le comportement des métamodèles et les résultats de l'optimisation de forme lorsque le simulateur est modifié, sur la base de la configuration ONESIDE. Pour cela un simulateur de référence est défini. Il s'agit du solveur CFD *Code_Saturne* utilisant le modèle de turbulence $k - \omega$ SST et une méthode de remaillage. Parmi les variations possibles, l'influence de trois changements du simulateur est étudiée indépendamment :

- le modèle de turbulence : les observations sont évaluées par simulation CFD en utilisant une méthode de remaillage et le modèle de turbulence $Bl - \bar{v}^2/k$;
- la méthode de propagation du changement de forme : les observations sont évaluées par des simulations reposant sur une méthode de déformation de maillage par fonction à base radiale et un modèle de turbulence $k - \omega$ SST ;
- le solveur CFD : les observations sont évaluées avec le solveur commercial ANSYS® Fluent, les mêmes maillages que la référence et un modèle de turbulence $k - \omega$ SST.

Pour chaque analyse, des métamodèles sont construits et l'optimisation est réalisée, afin d'être comparée à la référence. Cela permet de déterminer la sensibilité des résultats en fonction des simulateurs et de conclure sur la robustesse de la méthode proposée.

5.1.1 Problème d'optimisation

Les objectifs de l'optimisation de cette configuration sont d'une part de maximiser le transfert thermique, exprimé au travers du nombre de Nusselt, tout en minimisant le coefficient de perte de charge. Les trois dimensions du *rib* et leurs intervalles de variation (Eqns. (4.4 - 4.6) définissent l'espace des paramètres. Mathématiquement, le problème d'optimisation s'écrit comme :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & -Nu(\mathbf{p})/Nu_0 & (5.1) \\ \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & C_f(\mathbf{p})/C_{f0} & (5.2) \\ \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (5.3) \\ & e/2H \in [0.045; 0.63] & (5.4) \\ & E/2H \in [0.0405; 0.72] & (5.5) \\ & E \geq 0.9e & (5.6) \end{array} \right.$$

avec le vecteur de paramètres

$$\mathbf{p} = (h_{rib}, e, E) \in \mathbb{R}^3 \quad (5.7)$$

Paramètre	Valeurs											
h_{rib}/H	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.3						
$e/2H$	0.045	0.11	0.175	0.24	0.305	0.37	0.435	0.5	0.565	0.63		
$E/2H$	$0.9e/2H$	0.045	0.11	0.175	0.24	0.305	0.37	0.435	0.5	0.565	0.63	0.72

Tableau 5.1 – Valeurs prises par chaque paramètre pour la construction du plan d’expériences.

et l’espace des paramètres défini comme :

$$\mathcal{D} = \{\mathbf{p} \mid \text{Eqns. (5.3 - 5.6)}\} \quad (5.8)$$

Les Eqns. (5.3) à (5.5) définissent les intervalles de variation des paramètres et l’Eqn. (5.6) représente une contrainte sur la forme du *rib* assurant la fabricabilité du motif.

Ce problème d’optimisation est résolu grâce à l’algorithme NSGA-II et à deux métamodèles de krigeage (un pour chaque fonction objectif). Le plan d’expériences utilisé pour construire les métamodèles repose sur une discrétisation de \mathcal{D} et non pas sur un LHS. En effet, cela permet de décrire l’espace des paramètres de manière contrôlée et d’assurer une bonne qualité des métamodèles construits¹. Les plages de variation de chaque paramètre sont divisées en un nombre fini de valeurs, résumées dans le Tableau 5.1. Les valeurs de la largeur en pied de *rib* E qui violent la contrainte de fabricabilité définie par l’Eqn. (5.6) ne sont pas utilisées. Au final le plan d’expériences est construit sur la base de 441 observations, comme le montre la Figure 5.1(a). On y remarque également l’effet de la contrainte.

L’analyse des résultats de l’optimisation repose sur les outils de *clustering* et sur les SOM introduits dans le Chapitre 3. L’angle ψ du trapèze (voir Figure 4.1(a)) est utilisé pour représenter les résultats à la place de la largeur en pied, améliorant ainsi l’interprétation des paramètres.

5.1.2 Changement de variable

Bien définir l’espace des paramètres via les dimensions réelles du *rib* ait un sens physique, il est plus avantageux mathématiquement de considérer des paramètres dont les bornes sont indépendantes les unes des autres. C’est pourquoi un changement de variable pour $E/2H$ est utilisé pour s’affranchir de la contrainte de l’Eqn. (5.6). Le nouveau paramètre est défini comme :

$$\tilde{E} = \frac{0.9\frac{e}{2H} - \frac{E}{2H}}{0.9\frac{e}{2H} - 0.72} \in [0; 1] \quad (5.9)$$

et la répartition des observations du plan d’expériences modifié est visible sur la Figure 5.1(b). Ainsi, le problème d’optimisation devient non contraint.

Afin de vérifier que ce changement de variable impacte peu le résultat de l’optimisation, deux optimisations ont été réalisées à partir des 441 observations évaluées par simulation numérique avec une méthode de remaillage et le modèle de turbulence $k - \omega$ SST. Dans le premier cas, un couple de métamodèles² est construit en utilisant les dimensions du *rib* en

1. Pour cette étude, le nombre de simulations n’est pas critique et une stratégie d’enrichissement n’est pas envisagée car fortement dépendante du simulateur, amené à changer.

2. nombre de Nusselt et coefficient de perte de charge

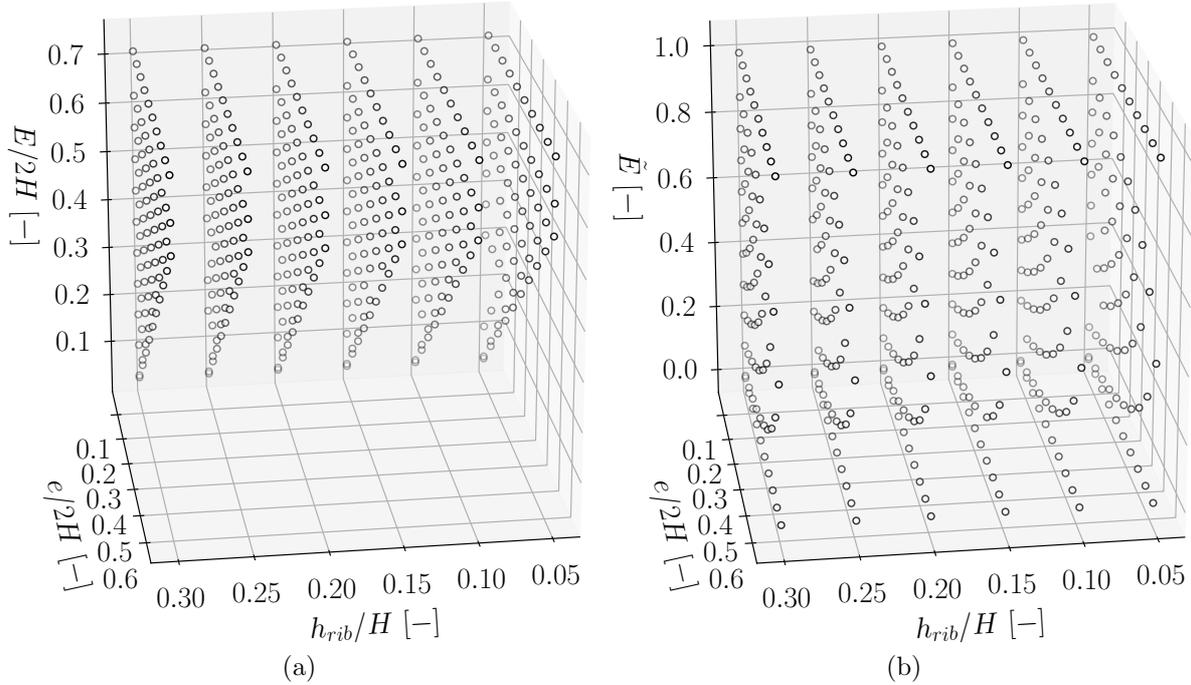


Figure 5.1 – Répartition des observations dans l'espace des paramètres - (a) En considérant les dimensions réelles. - (b) Avec le changement de variable.

tant que paramètres pour le métamodèle et l'optimisation. Dans le second cas, le vecteur de paramètres devient $\mathbf{p} = (h_{rib}, e, \tilde{E})$ et l'optimisation est réalisée sans contrainte.

Il a été vérifié que pour ces deux cas, les fronts de Pareto et la répartition des individus dans l'espace des paramètres étaient très semblables tout comme les formes mises en évidence par le *clustering* des individus optimaux. Le changement de variable n'impacte donc que très légèrement les résultats et sera adopté pour les études de ce chapitre. Ainsi le problème d'optimisation retenu s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & -Nu(\mathbf{p})/Nu_0 & (5.10) \\ \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & C_f(\mathbf{p})/C_{f0} & (5.11) \\ \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (5.12) \\ & e/2H \in [0.045; 0.63] & (5.13) \\ & \tilde{E} \in [0; 1] & (5.14) \end{array} \right.$$

avec $\mathbf{p} = (h_{rib}, e, \tilde{E})$.

5.2 Optimisation de référence

Afin de construire une base de référence pour l'analyse menée dans ce chapitre, les 441 observations du plan d'expériences sont évaluées par simulation numérique, avec une méthode de remaillage et le modèle de turbulence $k - \omega$ SST. Le couple de métamodèles $-Nu/Nu_0$ et C_f/C_{f0} est construit et l'optimisation de référence est réalisée. Le simulateur est ainsi choisi car il s'agit de la méthode la plus probable d'être utilisée dans un contexte industriel (comme indiqué au Chapitre 2).

Noyau de covariance	Maximisation de la vraisemblance	Effet de pépité	Tendance
Matérn $\nu = 5/2$	GENOUD (Mebane Jr et al., 2011) Pop. = 500 Max. gen. = 15	Estimation	Linéaire

Tableau 5.2 – Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage.

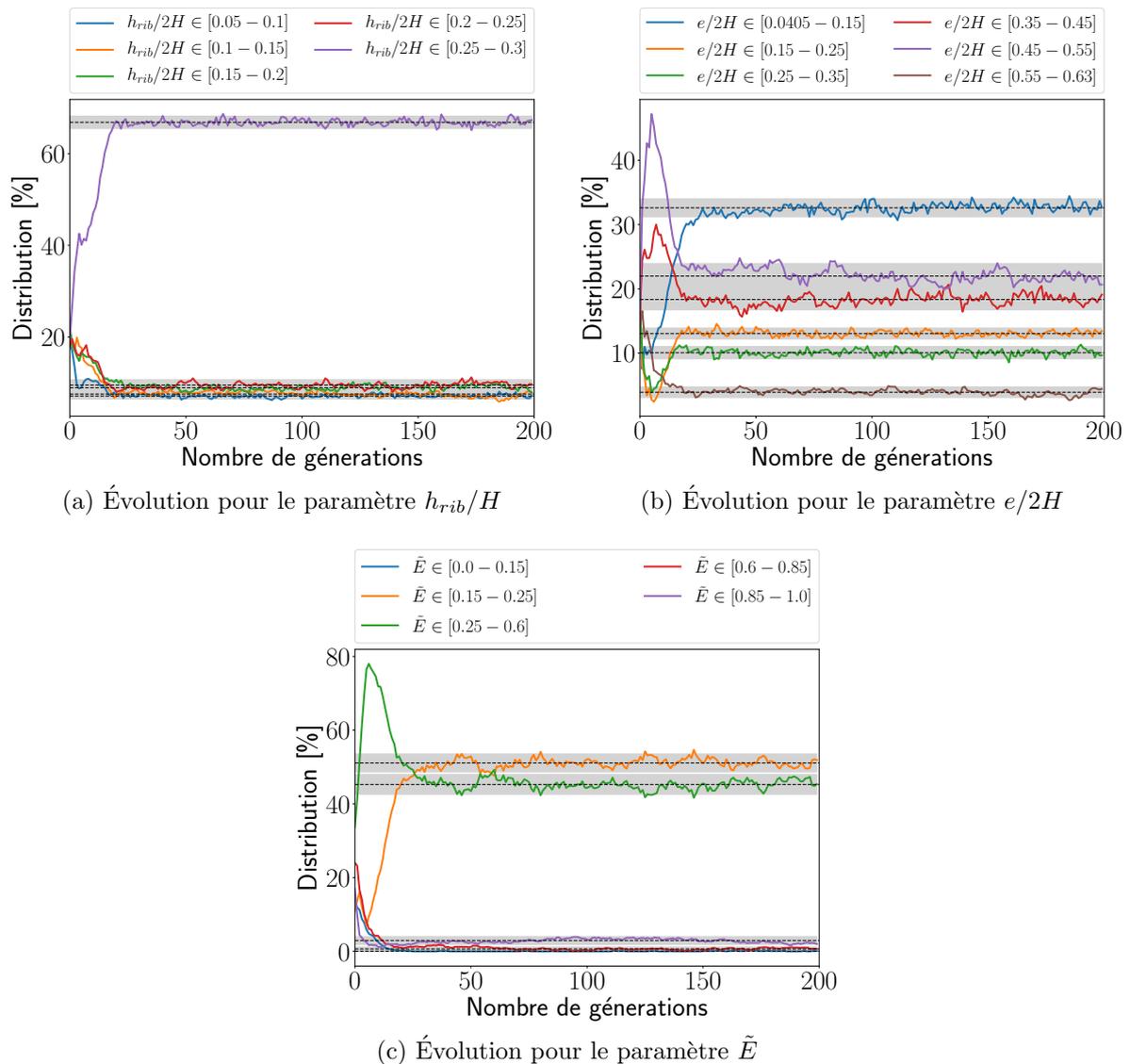


Figure 5.2 – Évolution de la distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans les différentes classes en fonction du nombre de générations pour les trois paramètres de l'optimisation - (a) h_{rib}/H - (b) $e/2H$ - (c) \tilde{E} . La ligne pointillée indique la distribution moyenne et les intervalles de confiance à 95% sont en gris.

5.2.1 Construction du métamodèle et optimisation

Les options de construction des métamodèles de krigeage utilisées dans cette étude sont résumées dans le Tableau 5.2. L'algorithme GENOUD permet de maximiser la log-vraisemblance et d'obtenir des résultats stables et répétables. Le sur-échantillonnage justifie l'ajout d'un effet de pépité. Les observations étant très proches les unes des autres,

Centre	Paramètres			Objectifs		Écart métamodèle/simulation [%]			
	h_{rib}/H	$e/2H$	$E/2H$	$-\frac{Nu}{Nu_0} [-]$	$\frac{C_f}{C_{f0}} [-]$	$-\frac{Nu}{Nu_0}$	$\frac{C_f}{C_{f0}}$	Moyenne	Écart-type
◇	0.0661	0.056	0.2274	-1.29	1.44	2.35	3.43	$-Nu/Nu_0$	
◇	0.1169	0.6022	0.7120	-1.48	1.65	1.42	0.66	1.11	0.88
○	0.1870	0.4735	0.5588	-1.78	2.88	0.82	0.05		
□	0.2838	0.4722	0.5006	-2.10	4.42	1.14	1.0	C_f/C_{f0}	
△	0.2941	0.4182	0.5061	-2.20	5.01	0.56	0.06	0.64	1.19
▽	0.3000	0.1669	0.2815	-2.40	7.46	0.40	0.08		

Tableau 5.3 – Paramètres, performances issues de la simulation et écarts relatifs en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les six centres de groupe.

l'estimation des paramètres du krigeage aboutit à des surfaces de réponse bruitées. L'introduction de cet effet conduit à des paramètres de portée plus important et ainsi, la surface de réponse devient plus "lisse". L'estimation de la variance τ^2 de l'effet de pépité, normalisée par l'amplitude de variation des observations, est de l'ordre de 0.001%, ce qui est faible et n'induit pas un trop grand décalage de la prédiction de krigeage par rapport aux observations du plan d'expériences. Cela a été confirmé par une *cross-validation*³ à 10 sous-ensembles qui a conduit à des valeurs de Q^2 égales à 0.999 et des valeurs de $RMSE_{CV}$ et MAE_{CV} relatives inférieures à 0.5% pour les deux métamodèles.

Afin de garantir une exploration de l'espace des paramètres la plus complète possible, une population de 900 individus sur 200 générations est utilisée par le NSGA-II. La Figure 5.2 met en évidence la convergence de la distribution des individus dans l'espace des paramètres. Après la génération 50, la distribution se stabilise dans chaque classe pour tous les paramètres. Les intervalles de confiance à 95% étant inférieurs à 5%, la solution du NSGA-II est estimée convenablement convergée. L'analyse des résultats utilise les cinquante dernières générations pour une meilleure représentativité.

5.2.2 Analyse des résultats

Les résultats de l'optimisation reposant sur les métamodèles de référence sont présentés sur la Figure 5.3. Le front de Pareto sur la Figure 5.3(a) montre une forte corrélation antagoniste entre l'influence du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge. Le *clustering* des individus de l'ensemble de Pareto, visible sur la Figure 5.3(b), met en évidence 6 groupes, caractérisés par leur centre. Les triplets de paramètres de chaque centre sont résumés dans le Tableau 5.3. Les performances des centres prédites par les métamodèles ont été reportées sur le front de Pareto et apparaissent en symboles vides. Afin de qualifier les métamodèles, une simulation CFD a été réalisée pour chacun des centres. Les performances en découlant, résumées dans le Tableau 5.3, apparaissent en symboles pleins (noirs) sur le front de Pareto avec le champ de la différence de température associé⁴. Les SOM sont visibles sur la Figure 5.3(c).

Le Tableau 5.3 présente également les écarts relatifs de la prédiction du métamodèle par rapport à la valeur issue de la simulation de qualification. Ces écarts sont en moyenne

3. voir Section 3.3.4

4. différence entre la température moyenne des parois et la température locale.

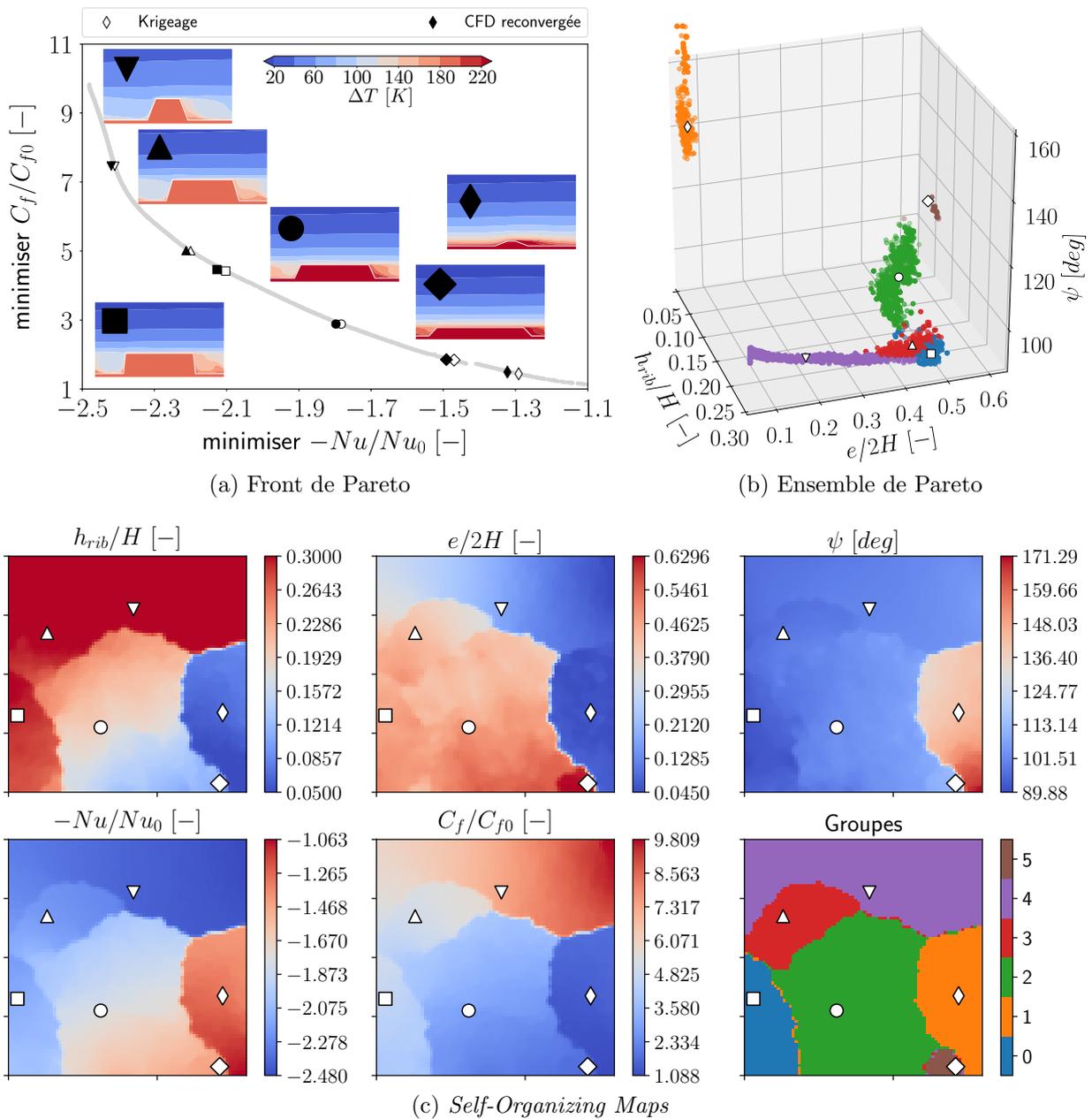


Figure 5.3 – Résultats de l’optimisation de référence - (a) le front de Pareto avec les six centres de groupe mis en évidence. Les symboles vides marquent la prédiction de la moyenne de krigeage et les symboles pleins indiquent les performances issues d’une simulation de qualification. - (b) Distribution des individus de l’ensemble de Pareto dans l’espace des paramètres avec une coloration par groupe. Les centres de groupes sont mis en évidence par les symboles vides. (c) *Self-Organizing Maps* des individus de l’ensemble et du front de Pareto identifiant les trois paramètres (en haut), les deux objectifs et les groupes (en bas).

de l’ordre de 1% avec une valeur maximale pour le *rib* identifié par le symbole \diamond . Cette précision de la prédiction est une conséquence du plan d’expériences, dont l’échantillonnage de l’espace des paramètres est très fin.

L’analyse de résultats de la Figure 5.3 permet de mettre en évidence le comportement thermohydraulique du *rib* en fonction des paramètres de la forme. Une hauteur de *rib*

importante (∇) conduit à un nombre de Nusselt et à un coefficient de perte de charge important. *A contrario*, une hauteur faible (\diamond) induit peu d'échanges thermiques et peu de perte de charge. Les champs de différence de température montrent en effet que d'importants taux de blocage génèrent des recirculations en aval du *rib* qui homogénéisent la température, alors que les faibles taux de blocage conduisent à une stratification de la température qui dégrade le transfert thermique. L'angle ψ joue également un rôle important. Les formes les plus profitables thermiquement⁵ sont celles dont la valeur de ψ est inférieure à 120 deg. Le passage de formes optimales thermiquement (∇) à des formes optimales vis à vis de la perte de charge (\diamond) se traduit par une augmentation progressive de la largeur en tête de *rib* $e/2H$ (de ∇ à \diamond), puis par une diminution de h_{rib}/H (\circ).

Ces résultats mettent en évidence l'influence majeure de la hauteur du *rib* sur les performances thermohydrauliques, comme rapporté par Kim et al. (2010). Par la suite, les différentes analyses seront menées par comparaison à cette optimisation de référence.

5.3 Robustesse aux modèles de turbulence

Comme abordé dans la Section 2.2.3.2 et mis en évidence dans la Section 4.2.5, le choix d'un modèle de turbulence va impacter les résultats de la simulation de par les hypothèses physiques sous-jacentes que chacun d'eux utilise. Ce choix s'appuie généralement sur la recherche d'un compromis coût/précision (Wintergerste et al., 2002). Dans les présents travaux, le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$ est choisi en tant que modèle précis mais onéreux, et le modèle de turbulence $k - \omega$ SST représente un des standards industriels.

Cette section vise à comparer l'influence du choix du modèle de turbulence sur les résultats de l'optimisation. Pour cela, les 441 observations du plan d'expériences de référence sont évaluées selon la mise en données décrite Section 4.2 en utilisant le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$. Un couple de métamodèles est alors construit et les résultats de l'optimisation sont comparés à ceux obtenus en utilisant le couple de métamodèles de référence.

5.3.1 Simulations numériques

Les 441 simulations ont été réalisées via une reprise de calcul depuis les résultats des simulations en $k - \omega$ SST. Cela a permis d'une part de réduire le temps de calcul et d'autre part de rendre le processus de simulation plus robuste. En effet, le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ s'est montré sensible aux conditions initiales des variables turbulentes. Pour certaines configurations, un démarrage de calcul depuis une solution uniforme entraîne une relaminarisation non physique de l'écoulement. Démarrer le calcul depuis une turbulence convergée et résolue par le $k - \omega$ SST permet ainsi de contourner cette difficulté.

Toutefois, certaines simulations n'ont pas convergé. Elles ont donc été retirées du plan d'expériences. Au final celui-ci est constitué de 325 observations.

5.3.2 Résultats de l'optimisation

Le problème d'optimisation défini par les Eqns. (5.10) à (5.14) est résolu en utilisant deux couples de métamodèles. Le premier repose sur 325 observations issues des simulations de référence avec le modèle de turbulence $k - \omega$ SST. Le second couple est construit

5. conduisant à une valeur du nombre de Nusselt importante,

avec les même 325 observations, cette fois ci évaluées via des simulations utilisant le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$.

5.3.2.1 Construction des métamodèles et optimisation

Les couples de métamodèles sont construits en utilisant les options résumées dans le Tableau 5.2. Cependant, pour le métamodèle $-Nu/Nu_0$, construit à partir des simulations $Bl - \overline{v^2}/k$, la valeur de la variance normalisée de l'effet de pépite τ^2 , estimée par la minimisation de la log-vraisemblance, est de l'ordre de 0.2%, ce qui est relativement élevé. L'effet de pépite a donc été remplacé par un bruit constant fixé à 0.06% de l'amplitude de variation de $-Nu/Nu_0$, conduisant à une bonne interpolation dans la majorité de l'espace des paramètres et à un lissage des perturbations. La qualité de la prédiction de chaque métamodèle est évaluée par une *cross-validation* à 10 sous-ensembles. Pour les métamodèles reposant sur les observations évaluées en $k - \omega$ SST, les erreurs de prédiction relatives ($RMSE_{CV}$ et MAE_{CV}) sont de l'ordre de 0.5% et le coefficient de corrélation quadratique vaut $Q^2 = 0.999$. Pour les métamodèles reposant sur les simulations en $Bl - \overline{v^2}/k$, les indicateurs de qualité sont légèrement moins bons à cause de l'ajout du bruit, de l'ordre de 2% pour les erreurs et 0.98 pour Q^2 , mais les prédictions restent néanmoins précises. Ce haut niveau de précision est une conséquence du sur-échantillonnage de l'espace des paramètres.

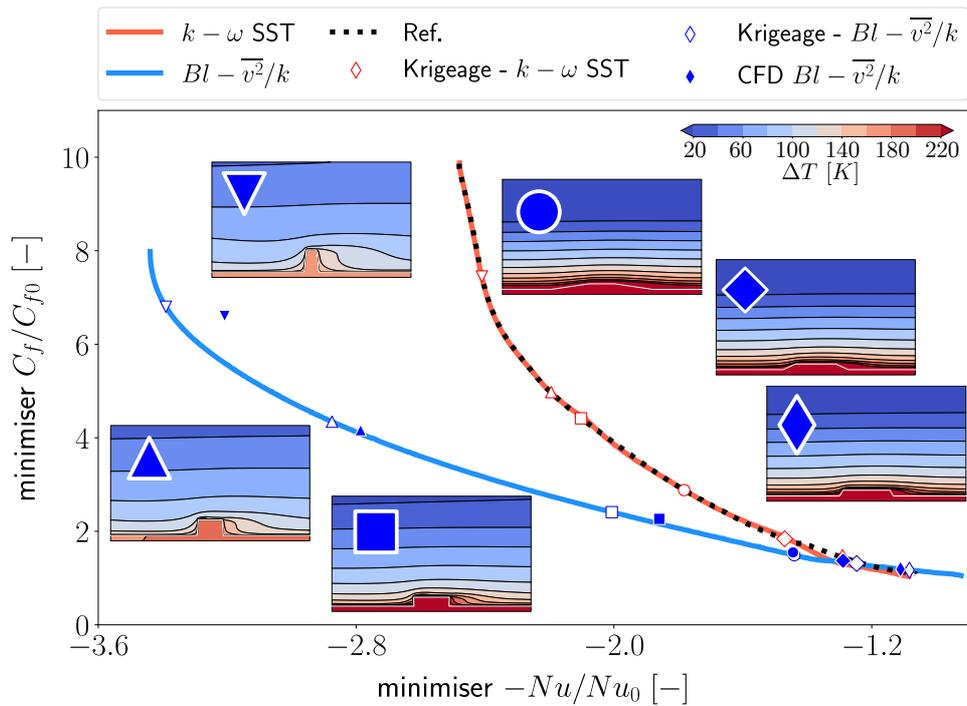
Comme pour la référence, l'algorithme NSGA-II fait évoluer une population de 900 individus sur 200 générations. La convergence est atteinte à la génération 50 et l'analyse des résultats repose sur les générations 150 à 200.

5.3.2.2 Analyse des résultats de l'optimisation

Les résultats des deux optimisations reposant sur les deux couples de métamodèles sont présentés sur la Figure 5.4, avec les fronts de Pareto et la distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans l'espace des paramètres. Le *clustering* met en évidence les groupes et leurs centres, dont les performances sont reportées sur le front de Pareto en symboles vides. Comme précédemment, une simulation de chacun des centres est réalisée et les performances apparaissent en symboles pleins sur le front. Les champs de la différence de température sont également visibles.

On remarque dans un premier temps que le front de Pareto issu de l'optimisation $k - \omega$ SST, en rouge sur la Figure 5.4(a), est identique à celui de la référence (en ligne noire pointillée), bien que plus de 100 observations aient été retirées du plan d'expériences. La seule différence notable est la réorganisation des individus par rapport à la référence dans l'espace des paramètres visible sur la Figure 5.4(b) (voir Figure 5.3(b) pour la comparaison). Cela est dû à une modification de la surface de réponse engendrée par l'absence de certaines observations. Les groupes, bien que légèrement différents topologiquement, peuvent ainsi être caractérisés par les centres provenant de la référence, identifiés par les symboles vides rouges sur le front de Pareto.

L'observation du front de Pareto issu de l'optimisation $Bl - \overline{v^2}/k$, en bleu sur la Figure 5.4(a) met en évidence une plus grande amplitude de variation des performances pour le nombre de Nusselt. L'écart entre la valeur minimale de $-Nu/Nu_0$ prédit par le $Bl - \overline{v^2}/k$ par rapport au $k - \omega$ SST approche 40%. L'amplitude de variation du coefficient de perte de charge est similaire pour les deux modèles de turbulence. La distribution des



(a) Front de Pareto

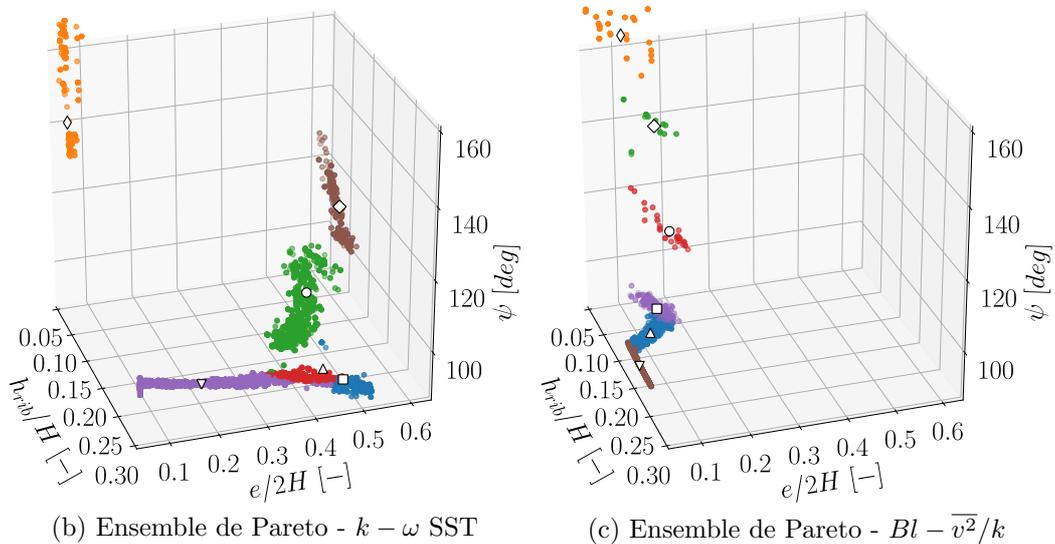
(b) Ensemble de Pareto - $k - \omega$ SST(c) Ensemble de Pareto - $Bl - \overline{v^2}/k$

Figure 5.4 – Comparaison des deux optimisations reposant sur les métamodèles $k - \omega$ SST et $Bl - \overline{v^2}/k$ - (a) Comparaison des fronts de Pareto avec les performances des centres de groupe identifiés par des symboles vides pour les métamodèles et pleins pour la qualification CFD. Les champs de la différence de température issus de la CFD sont également visibles - (b - c) Distribution des individus de l'ensemble de Pareto pour l'optimisation reposant sur les simulations $k - \omega$ SST (b) et $Bl - \overline{v^2}/k$ (c).

individus dans l'espace des paramètres visible sur la Figure 5.4(c), est très différente de celle du modèle $k - \omega$ SST. Les individus se concentrent principalement autour de deux zones, facilement identifiables à partir des SOM de la Figure 5.5.

La première est caractérisée par un angle ψ d'environ 90 ± 5 deg, avec une variation de la hauteur et de la largeur en tête. Elle regroupe les formes définies par les centres

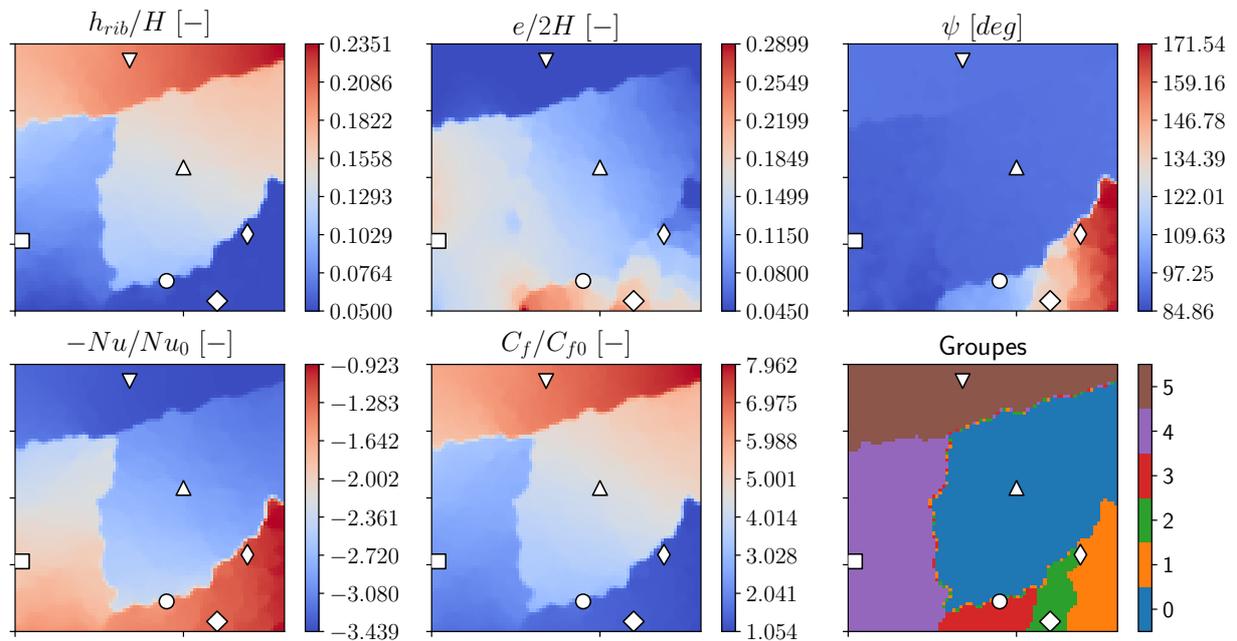


Figure 5.5 – *Self-Organizing Maps* des individus de l'ensemble et du front de Pareto issu de l'optimisation depuis les métamodèles $Bl - \overline{v^2}/k$. Les trois paramètres apparaissent en haut, les deux objectifs et les groupes en bas.

∇ , \triangle et \square . Les formes les plus étroites et hautes (∇) conduisent à un transfert thermique et un coefficient de perte de charge importants. Le passage vers des formes représentant un meilleur compromis se traduit par une diminution importante de la hauteur avec une largeur en tête de *rib* relativement constante ($e/2H \simeq 0.15$). Ce comportement diffère des résultats en $k - \omega$ SST, pour lesquels ce passage résulte d'une augmentation de $e/2H$, la hauteur étant constante et maximale.

La seconde zone est caractérisée par une hauteur égale à la borne minimale $h_{rib}/H = 0.05$, et regroupe les centres de groupe \circ , \diamond et \diamond . La largeur en tête de *rib* reste relativement petite et l'angle ψ varie beaucoup, tout en restant supérieur à 100 deg. Ces trois types de forme conduisent à un transfert thermique très faible et très peu de perte de charge. Les formes caractérisées par le centre \diamond sont similaires pour les deux optimisations tout comme les performances prédites. Cependant, les géométries qu'elles décrivent sont marginalement différentes d'une plaque plane et sont donc peu intéressantes à considérer.

Les performances des simulations de qualification des métamodèles, résumées dans le Tableau 5.4, sont représentées par les symboles pleins sur le front de Pareto de la Figure 5.4(a). Les écarts entre la prédiction par la moyenne de krigeage et la CFD sont résumés dans le Tableau 5.4. Ces écarts sont plus importants que pour la référence. Cela s'explique par l'ajout d'un effet de pépite, mais également par les fortes perturbations de la surface de réponse lorsque les angles sont importants et par l'absence des 100 observations qui n'ont pas pu être prédites par le modèle de turbulence à cause d'une relaminarisation de l'écoulement.

5.3.3 Analyse des surfaces de réponse

Afin de comprendre les différences entre les deux optimisations mises en évidence précédemment, une analyse des surfaces de réponse prédites par la moyenne de krigeage est réalisée.

Centre	Paramètres			Objectifs		Écart métamodèle/simulation [%]			
	h_{rib}/H	$e/2H$	$E/2H$	$-\frac{Nu}{Nu_0} [-]$	$\frac{C_f}{C_{f0}} [-]$	$-\frac{Nu}{Nu_0}$	$\frac{C_f}{C_{f0}}$	Moyenne	Écart-type
◇	0.0501	0.1171	0.4557	-1.11	1.19	2.50	1.17	$-Nu/Nu_0$	
◇	0.05110	0.1824	0.2929	-1.29	1.37	3.25	4.37	3.8	2.43
○	0.0521	0.2105	0.2415	-1.44	1.55	0.26	3.99	C_f/C_{f0}	
□	0.0812	0.1610	0.1577	-1.86	2.27	7.92	6.35		
△	0.1407	0.1078	0.1170	-2.79	4.16	3.18	4.34	3.96	1.42
▽	0.2009	0.04530	0.0661	-3.21	6.60	5.69	4.0		

Tableau 5.4 – Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD pour le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$.

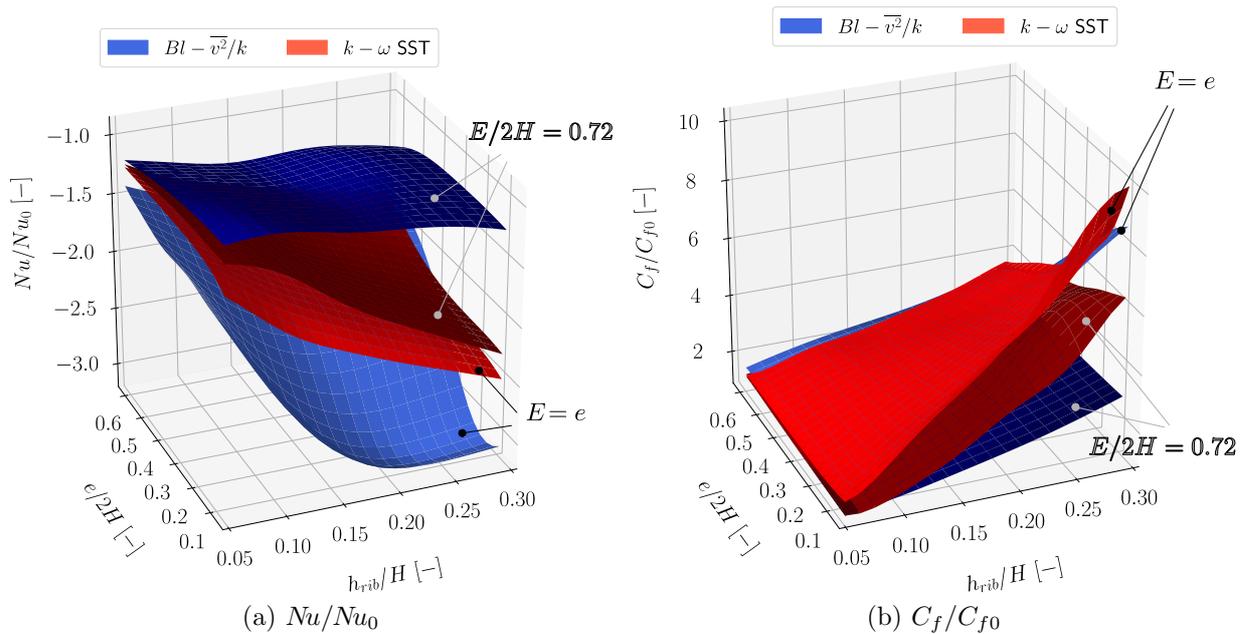


Figure 5.6 – Visualisation en perspective des surfaces de réponses du nombre de Nusselt (a) et du coefficient de perte de charge (b) pour les deux modèles de turbulence en fonction de h_{rib}/H et $e/2H$. Deux largeurs de pied de rib ($E/2H$) sont représentées.

La visualisation, sur la Figure 5.6, des surfaces de réponse en trois dimensions permet de mettre en évidence la plus grande amplitude de variation du nombre de Nusselt pour le modèle de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$. Pour des formes ayant un angle ψ de 90 deg, il aura tendance à donner un nombre de Nusselt plus important que le modèle $k - \omega$ SST⁶. Au contraire, pour des formes plus planes, il aura tendance à prédire un transfert thermique moins important. Les surfaces de réponse pour le coefficient de perte de charge sont similaires pour les deux modèles de turbulence.

L'optimisation reposant sur les métamodèles $Bl - \overline{v^2}/k$ a mis en évidence deux zones de l'espace des paramètres regroupant les individus optimaux. La première lorsque $\psi = 90$ deg et la seconde lorsque $h_{rib}/H = 0.05$, la valeur des deux autres paramètres étant

6. En cohérence avec le cas de validation dans la Section 4.2.5

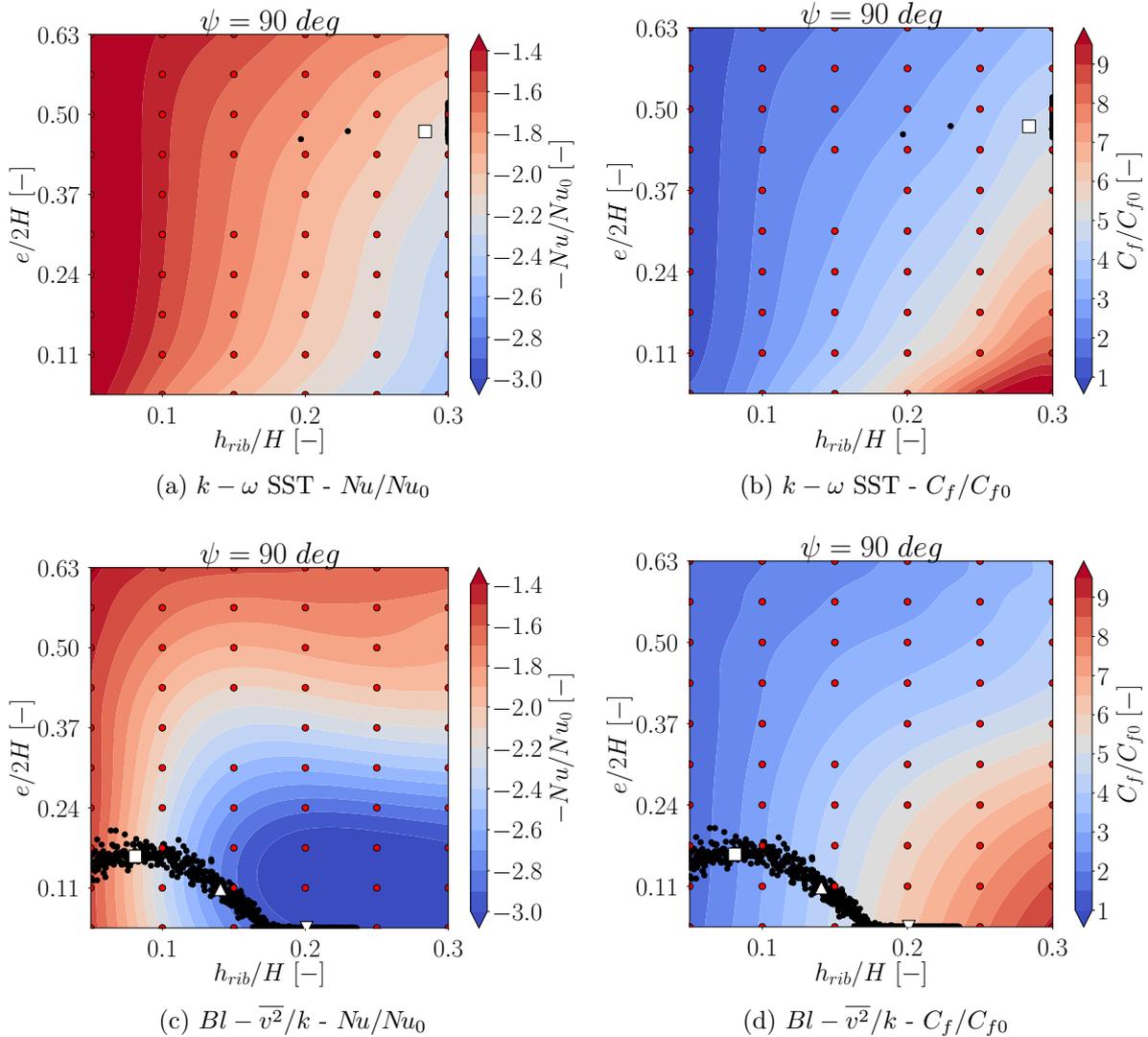


Figure 5.7 – Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $\psi = 90$ deg pour le nombre de Nusselt (à gauche) et le coefficient de perte de charge (à droite) et pour les modèles de turbulence $k - \omega$ SST (en haut) et $Bl - \overline{v^2}/k$ (en bas). Les points rouges identifient la position des observations du plan d'expériences, les points noirs celle des individus de l'ensemble de Pareto et les symboles vides celle des centres de groupe.

variable.

La Figure 5.7 montre, pour la première zone, une représentation des courbes de niveaux des surfaces de réponse des deux objectifs pour chaque modèle de turbulence. Les courbes du coefficient de perte de charge mettent en évidence un comportement similaire des deux modèles de turbulence, à la fois en amplitude et en variation. Les courbes de $-Nu/Nu_0$ sont elles très différentes. Le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$ prédit un transfert thermique plus important pour les formes hautes et étroites (en bleu en bas à droite de la Figure 5.7(c)) que le modèle $k - \omega$ SST. D'autre part, alors que le $k - \omega$ SST montre une plus forte sensibilité à la hauteur qu'à la largeur en tête de *rib*, le $Bl - \overline{v^2}/k$ affiche une sensibilité équivalente pour les deux paramètres à partir de la zone de transfert maximal. En effet, dans le premier cas $-Nu/Nu_0$ reste presque constant quand h_{rib}/H est constant et que $e/2H$ diminue, mais dans le second cas, on distingue également une forte diminution. C'est cela qui explique

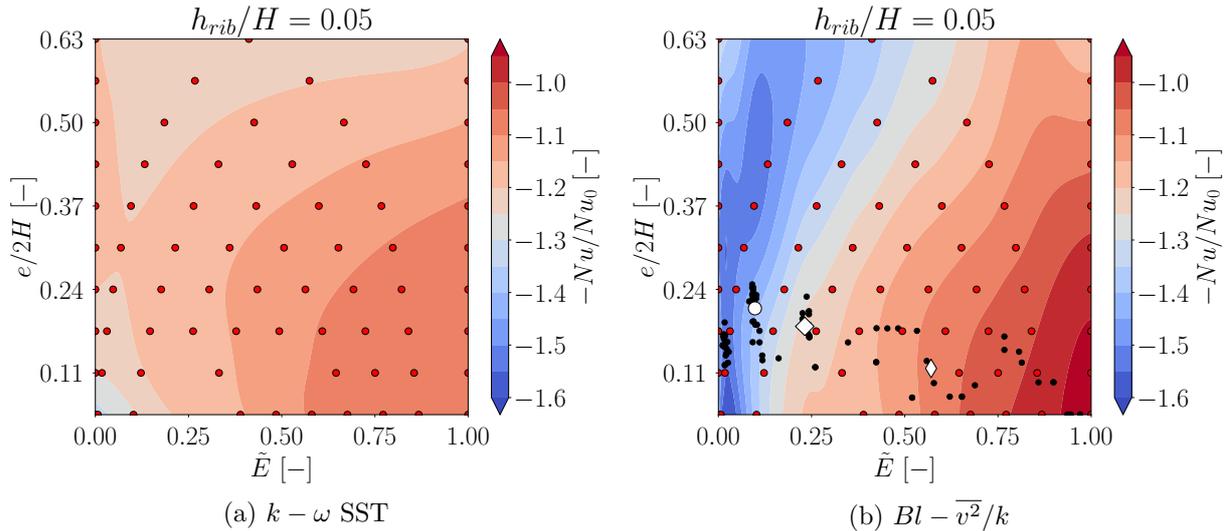


Figure 5.8 – Courbes de niveaux des surfaces de réponse du nombre de Nusselt lorsque $h_{rib}/H = 0.05$ pour les modèles de turbulence $k - \omega$ SST (à gauche) et $Bl - \overline{v^2}/k$ (à droite). Le changement de variable \tilde{E} est utilisé plutôt que ψ . Les points rouges identifient la position des observations du plan d'expériences, les points noirs celle des individus de l'ensemble de Pareto et les symboles vides celle des centres de groupe.

la différence de distribution dans l'espace des paramètres observée précédemment.

La Figure 5.8 représente les courbes de niveaux du nombre de Nusselt pour chaque modèle de turbulence lorsque $h_{rib}/H = 0.05$. Elle met en évidence une forte variation de $-Nu/Nu_0$ pour le $Bl - \overline{v^2}/k$ associée à des courbes de niveau plus chahutées (en haut à gauche de la Figure 5.8(b) notamment). Ceci explique la dispersion des individus de l'ensemble de Pareto (en noir) dans cette zone.

L'analyse de ces deux zones met également en évidence que le sur-échantillonnage utilisé, bien que donnant de bons résultats en terme de prédiction, est limité dans sa description des zones optimales de l'espace des paramètres. Les stratégies d'enrichissement reposant sur l'exploitation sont une solution permettant de pallier ce problème.

5.3.4 Conclusions et perspectives

La première conclusion évidente est que la physique prédite par les deux modèles de turbulence est très différente. Au vu des résultats de la validation expérimentale, il s'agit d'un résultat attendu. De fait, les surfaces de réponse obtenues après la métamodélisation par krigeage sont différentes : l'amplitude de variation du nombre de Nusselt est beaucoup plus importante pour le modèle $Bl - \overline{v^2}/k$. Les variations des objectifs en fonction des paramètres semblent au premier abord globalement conservées. En effet, les *ribs* les plus efficaces thermiquement sont caractérisés par une hauteur importante. Les résultats de l'optimisation sont toutefois différents, principalement à cause de l'influence des deux autres paramètres qui est prédite différemment par les deux modèles.

La description de la physique reste donc un point sensible de la méthode d'optimisation, et la supposée véracité du simulateur (voir Section 3.1.3.4) est une hypothèse forte. Il faut donc soigneusement réaliser les étapes de mise en données et de validation afin de réduire au maximum les incertitudes liées à ce choix.

Bien que la physique soit prédite différemment, la méthode d'optimisation reste ro-

buste à ce changement au sens où elle permet d'obtenir des surfaces de réponse de bonne qualité et qu'une solution optimale au sens de Pareto est trouvée.

Afin de réduire cette dépendance aux modèles physiques, une suite possible aux présents travaux serait d'utiliser des métamodèles à fidélité multiples (*multifidelity surrogates models*). Cette approche (Kuya et al., 2011; Park et al., 2017) construit des métamodèles sur la base d'observations issues de deux (ou plusieurs) simulateurs de précisions et donc de coûts différents. Le premier, dit de basse fidélité (*low-fidelity*) est peu onéreux et peu précis alors que le second, dit de haute fidélité (*high-fidelity*) est plus cher mais précis. Kuya et al. (2011) utilisent une simulation CFD peu onéreuse et une analyse expérimentale beaucoup plus précise, mais il est envisageable d'utiliser deux simulateurs numériques reposant sur le modèle $k - \omega$ SST et la LES par exemple. Les tendances globales seraient captées par le simulateur basse fidélité puis corrigées par le simulateur haute fidélité. Cela permettrait d'obtenir un métamodèle plus proche de la réalité à moindre coût.

5.4 Méthode de déformation de maillage

Comme abordé dans le paragraphe 2.2.3.5, la propagation du changement de forme au maillage est une étape importante dans le processus d'optimisation. Elle peut être réalisée par le remaillage de la géométrie ou par déformation d'un maillage existant, la seconde méthode présentant divers avantages. L'utilisation de l'une ou l'autre des méthodes peut avoir un impact sur les résultats de la simulation et peut donc influencer sur la construction du métamodèle et *in fine*, sur les résultats de l'optimisation.

Cette section rappelle dans un premier temps les avantages et inconvénients des méthodes de déformation. Elle présente ensuite la mise en données utilisée pour la configuration ONESIDE assurant le *morphing* par RBF⁷. Les 441 observations du plan d'expériences sont simulées à nouveau avec une modification de la forme par *morphing*. La qualité des maillages déformés, le temps de calcul, les métamodèles obtenus et les résultats de l'optimisation sont alors comparés aux résultats issus du plan d'expériences de référence.

5.4.1 Avantages et inconvénients du *morphing*

L'utilisation d'une méthode de déformation de maillage apporte certains avantages par rapport à une méthode de remaillage (Mastrippolito et al., 2018a) :

1. elle permet de s'**affranchir des besoins d'une stratégie de maillage robuste**, qui peut être complexe à définir, et **conserve le savoir-faire métier** mis en œuvre sur le maillage initial.
2. elle **préserve la connectivité du maillage**. Cela simplifie (ou permet) la réalisation de reprises de calcul sans interpolation de données, induisant une réduction du temps de calcul. De plus, le remaillage pourrait provoquer une certaine discontinuité de la réponse du solveur, que le *morphing*, par la génération d'une déformation continue à iso-connectivité serait susceptible de limiter.
3. pour de petites perturbations de la forme, il est envisageable de considérer que le remaillage induise également une variation des performances à cause d'un changement de connectivité, difficilement quantifiable. Si les gradients de la réponse du

7. Radial Basis Functions, détaillée dans l'Annexe B

simulateur en fonction des paramètres sont nécessaires, on peut raisonnablement espérer que le morphing conduise à une meilleure estimation de ceux-ci.

4. d'un point de vue pratique, les environnements (au sens informatique) du solveur et des outils de pré-traitement (CAO, maillage) peuvent être différents.

Néanmoins, dans le cadre de l'optimisation, toutes les formes de l'espace des paramètres peuvent ne pas être accessibles par cette méthode. En effet, la déformation est contrainte par la qualité du maillage (repliement de cellules, rapport d'aspect), les conditions aux limites (périodicité, symétrie) ou des surfaces non déformables (plan).

5.4.2 Mise en données

La méthode de déformation par RBF (Aubert et al., 2017) est utilisée pour plusieurs raisons :

- elle produit un champ de déplacement continu et indépendant du maillage ;
- elle ne requiert pas la connaissance de la connectivité entre les nœuds, permettant ainsi de traiter de nombreux types de maillage ;
- elle produit des déformations robustes conduisant à des maillages de bonne qualité.

Les détails de la formulation sont décrits en Annexe B. On ne s'intéressera ici qu'à la mise en application de la méthode.

5.4.2.1 Choix des fonctions

La déformation de maillage par RBF repose sur la position des points de contrôle, l'évaluation des distances entre ces points et les nœuds du maillage, ainsi que sur le choix d'une fonction à base radiale.

La distance est mesurée par la norme euclidienne normalisée :

$$d(\vec{\delta}) = \frac{1}{r_0} \|\vec{\delta}\| \quad (5.15)$$

avec r_0 , le rayon d'action (*support radius*). La fonction à base radiale utilisée est une fonction à support compact C^2 de Wendland. En effet, de précédentes études ont démontré son efficacité pour des problèmes de CFD (Rozenberg et al., 2014; Mocanu et al., 2013). Elle est définie comme :

$$\phi(d) = \begin{cases} (4d + 1)(1 - d)^4, & \text{if } d < 1 \\ 0, & \text{if } d \geq 1 \end{cases} \quad (5.16)$$

C'est une fonction qui décroît de manière monotone quand la distance normalisée d augmente, et qui est nulle si cette distance est plus grande que 1.

Comme l'illustre la Figure 5.9, les quatre coins du *rib* et des limites extérieures de la couche limite sont définis en tant que points de contrôle mobiles⁸ (○). Le déplacement de ces points est connu et dépend des paramètres de la forme. Les coins du canal sont immobiles⁹ (◆). Tous les nœuds du maillage se trouvant sur les lignes rouges sont considérés comme des points de contrôle glissants¹⁰. Le rayon d'action est fixé à 4 fois le déplacement maximum des points de contrôle mobiles, induit par le changement de forme.

8. *moving control points*

9. *fixed control points*

10. *sliding control points*

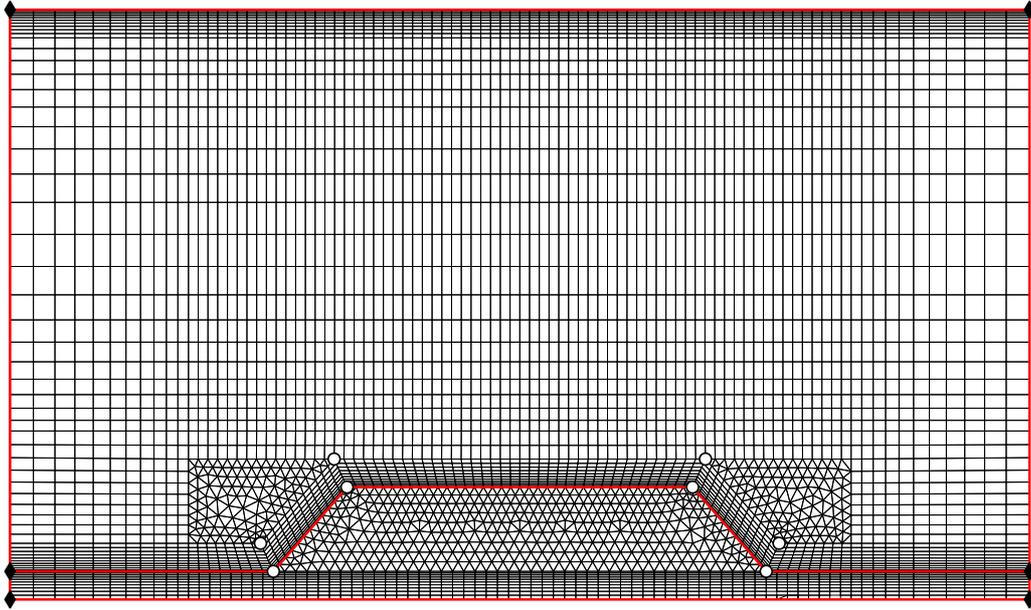


Figure 5.9 – Mise en données du morphing pour la configuration ONESIDE avec une illustration du maillage initial ($h_{rib}/H = 0.15$, $e/2H = 0.305$ et $E/2H = 0.435$). Le nombre de cellules affichées a été réduit pour des questions de lisibilité de la figure. Les cercles vides (\circ) représentent les points mobiles, les losanges (\blacklozenge) les points immobiles et les lignes rouges les points glissants.

La sélection des points de contrôle suffisants parmi ceux disponibles est réalisée par un algorithme glouton (*greedy algorithm*), détaillé dans l'Annexe B. La tolérance de sélection est fixée à 1.10^{-5} par rapport au déplacement maximal induit par la déformation. La fraction avant redémarrage pour le complément de Schur est de 10%.

5.4.2.2 Choix d'un maillage initial

Le *morphing* reste une méthode limitée à des déformations relativement peu importantes. Lorsqu'elles sont trop grandes, des repliements de cellules (*folding*) sont possibles. On dit alors que la forme est inaccessible par *morphing*. *A contrario* une forme est accessible lorsque le maillage n'est pas replié (sans considération de qualité). Le repliement se caractérise par des valeurs du déterminant de la Jacobienne de la cellule négatives (Knupp, 2003) conduisant à un volume de cellule négatif. Le choix d'un maillage initial détermine quelles portions de l'espace des paramètres \mathcal{D} sont accessibles. Idéalement, on souhaite que l'ensemble de l'espace le soit. Cette étape est réalisée en amont du processus de construction du métamodèle.

Dans cette étude, le maillage initial visible sur la Figure 5.9, repose sur un *rib* dont les paramètres sont $h_{rib}/H = 0.15$, $e/2H = 0.305$ et $E/2H = 0.435$. Parmi les maillages initiaux testés, il est celui permettant d'atteindre le maximum de formes du plan d'expériences initial, soit 227 sur un total de 441.

La Figure 5.10 représente les observations du plan d'expériences en projection sur deux plans de l'espace des paramètres. L'étoile noire correspond aux paramètres du maillage initial, les symboles blancs indiquent les observations accessibles par déformation, et les symboles rouges celles qui sont inaccessibles. La Figure 5.10(b) présente une projection sur le plan (e, E) . La ligne pointillée rouge identifie la contrainte définie Eqn. (5.6). On remarque que la majorité des observations inaccessibles sont caractérisées soit par une

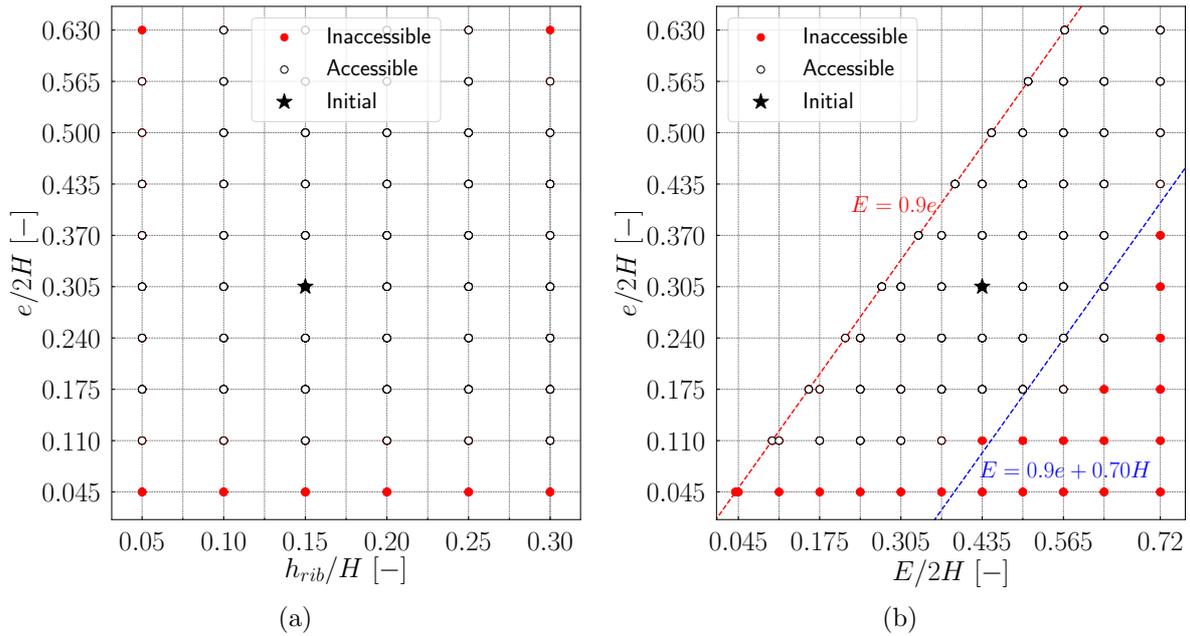


Figure 5.10 – Projection des observations du plan d'expériences sur deux plans de l'espace des paramètres.

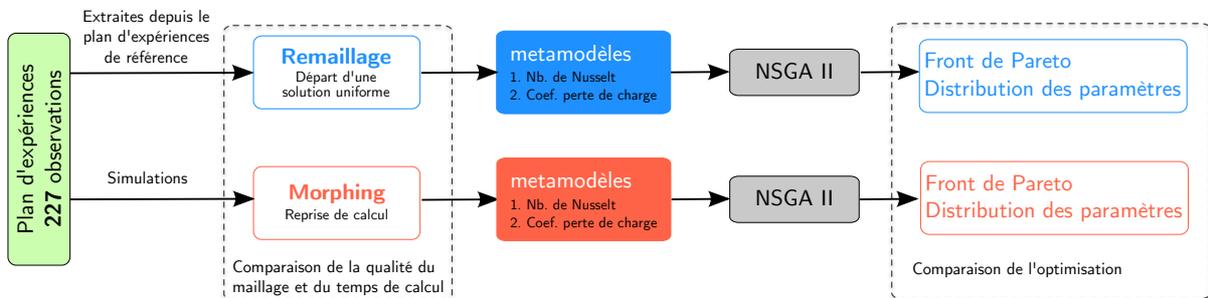


Figure 5.11 – Illustration de la comparaison réalisée entre la stratégie de remaillage et la stratégie de *morphing*.

largeur en tête de *rib* minimale ($e/2H = 0.045$), soit par un angle ψ important¹¹. Une limite, mise en évidence par la ligne pointillée bleue sur la Figure 5.10(b) et d'équation :

$$E = 0.9e + 0.70H \quad (5.17)$$

peut être empiriquement définie dans le second cas. Pour les formes au delà de cette limite, on observe, après déformation, un repliement des cellules situées sur le plan de symétrie du *rib* ($x/H = 0.9$). Ce comportement semble induit par la mise en données qui utilise de nombreux plans de glissement, notamment au niveau du *rib*. Il serait possible de vérifier cette hypothèse en réalisant une déformation pour laquelle le déplacement de tous les points de contrôle au niveau du *rib* serait prescrit. Cela nécessite cependant un effort de développement important car il faut s'assurer de la bonne répartition des nœuds à la paroi sur le maillage déformé.

11. Voir Figure 4.1(a)

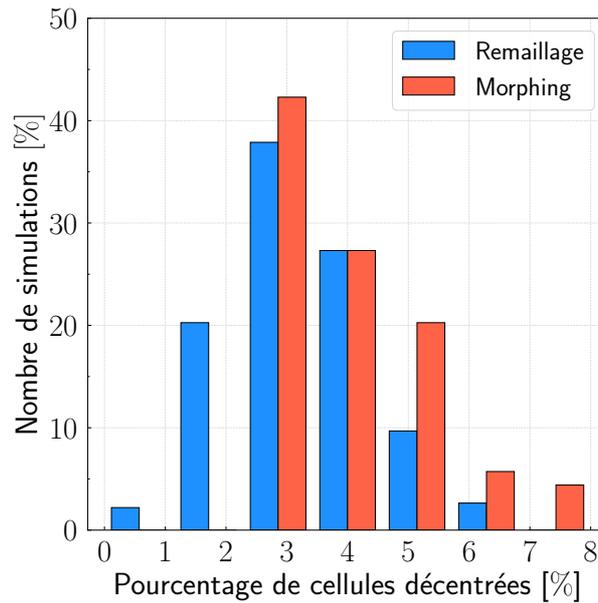


Figure 5.12 – Histogramme du pourcentage de cellules décentrées en fonction du nombre de simulations (en pourcent pour un total de 227). Les informations pour les maillages issus de remaillage sont représentées en bleu, et celles pour les maillages déformés en noir.

5.4.3 Comparaison des résultats

La mise en données décrite permet d’obtenir 227 formes pour lesquelles le maillage déformé ne souffre pas de repliement. Afin d’analyser la robustesse de la méthode d’optimisation développée dans les présents travaux, le problème défini par le système d’équations (5.1 - 5.6) est résolu en utilisant deux couples de métamodèles, comme l’illustre la Figure 5.11. Le premier est construit avec 227 observations extraites des 441 formant le plan d’expériences de référence¹². Le second est construit sur la base de 227 simulations utilisant du *morphing*.

5.4.3.1 Qualité de la déformation et des maillages

Dans un premier temps, il faut s’assurer de la qualité de la déformation et des maillages obtenus afin de valider les simulations.

Classiquement, la qualité du maillage est mesurée par des critères reposant sur le calcul de la Jacobienne de la cellule tel que présenté par Knupp (2003). Ils mesurent ainsi une différence entre la cellule réelle et une cellule idéale (hexaédrique par exemple). Les ”mauvaises” cellules sont identifiées sur la base d’informations géométriques comme des rapports d’aspect ou des distorsions trop importants. En CFD, ces critères sont difficiles à mettre en œuvre. Par exemple, un maillage présentant un raffinement en proche paroi¹³, aura pour ces cellules des valeurs de rapport d’aspect importantes bien qu’il respecte le savoir-faire métier.

Par ailleurs, pour chaque solveur, les méthodes numériques retenues¹⁴ dépendent fortement du maillage. Usuellement, ils disposent d’outils d’analyse des maillages en accord avec les méthodes numériques implémentées. C’est notamment le cas de *Code_Saturne*.

12. résolu avec le modèle $k - \omega$ SST et reposant sur une méthode de remaillage

13. imposé par le modèle de turbulence typiquement

14. schéma de convection, calcul de gradient

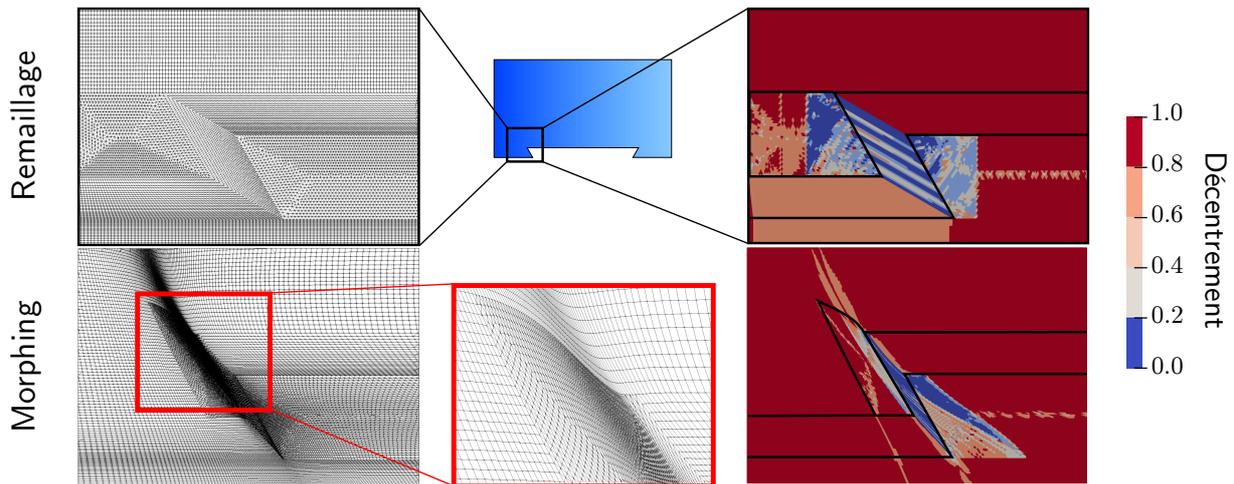


Figure 5.13 – Comparaison de l’impact du remaillage (en haut) et du *morphing* (en bas) sur le maillage (gauche) et la valeur du critère de décentrement (droite) pour une forme de dimensions $h_{rib}/H = 0.10$, $e/2H = 0.585$ et $E/2H = 0.5085$. L’encart rouge correspond à un zoom sur le maillage cisailé.

Lors des étapes de pré-traitement du calcul, une analyse de maillage est réalisée et des critères sont fournis à l’utilisateur, lui permettant ainsi d’être confiant dans les résultats du calcul, ou bien de mettre en évidence un problème de maillage.

Dans les présents travaux, la qualité des maillages a donc été mesurée en utilisant les critères à disposition dans *Code_Saturne* et qui sont détaillés dans la documentation théorique (EDF R&D, 2018b, pp 421-422). Les différentes simulations réalisées ont permis de mettre en évidence une forte dépendance au critère de décentrement des cellules (*cell center offset*). Lorsque la valeur de celui-ci, comprise entre 0 et 1, est maximale, une bonne stabilité de la résolution et un calcul précis des gradients sont assurés. Une cellule est considérée comme mauvaise si la valeur de ce critère est inférieure à 0.1.

Pour chacune des 227 simulations réalisées avec un maillage déformé, le pourcentage de mauvaises cellules a été extrait. Comme le montre la Figure 5.12, il a été comparé à celui issu des simulations avec un maillage obtenu par remaillage. Le *morphing* va légèrement dégrader la qualité des maillages en augmentant le taux de cellules présentant un décentrement. En effet, parmi les maillages déformés, aucun ne possède moins de 2% de cellules décentrées, et certains affichent des valeurs jusqu’à 8%. Néanmoins cette dégradation est à nuancer car près de 70% des maillages étudiés possèdent entre 3% et 4% de mauvaises cellules. De plus, les taux importants ne sont pas encore préjudiciables pour le bon déroulement de la simulation.

L’analyse générale de la qualité est cohérente avec la méthode employée. Une analyse plus ciblée a permis d’identifier les maillages de moins bonne qualité. Il s’agit en majeure partie de ceux dont les dimensions du *rib* sont telles que $E = 0.9e$. C’est le cas, par exemple, pour la forme dont les dimensions sont : $h_{rib}/H = 0.10$, $e/2H = 0.585$ et $E/2H = 0.5085$. La Figure 5.13 montre le maillage et la répartition du critère de décentrement pour une zone à gauche du *rib*. Ce maillage met en évidence un fort cisaillement des cellules dans le cas du *morphing*, entraînant une dégradation du critère de décentrement à cet endroit. Il est représentatif d’un cas à la limite des déformations admissibles par la méthode de *morphing* utilisée.

La déformation de maillage par RBF génère, à partir des informations définies aux

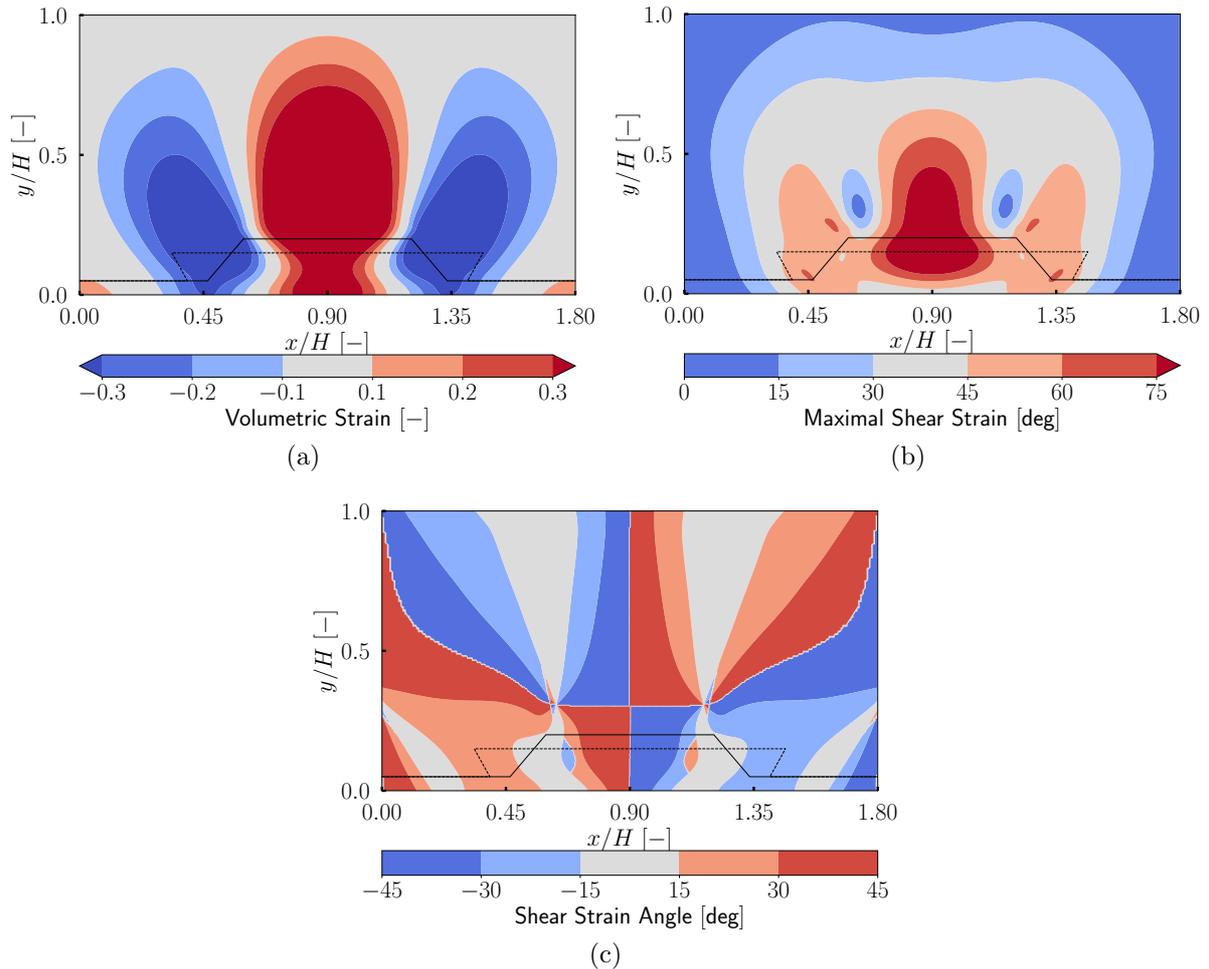


Figure 5.14 – Critères de qualité de la déformation. Les variations de la forme sont $\Delta h_{rib}/H = -0.05$, $\Delta e/2H = 0.58$ et $\Delta E/2H = 0.0735$. - (a) Variation du volume des cellules - (b) Variation de l'orthogonalité des cellules - (c) Indication sur l'orientation des cellules.

points de contrôle, un champ de déplacement continu dans l'espace, dérivable, et ayant l'avantage d'être indépendant du maillage initial utilisé. Dans l'optique de préserver cet avantage, Aubert et al. (2017) ont proposé des métriques permettant d'évaluer la contraction/dilatation, grâce au *volumetric strain*, ainsi que le cisaillement probable de certaines parties de l'espace déformé par la combinaison du *maximal shear strain* et du *shear strain angle*. L'analyse de ces critères permet de prévoir le comportement d'un maillage une fois celui-ci déformé par le champ de déplacement :

- si la valeur du *volumetric strain* est positive, alors la cellule se dilate, si elle est négative la cellule se contracte, sinon le volume de la cellule ne change pas.
- si une cellule est orientée (par rapport à un référentiel cartésien) avec un angle égal au *shear strain angle*, alors elle subit un cisaillement égal au *maximal shear strain*. Si une cellule forme un angle de ± 45 deg avec la direction indiquée par le *shear strain angle*, elle n'est pas cisailée. Si l'orientation d'une cellule forme un angle compris entre 0 deg et ± 45 deg avec la direction indiquée par le *shear strain angle* alors elle subit un cisaillement proportionnel.

Le cisaillement des cellules observé sur la Figure 5.13, peut être déduit des critères de

qualité représentés sur la Figure 5.14. Le contour du *rib* initial est indiqué par la ligne noire continue, et le contour après déformation apparaît en trait pointillé. Les critères forment des champs qui sont représentés sur la base du maillage initial. La Figure 5.14(a) met en évidence la dilatation des cellules centrales et la contraction des cellules latérales nécessaires à la déformation. Les Figures 5.14(b) et 5.14(c) doivent être analysées de concert. Le cisaillement maximal au centre du domaine serait effectif si les cellules du maillage étaient orientées à ± 45 deg par rapport au référentiel (\vec{e}_x, \vec{e}_y) . Or dans le cas du maillage initial, ces cellules sont parfaitement alignées avec le référentiel et ne sont donc pas sujettes au cisaillement. *A contrario*, les cellules situées autour de $x/H = 0.45$ et de $y/H = 0.25$ sont des prismes orientés avec un angle proche de la valeur de *shear strain angle* et vont donc être soumises à du cisaillement.

5.4.3.2 Temps de calcul

L'utilisation de la déformation de maillage présente également l'avantage de réduire le temps de calcul. Lorsque de nouveaux maillages sont générés pour chacune des formes, le nombre de cellules et la connectivité changent. Certains solveurs de mécanique des fluides numérique permettent néanmoins de réaliser des reprises de calcul en réalisant une interpolation des données. Cela peut poser certains problèmes, notamment dans des simulations couplées fluide/solide, car l'interpolation peut assigner une composante de vitesse dans le solide, susceptible d'engendrer des erreurs de résolution. Le solveur *Code_Saturne*, utilisé dans les présents travaux, ne propose pas une telle fonctionnalité. Ainsi l'utilisation du remaillage impose systématiquement de débiter la simulation depuis une solution uniforme. Il faut alors laisser le temps aux structures de l'écoulement de se développer, et aux transferts thermiques de s'équilibrer.

Grâce au *morphing*, la connectivité ne change pas, et il est alors possible de faire des reprises de calcul depuis une simulation déjà convergée. Dans ce cas également, un temps de développement de l'écoulement est nécessaire, à cause du changement de forme, mais il est relativement réduit, par rapport à une initialisation uniforme. Cela présente un avantage certain dans le cadre de l'optimisation au vu de la quantité de simulations réalisées.

Pour les simulations de cette étude, la reprise de calcul a permis de réduire le temps de simulation pour une forme d'environ 40% en moyenne. Au final, le temps nécessaire à la simulation des 227 formes du plan d'expériences est divisé par deux en utilisant le *morphing* plutôt que le remaillage.

5.4.3.3 Métamodélisation et optimisation

Comparaison du plan d'expériences et construction des métamodèles

L'écart au niveau des résultats de la simulation pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge entre les deux stratégies de la Figure 5.11 est un premier indicateur de l'influence de la méthode de déformation. Calculé en chacune des 227 observations, l'écart moyen pour Nu/Nu_0 est égal à 1.75% avec un écart maximum de 6.44%. Pour le coefficient de perte de charge, l'écart moyen est de 1.03% et l'écart maximum est de 5.02%. Bien que relativement faibles en moyenne, ces écarts peuvent induire une variation de la prédiction par la moyenne de krigeage et influencer les résultats de l'optimisation.

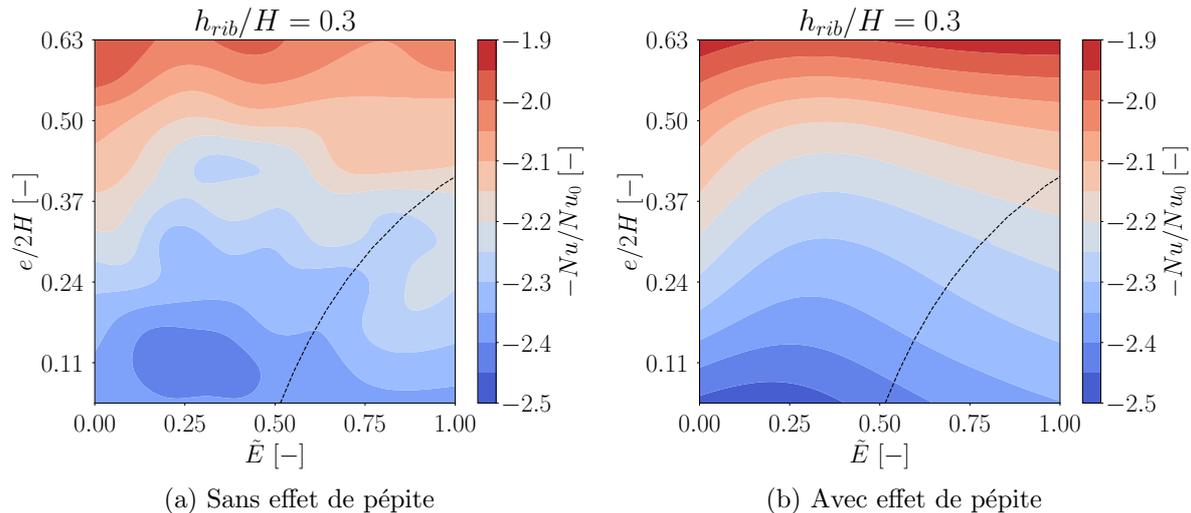


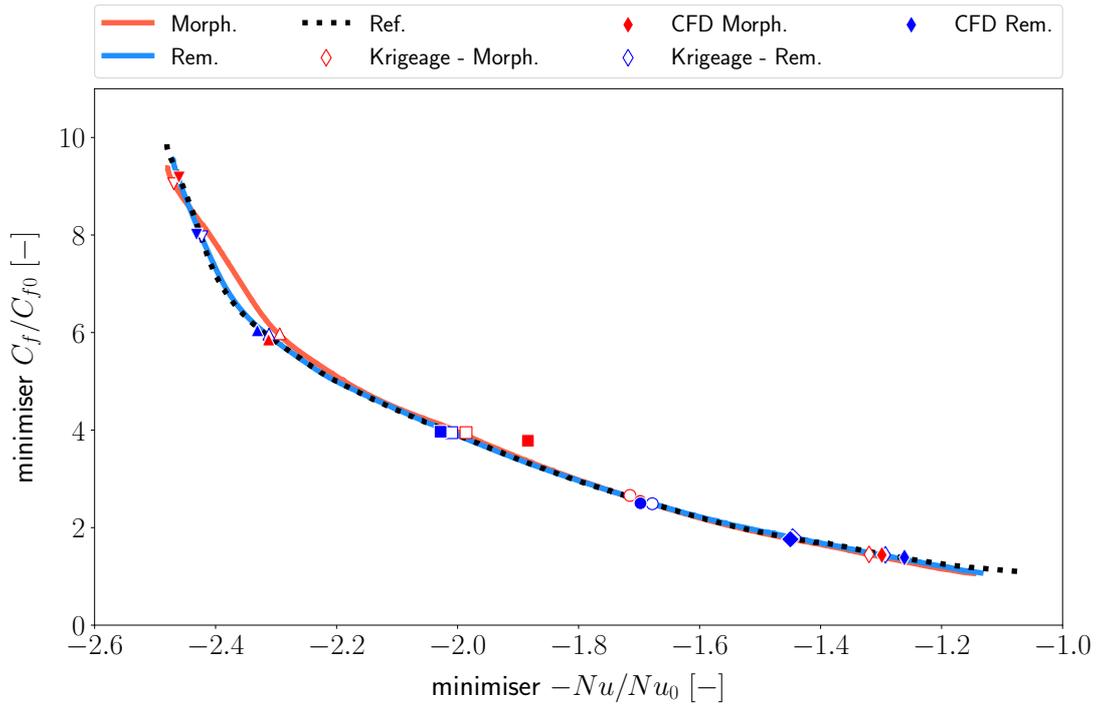
Figure 5.15 – Courbes de niveaux de la prédiction par la moyenne de krigeage de $-Nu/Nu_0$, dans le plan $(e/2H, \tilde{E})$ pour $h_{rib}/H = 0.3$, basé sur les simulations issues de *morphing*. La ligne pointillée indique la limite supérieure empirique définie Eqn. (5.17).

Les métamodèles de krigeage des deux stratégies sont construits avec les options de réglages résumées par le Tableau 5.2 et en utilisant le changement de variable introduit Section 5.1.2. Sur les métamodèles issus de la stratégie de remaillage, la valeur de la variance τ^2 introduite par l’effet de pépite, est de l’ordre de 0.001% de l’amplitude de variation des réponses. Cela est faible et démontre qu’il y a peu de perturbations. Dans le cas des métamodèles de la stratégie de *morphing*, bien que la valeur de τ^2 soit supérieure d’un ordre de grandeur, elle reste également faible. La Figure 5.15(a) met en évidence les perturbations pour $-Nu/Nu_0$ sans l’ajout de cet effet. On remarque que les courbes de niveaux sont plus chahutées que celles issues du métamodèles considérant un effet de pépite sur la Figure 5.15(b). Ce comportement est symptomatique de paramètres de portée trop faibles. Une analyse ciblée a montré que, dans ce cas précis, l’ajout de l’effet de pépite tend à augmenter leur valeur, conduisant à une surface de réponse plus ”lisse”. L’ajout d’un effet de pépite modifie l’expression de la log-vraisemblance (comme le montre la Section 3.3.3.3), et sa maximisation conduit à des valeurs de paramètres de portée différents du cas sans cet effet.

De fait, contrairement à ce qui été supposé Section 5.4.1, l’utilisation d’une méthode de déformation engendre des perturbations au niveau de la réponse du simulateur, vraisemblablement dues à la légère dégradation de la qualité du maillage. La qualité de la prédiction est évaluée en utilisant une *cross-validation* à 10 sous-ensembles. Pour les deux stratégies, les résultats du coefficient de corrélation quadratique de prédiction Q^2 est égale 0.999 pour Nu/Nu_0 et C_f/C_{f0} et les erreurs de prédictions¹⁵ sont en deçà de 0.2%. Comme précédemment, cette haute qualité est une conséquence du sur-échantillonnage.

De précédents travaux (Mastriippolito et al., 2018a) ont mis en évidence la nécessité de réaliser l’optimisation sous la contrainte définie par l’Eqn. (5.17). En effet, l’absence d’observations au delà de cette limite entraîne une extrapolation de la prédiction de la moyenne de krigeage créant un minimum local artificiel vers lequel l’algorithme génétique se dirige. Le problème d’optimisation devient alors, en considérant également le change-

15. $RMSE_{CV}$ et MAE_{CV}



(a) Front de Pareto

Figure 5.16 – Représentation des résultats de l’optimisation avec les deux stratégies de maillage. Les individus des fronts de Pareto sont représentés (en rouge pour le *morphing* et en bleu pour le remaillage) et sont comparés à ceux de l’optimisation de référence (en pointillés noirs). Les performances des centre de groupe prédites par la moyenne de krigage sont indiquées par les symboles vides et celles issues des simulations de qualification en symboles pleins.

ment de variable :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & -Nu(\mathbf{p})/Nu_0 & (5.18) \\ \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & C_f(\mathbf{p})/C_{f0} & (5.19) \\ \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (5.20) \\ & e/2H \in [0.045; 0.63] & (5.21) \\ & \tilde{E} \in [0; 1] & (5.22) \\ & E \geq 0.9e + 0.70H & (5.23) \end{array} \right.$$

avec $\mathbf{p} = (h_{rib}, e, \tilde{E})$.

Résultats de l’optimisation

Les résultats de l’optimisation sont représentés dans l’espace des objectifs sur la Figure 5.16. Les fronts de Pareto obtenus par la méthode de remaillage à 227 observations et la référence à 441 observations sont quasiment confondus. Ainsi, l’ajout de la contrainte d’accessibilité des déformations définie Eqn. (5.23) et les observations manquantes n’influencent que très peu les résultats de l’optimisation dans ce cas précis. Le front de Pareto issu de la stratégie de morphing est similaire sur une large portion mais présente quelques différences pour des nombres de Nusselt élevés.

La Figure 5.17 illustre la distribution des individus de l’ensemble de Pareto pour

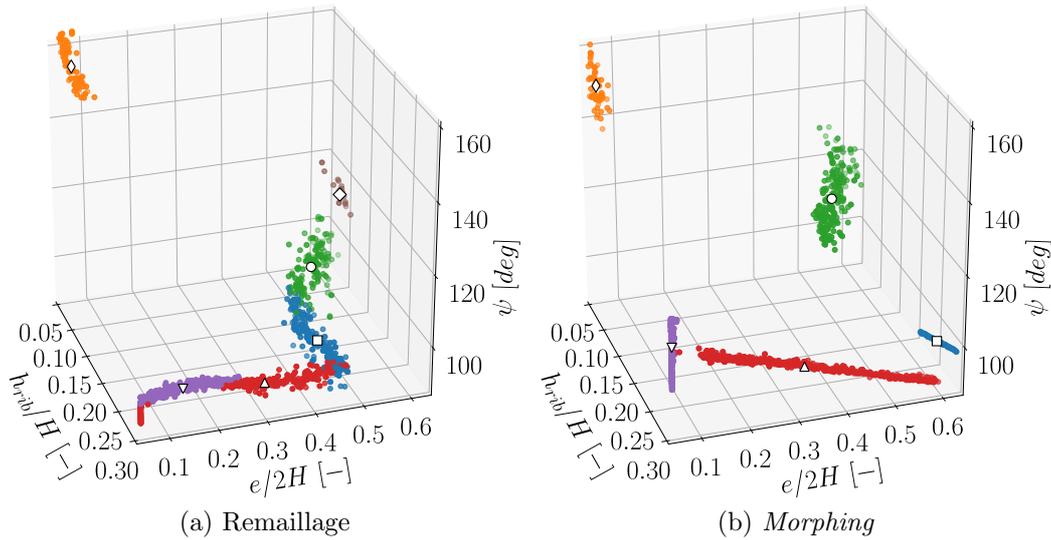


Figure 5.17 – Comparaison des résultats des optimisations avec une stratégie de remaillage (a) et de *morphing* (b) dans l'espace des paramètres. Les individus des ensembles de Pareto sont représentés, colorés selon leur groupe. Les centres de chaque groupe sont indiqués par des symboles vides.

chacune des stratégies. Le *clustering* met en évidence 6 (remaillage) et 5 (*morphing*) groupes et leurs centres respectifs, identifiés par des symboles vides. Les performances de ces centres, prédites par la moyenne de krigeage sont reportées sur le front de Pareto (Figure 5.16) et sont représentées par des symboles vides. Des simulations de qualification des métamodèles ont été réalisées et sont indiquées par des symboles pleins. Dans le cas de la stratégie de *morphing*, 3 formes sur les 5 ne sont pas accessibles par la méthode de déformation. Les simulations ont donc été réalisées en utilisant la méthode de remaillage. Pour les centres issus de la stratégie de remaillage, les écarts de performances entre la prédiction du métamodèle et les résultats de la simulation sont inférieurs à 1.5%¹⁶. La prédiction est donc pertinente. Pour les centres obtenus depuis les résultats de la stratégie de *morphing*, les écarts sont également inférieurs à 1.5%, hormis pour la forme \square qui atteint 5.4% et 4.41% d'écart pour $-Nu/Nu_0$ et C_f/C_{f0} .

L'analyse de l'espace des paramètres sur la Figure 5.17(a) montre également le peu d'influence de la contrainte Eqn. (5.23) sur les résultats de l'optimisation du remaillage, la distribution des individus étant topologiquement semblable à celle de la Figure 5.3(b) à la page 129. La distribution des individus entre les stratégies de remaillage et de *morphing* sont *a contrario* très différentes, bien que les fronts de Pareto soient similaires. Cette différence est d'autant plus marquée lorsque h_{rib}/H est proche de 0.3 (centres Δ et ∇).

Afin d'expliciter cette différence, la Figure 5.18 montre les courbes de niveaux des surfaces de réponse des deux objectifs pour $h_{rib}/H = 0.3$ et pour chaque stratégie. L'espace de représentation utilise le changement de variable. Les courbes des coefficients de perte de charge sont similaires (Figures 5.18(b) et 5.18(d)), contrairement à ceux des nombres de Nusselt (Figures 5.18(a) et 5.18(c)).

Dans le cas du remaillage, la variation est continue depuis une zone caractérisée par des formes étroites et rectangulaires (∇) vers des formes plus larges et trapézoïdales (Δ). Les individus de l'ensemble de Pareto (en noir) se distribuent linéairement en fonction

16. Hormis pour la forme \diamond .

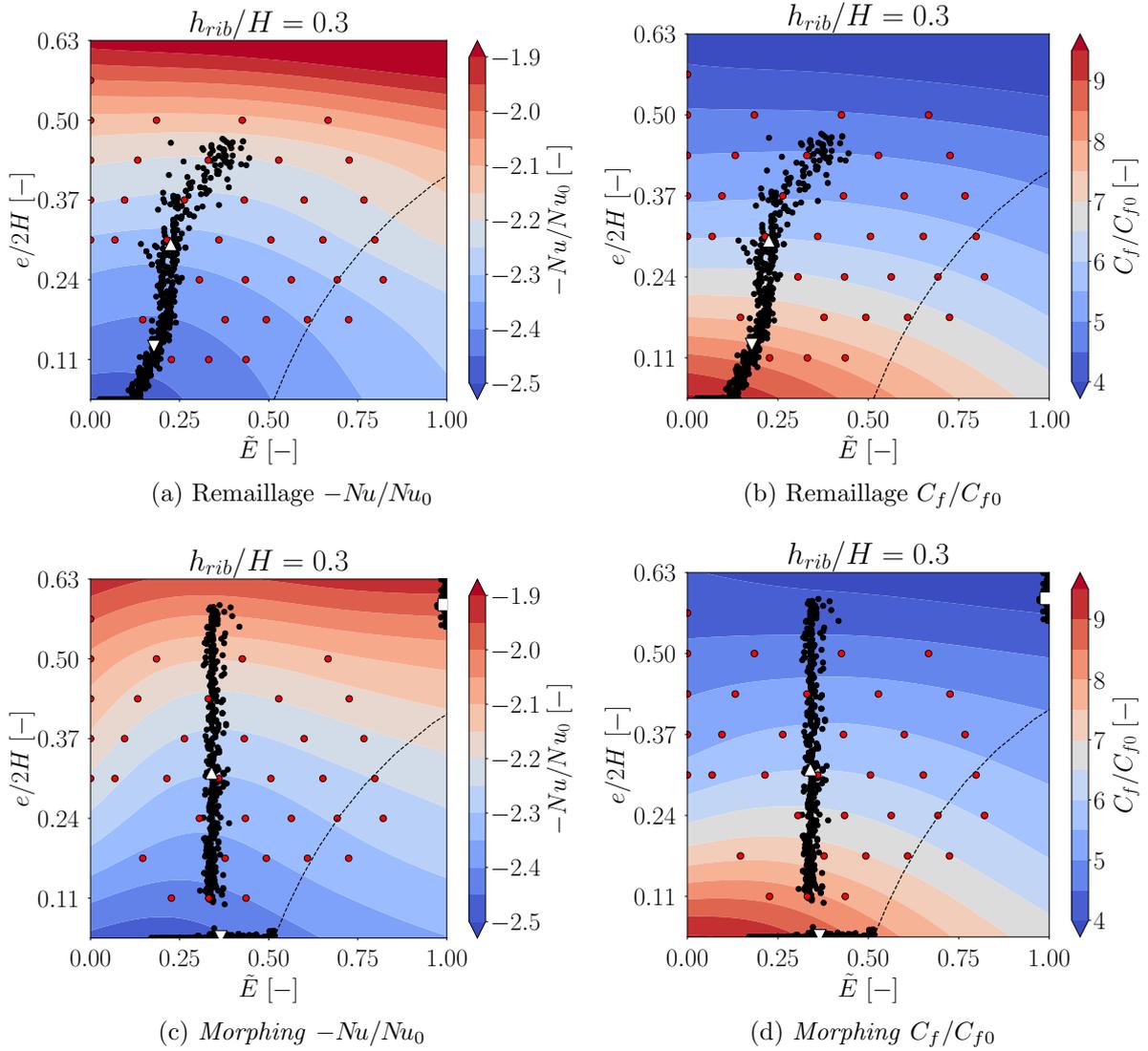


Figure 5.18 – Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $h_{rib}/H = 0.3$ pour le nombre de Nusselt (à gauche) et le coefficient de perte de charge (à droite) et pour les stratégies de remaillage (en haut) et de *morphing* (en bas). Les points rouges identifient la position des observations du plan d’expériences, les points noirs celle des individus de l’ensemble de Pareto et les symboles vides celle des centres de groupes. La ligne noire en pointillés représente la contrainte définie Eqn. (5.23).

des deux paramètres. Dans le cas du *morphing*, trois groupes distincts sont visibles. Le plus proche de la stratégie de remaillage est indiqué par le symbole Δ . Les individus de ce groupe suivent une ”crête” sur les courbes de niveaux du nombre de Nusselt dont l’origine est proche du groupe ∇ . Les individus de ce groupe butent contre la contrainte définie Eqn. (5.23). Le centre \square se situe dans une zone non observée de \mathcal{D} , expliquant l’écart prédiction/simulation important.

Les individus de ces deux groupes (∇ et \square) se concentrent dans des zones de l’espace de paramètres jugées incertaines et dont l’apparition est vraisemblablement due à un mauvais paramétrage des métamodèles de krigeage. En effet dans de précédents travaux (Mastripiolito et al., 2018a), une optimisation sur la même configuration a été réalisée sans le changement de variable $E/2H$ vers \tilde{E} . Les résultats ont mis en évidence

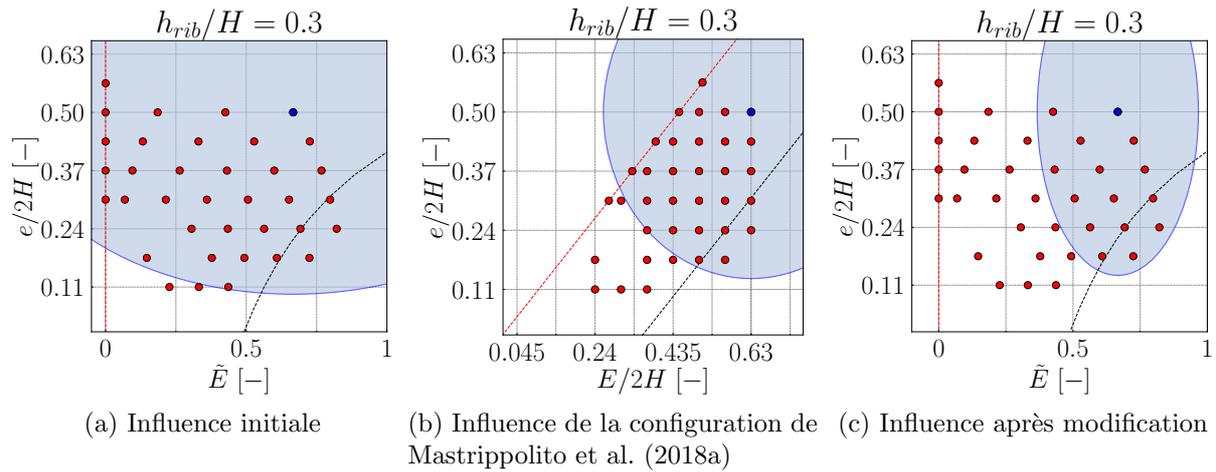


Figure 5.19 – Représentation de l’influence des paramètres de portée du métamodèle de krigeage. La zone bleue pastel représente le rayon d’action de l’observation repérée par le point bleu. Les observations repérées par des points rouges dans cette zone auront donc une fonction de corrélation non nulle avec la bleue. Trois configurations sont représentées : (a) la configuration initiale, (b) la configuration de Mastrippolito et al. (2018a) sans changement de variable et (c) la configuration actuelle après modification des paramètres de portée. La ligne rouge indique la contrainte $E = 0.9e$ et la ligne noire la contrainte définie Eqn. (5.23).

une forte similarité des fronts de Pareto et de la distribution des individus dans l’espace des paramètres. L’influence majeure du changement de variable est de ”courber” et de ”déformer” l’espace initial, entraînant de ce fait un changement sur l’estimation des paramètres de portée. Lorsqu’il y a suffisamment d’observations, comme c’était le cas dans la vérification de la Section 5.1.2, les changements sont négligeables. Cependant, dans le présent cas, étant donné que de grandes parties de l’espace ne sont pas observées, l’impact est plus important. Il va se traduire par une augmentation de la valeur du paramètre de portée $\theta_{\tilde{E}}$ du paramètre \tilde{E} , qui va alors atteindre la borne supérieure de variation utilisée pour la maximisation de la log-vraisemblance, et qui est fixée par défaut à :

$$\max(\theta_{\tilde{E}}) = 2 \left(\max(\tilde{E}) - \min(\tilde{E}) \right) = 2 \quad (5.24)$$

Comme l’illustre la Figure 5.19, le paramètre de portée agit comme un rayon d’action. La prédiction de la moyenne de krigeage dans la portion de l’espace des paramètres colorée en bleu pastel est influencée par l’observation bleue. De plus les observations rouges comprises dans cette zone ont une fonction de corrélation non nulle vis à vis de cette observation bleue. Ainsi, comme le montre la Figure 5.19(a) dans le cas présent, toutes les observations du plan d’expériences pour $h_{rib}/H = 0.3$ sont corrélées entre elles. Or, l’analyse de la configuration de Mastrippolito et al. (2018a) sans changement de variable, visible sur la Figure 5.19(b), met en évidence un paramètre de portée moins important impliquant que les formes caractérisées par une faible largeur d’aillette (en bas à gauche) ne sont pas corrélées avec les formes plus larges (en haut à droite). En modifiant les intervalles de variation des paramètres de portée contraignant la maximisation de la log-vraisemblance (voir Section 3.3.3.2), leur valeur peut être réduite comme le montre la figure Figure 5.19(c), afin de se rapprocher du comportement de la configuration sans

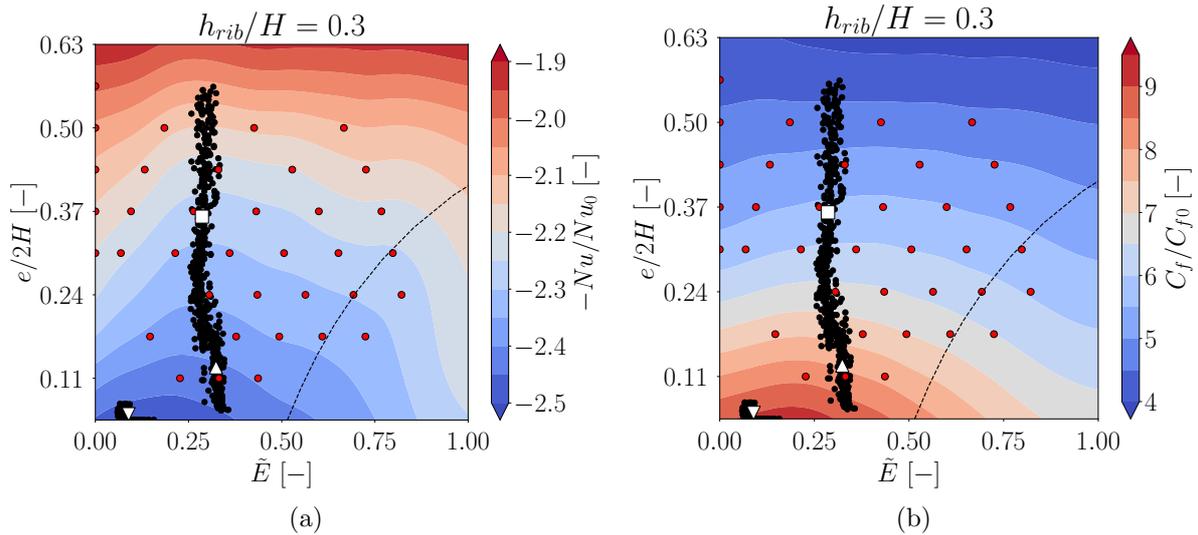


Figure 5.20 – Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $h_{rib}/H = 0.3$ pour le nombre de Nusselt (à gauche) et le coefficient de perte de charge (à droite) après modification des paramètres de portée pour la stratégie de *morphing*. Les points rouges identifient la position des observations du plan d’expériences, les points noirs celle des individus de l’ensemble de Pareto et les symboles vides celle des centres de groupes. La ligne noire en pointillés représente la contrainte définie Eqn. (5.23).

changement de variables visible sur la Figure 5.19(b).

Après la modification des métamodèles issus du *morphing*, sur la base de ces nouveaux paramètres de portée, une optimisation est réalisée. La Figure 5.20 montre les courbes de niveaux des surfaces de réponse des deux objectifs pour $h_{rib}/H = 0.3$. La diminution de la portée a principalement influencé la prédiction du nombre de Nusselt. Le groupe auparavant situé en haut à droite de l’espace dans la zone non observée a disparu tout comme le groupe accolé à la contrainte (ligne noire pointillée). La distribution des individus se rapproche de celle de la stratégie de remaillage. La réduction du paramètre de portée induit un comportement légèrement plus isotrope des courbes de niveaux du nombre de Nusselt à partir du maximum¹⁷, identifié par le groupe ∇ , avec la ”crête” toujours présente mais moins marquée¹⁸.

5.4.4 Conclusions et perspectives

Cette analyse compare les résultats de deux optimisations reposant sur deux stratégies de propagation du changement de forme au niveau du maillage.

Les résultats indiquent que la déformation de maillage est un outils pertinent pour la construction de plan d’expériences induisant une réduction des temps de calcul. Il faut toutefois veiller à bien choisir la forme initiale car celle-ci contraint les zones de l’espace des paramètres accessibles. Dans cette étude, la zone non accessible n’était pas celle contenant les minima et n’a donc aucune incidence sur les résultats, mais cela n’est pas nécessairement toujours le cas.

17. augmentation similaire en fonction des deux paramètres

18. La même modification des paramètres de portée réalisée sur les métamodèles issus de la stratégie de remaillage a permis d’atteindre des résultats encore plus proches de la référence.

La stratégie de *morphing* mise en œuvre conduit à des maillages de qualité similaire à ceux obtenus par remaillage. La conservation de la connectivité permet de réaliser des reprises de calcul afin de réduire le temps de simulation. Cependant contrairement à ce qui était supposé, l'utilisation du *morphing* à la place du remaillage ne conduit pas nécessairement à une surface de réponse moins bruitée, dans le cas de grandes déformations.

L'analyse a permis également mettre en évidence l'influence des zones non observées et du changement de variable. Lorsque le plan d'expériences est incomplet, l'estimation des paramètres de portée est grandement influencée, ce qui peut conduire à l'apparition de minima biaisés. Une étude de sensibilité de la solution de l'optimisation à ce paramètre doit donc être envisagée.

Finalement, les résultats des deux optimisations sont cohérents et permettent de conclure sur la possibilité d'utiliser une méthode de *morphing* dans un processus d'optimisation.

Certains points restent toutefois à investiguer. Afin de réduire l'étendue des zones de l'espace des paramètres non accessibles, il pourrait être envisageable d'utiliser plusieurs maillages initiaux ayant des zones accessibles se recouvrant. L'influence du *morphing* sur l'évolution des performances suite à de petites déformation n'a pas pu être investigué. Une campagne d'essais, reposant sur des simulations LES comme référence, serait envisageable pour tester cette hypothèse.

5.5 Utilisation d'un autre solveur CFD

Le choix du solveur CFD peut, *a priori*, impacter les résultats de l'optimisation. En effet, à configurations égales (modèle de turbulence, schéma de convection,...) les implémentations propres à chaque code peuvent conduire à des résultats sensiblement différents.

Dans cette section, le problème d'optimisation de la forme du *rib* est traité et l'évaluation des 441 observations du plan d'expériences est faite grâce au solveur commercial ANSYS® Fluent. Il s'agit d'un solveur de mécanique des fluides généraliste, permettant de traiter une large gamme d'écoulements (monophasiques ou diphasiques, incompressibles ou non, laminaires ou turbulents) mais également des problèmes de transfert thermique et/ou faisant intervenir des réactions chimiques. Comme *Code_Saturne*, il repose sur une formulation volumes finis pour la discrétisation spatiale.

La comparaison porte sur la prédiction des observations par les simulateurs, l'approximation des métamodèles et les résultats de l'optimisation.

5.5.1 Mise en données

La mise en données utilisée avec le simulateur ANSYS® Fluent est similaire à celle décrite dans la Section 4.2 excepté pour le maillage et pour les paramètres numériques. Contrairement à *Code_Saturne*, une option existe permettant de réaliser un calcul réellement en deux dimensions¹⁹. Le maillage a donc dû être revu légèrement, principalement au niveau des zones prismatiques. Le couplage pression/vitesse repose sur un algorithme *Coupled* (ANSYS, 2017). Les termes convectifs sont traités par un schéma spatial décentré amont (*upwind*) de second ordre.

19. La cellule n'est plus un volume mais une surface

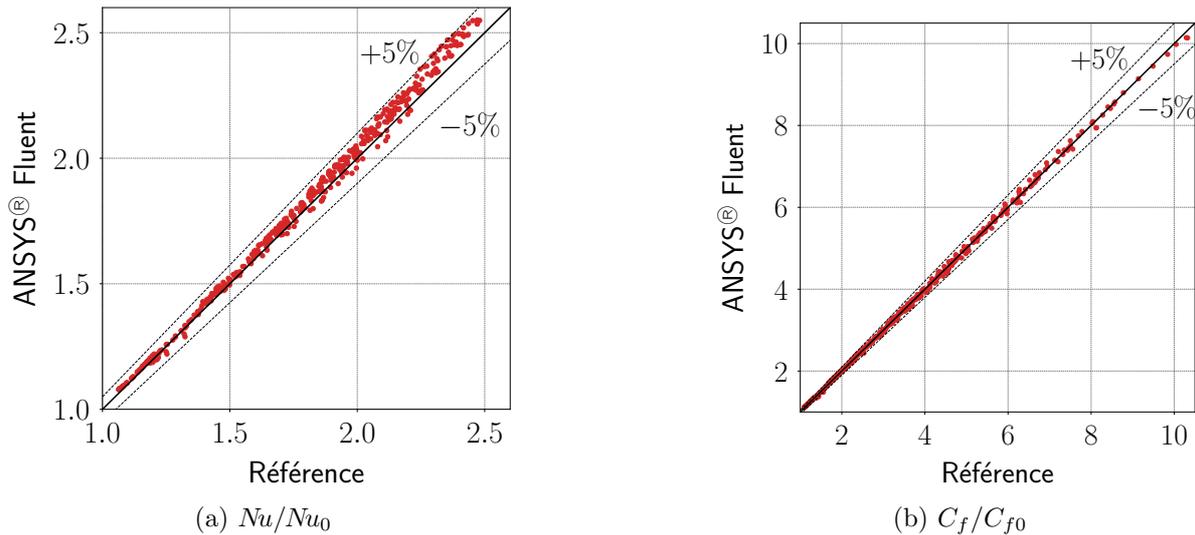


Figure 5.21 – Comparaison des 441 observations évaluées grâce à ANSYS® Fluent en fonction des évaluations de référence pour Nu/Nu_0 (a) et C_f/C_{f0} (b). Les variations à $\pm 5\%$ sont indiquées par les lignes pointillées.

Le modèle de turbulence utilisé est le $k - \omega$ SST et le nombre de Prandtl turbulent est fixé à 1.

5.5.2 Comparaison des plans d'expériences et des métamodèles

Les 441 observations du plan d'expériences sont évaluées à l'aide du solveur Fluent. La Figure 5.21 compare ces évaluations à celles de la référence. L'écart entre toutes les observations est compris entre $\pm 5\%$. Les écarts moyens pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge sont respectivement de 1.67% et 0.94%. Les deux solveurs fournissent donc une évaluation similaire pour C_f/C_{f0} mais les résultats d'ANSYS® Fluent surestiment légèrement Nu/Nu_0 par rapport à ceux de *Code_Saturne*, plus particulièrement quand celui-ci est élevé.

Les métamodèles pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge sont construits à partir des observations Fluent en utilisant les mêmes options que la référence et qui sont résumées dans le Tableau 5.2. L'estimation des paramètres de portée, des coefficients de la tendance, de la variance du processus et de la variance de l'effet de pépite donne des valeurs proches de celle de la référence (moins de 3% d'écart). La *cross validation* à 10 sous-ensembles a permis de valider la qualité de la prédiction des métamodèles avec des valeurs égales à l'unité pour Q^2 et inférieures à 0.1% pour la $RMSE_{CV}$ et la MAE_{CV} relatives.

Ces résultats permettent d'envisager que le changement de solveur ait peu d'influence sur l'évaluation des observations et sur la construction des métamodèles.

5.5.3 Analyse des résultats de l'optimisation

Les résultats de l'optimisation du problème défini par les Eqns. (5.10) à (5.14) sont représentés sur la Figure 5.22. Les deux fronts de Pareto, visibles sur la Figure 5.22(a), sont relativement semblables. On y remarque la légère surestimation du nombre de Nusselt donnée par ANSYS® Fluent. Toutefois, comme le montre la Figure 5.22(b), la distribu-

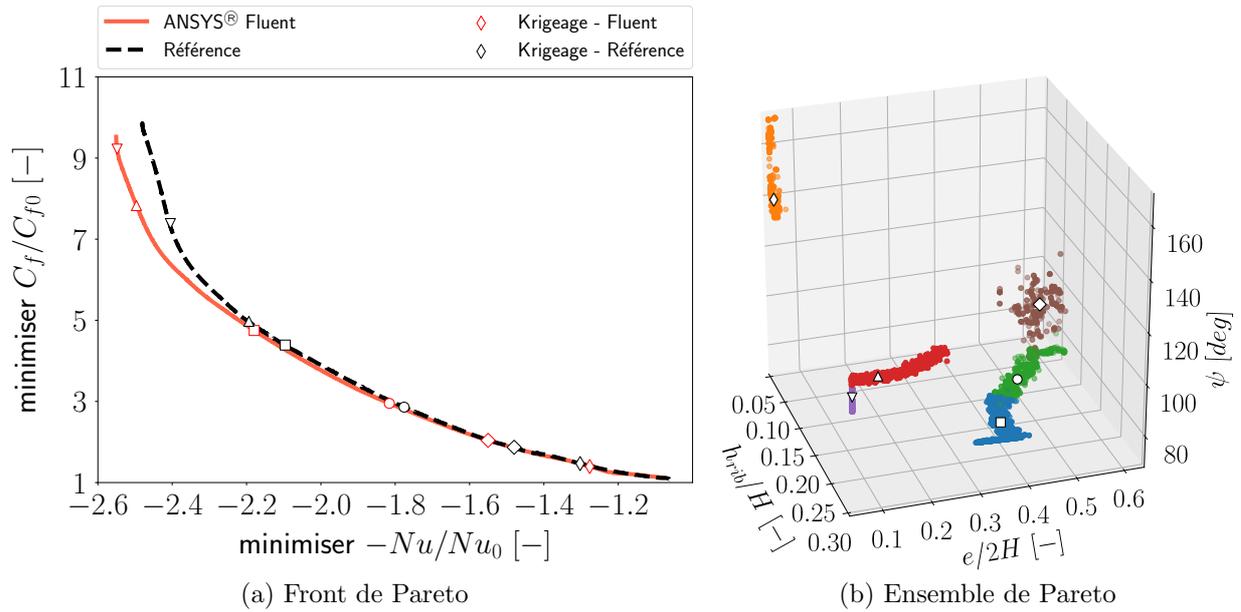


Figure 5.22 – Résultats de l'optimisation de ANSYS[®]Fluent - (a) le front de Pareto avec les six centres de groupes mis en évidence. Les symboles vides marquent la prédiction de la moyenne de krigeage. - (b) Distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans l'espace des paramètres avec une coloration par groupe. Les centres de groupes sont mis en évidence par les symboles vides.

tion des individus de l'ensemble de Pareto dans l'espace des paramètres est très différente de celle de la référence (voir la Figure 5.3(b)), hormis pour le groupe orange²⁰. Ce changement de topologie concerne d'abord les groupes pour lesquels $h_{rib}/H = 0.3$ (∇ , Δ), qui sont moins étendus que pour la référence et avec des angles ψ plus importants. Ensuite, bien qu'ayant une variation de h_{rib}/H et de $e/2H$ semblable à la référence, les formes des groupes bleu et vert sont maintenant caractérisées par des angles minimaux (équivalents à $\tilde{E} = 0$), alors qu'ils étaient aux alentours de 120 deg dans l'optimisation de référence.

Afin de comprendre cette différence de résultats, surprenante à la vue du bon accord des évaluations des observations, les courbes de niveaux des deux objectifs lorsque $h_{rib}/H = 0.3$ sont représentées sur la Figure 5.23 pour les deux couples de métamodèles. Les courbes de C_f/C_{f0} montrent que les valeurs sont similaires entre les deux solveurs. Cela confirme le faible écart entre les évaluations des observations. Concernant l'opposé du nombre de Nusselt, les courbes sont plus dissemblables. Dans le cas de la référence, la zone de minima est localisée autour de $e/2H = 0.045$ et $\tilde{E} \leq 0.3$ et une ligne de "crête" rectiligne y démarrant est visible. Au contraire, dans l'autre cas, la zone de minima est plus étendue et la "crête" suivie par les individus optimaux est caractérisée par des valeurs plus importantes de \tilde{E} . Ainsi pour des ribs ayant une hauteur maximale et une largeur en tête minimale, ANSYS[®] Fluent a tendance à estimer que le nombre de Nusselt est peu dépendant de l'angle ψ ce qui se traduit par l'apparition d'un plateau en fonction de \tilde{E} .

Les populations des groupes bleu et vert des deux cas (référence et ANSYS[®] Fluent) sont confondues si elles sont projetées sur le plan $(h_{rib}/H, e/2H)$. Ainsi la différence essentielle entre les deux populations est principalement due à l'angle ψ du rib. Pour

20. Les formes de ce groupe sont marginalement différentes d'une plaque plane. Elles apportent peu de chose sur le plan thermique tout en augmentant coefficient de perte de charge.

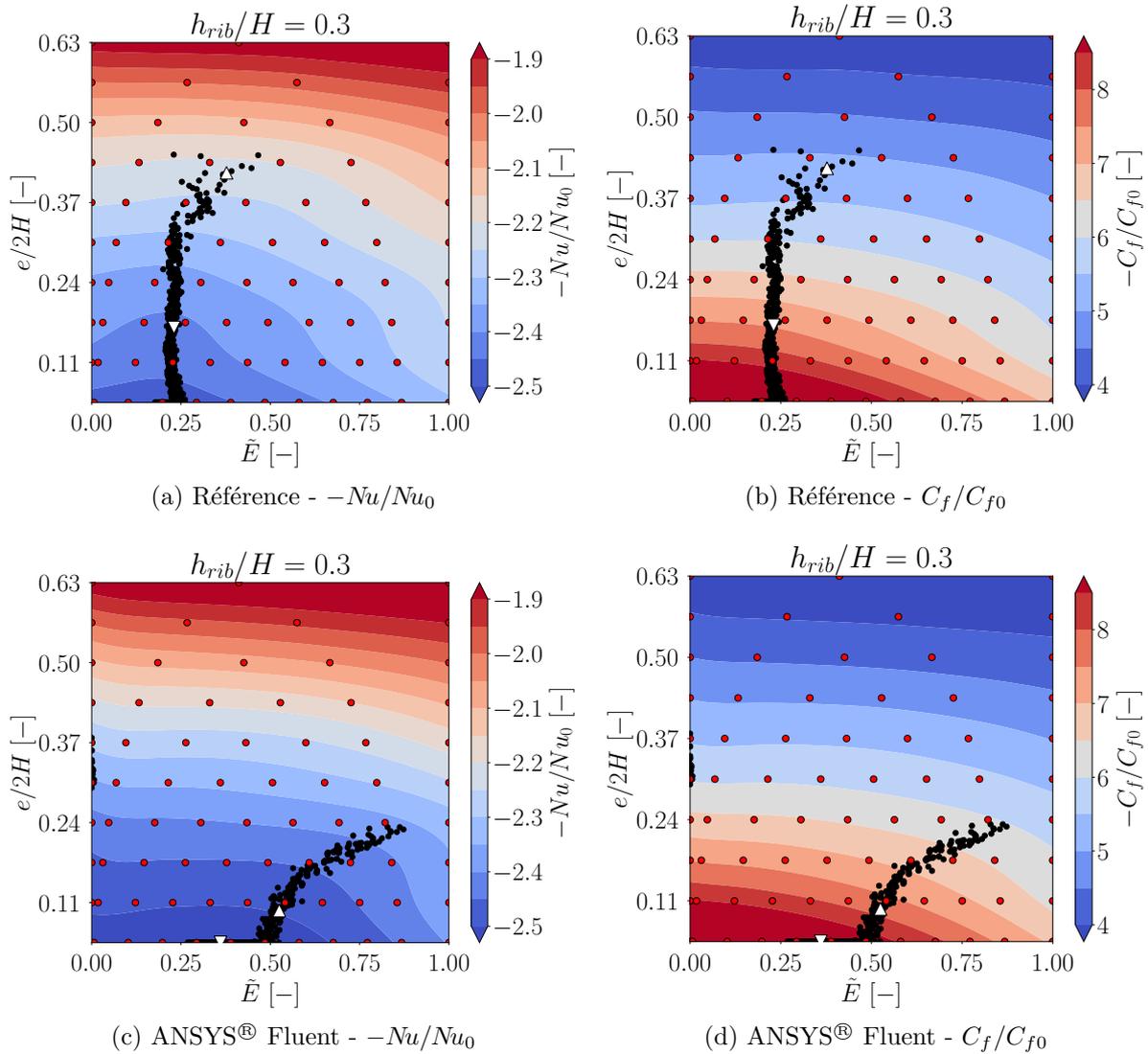


Figure 5.23 – Courbes de niveaux des surfaces de réponse lorsque $h_{rib}/H = 0.3$ pour le nombre de Nusselt (à gauche) et le coefficient de perte de charge (à droite) et pour la référence (en haut) et les simulations réalisées par ANSYS[®] Fluent (en bas). Les points rouges identifient la position des observations du plan d'expériences, les points noirs celle des individus du set de Pareto et les symboles vides celle des centres de groupes.

une géométrie symptomatique, caractérisée par $h_{rib}/H = 0.15$ et $e/2H = 0.5$, l'évolution des profils des objectifs en fonction de ψ est représentée sur la Figure 5.24. Les valeurs des objectifs prédits par les métamodèles construits à partir des observations évaluées avec Fluent ont des variations monotones lorsque l'angle augmente, alors que pour les métamodèles de la référence, un changement de pente est visible entre 90 deg et 100 deg. Le comportement de C_f/C_{f0} peut être considéré comme similaire entre les deux solveurs car les intervalles de confiance sont étendus et la différence pour $\psi = 80$ deg est inférieure à 1.5%. Les résultats obtenus avec Fluent tendent à considérer des *ribs* optimaux thermiquement pour un angle de 80 deg contre 100 deg pour la référence. Ceci est cohérent avec les distributions observées dans l'espace des paramètres. Bien que les variations du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge soient inférieures à 2%, elles ont un impact important sur les résultats de l'optimisation car elles décalent la

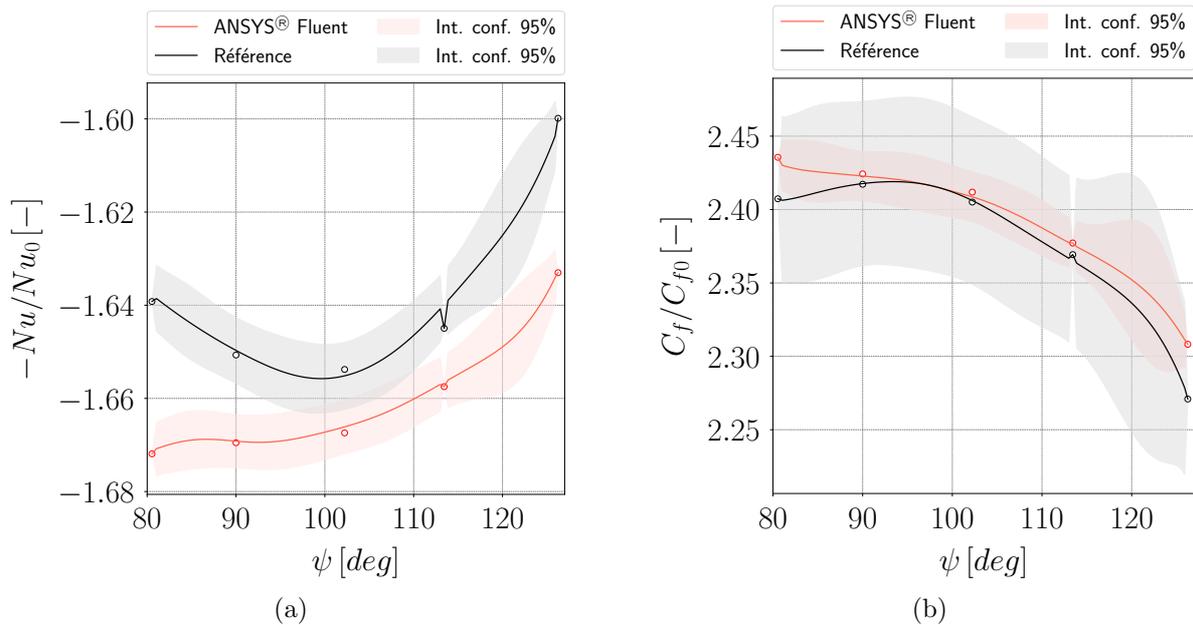


Figure 5.24 – Évolution des valeurs des objectifs pour $h_{rib}/H = 0.15$ et $e/2H = 0.5$ en fonction de ψ pour la référence (en noir) et ANSYS[®] Fluent (en rouge), toutes choses étant égales par ailleurs. Les zones pleines correspondent aux intervalles de confiance à 95% et les points indiquent les observations du plan d'expériences.

zone de minima.

La Figure 5.25 illustre les lignes de courant en aval du *rib* pour la forme $h_{rib}/H = 0.15$, $e/2H = 0.5$ et $\psi = 84$ deg. On remarque que la recirculation dans le coin issue de la simulation de référence est plus petite que celle obtenue avec la simulation ANSYS[®] Fluent. C'est une explication probable de la différence d'estimation de Nu/Nu_0 entre les deux solveurs pour les formes ayant un angle inférieur à 90 deg. En effet, cette recirculation a un sens de rotation qui tend à entraîner le fluide depuis la paroi vers le cœur de l'écoulement. Plus elle est importante et plus les vitesses du fluide sont importantes. Cela a pour conséquence d'intensifier le transfert thermique à la paroi²¹.

Une question reste ouverte concernant la cause de cette différence de taille de la recirculation entre les deux solveurs, qui utilisent pourtant le même modèle de turbulence. Des schémas spatiaux différents ou des différences d'implémentation des modèles sont suspectés.

5.5.4 Comparaison des formes et conclusion

Bien que l'analyse globale de l'écart de résultats entre les observations soit très satisfaisante, cette comparaison des solveurs a mis en évidence une différence du résultat de l'optimisation. Toutefois, si l'on observe les formes issues des deux optimisations sur la Figure 5.26, on remarque que les mêmes tendances sont prédites. En effet, les formes maximisant le transfert (∇) sont hautes et étroites puis un peu plus larges et moins hautes (\circ). Les formes les plus petites sont celles qui génèrent le moins de perte de charge (\diamond). Il semble que les deux paramètres importants soient la hauteur du *rib* (h_{rib}) et la largeur en pied (E).

21. Keshmiri et al. (2016) arrivent à une conclusion similaire pour la recirculation en amont du *rib*.

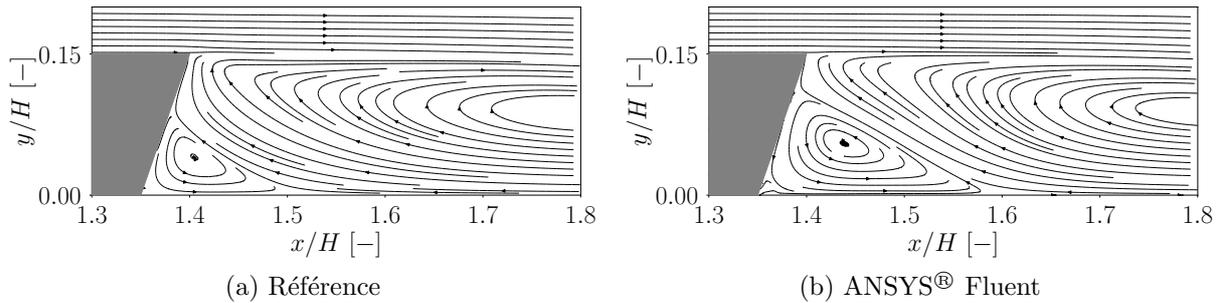


Figure 5.25 – Lignes de courant en aval du *rib* défini par $h_{rib}/H = 0.15$, $e/2H = 0.5$ et $\psi = 84$ deg. La recirculation de coin de la simulation de référence (a) est plus petite que celle obtenue avec ANSYS[®] Fluent (b).

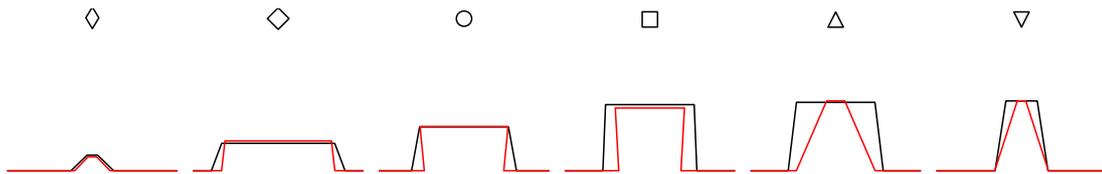


Figure 5.26 – Comparaison des formes de *ribs* obtenues suite à l’optimisation de référence (noir) et à partir des simulations ANSYS[®] Fluent (rouge).

5.6 Conclusions du chapitre

Dans ce chapitre, l’optimisation d’un intensificateur a été réalisée afin de comprendre l’influence du simulateur sur la réponse de l’optimisation. Dans les présents travaux, le simulateur est un solveur de mécanique des fluides numérique. Afin d’être confiant dans les résultats issus de ce solveur, un certain nombre de vérifications doivent être réalisées notamment au niveau des modèles physiques (*e.g.* turbulence) et des supports aux calculs (*e.g.* maillage, paramètres numériques ou solveur).

Bien que celles-ci soient effectuées pour une configuration donnée, comme dans la Section 4.2.5, il est difficilement possible d’en généraliser les conclusions à l’ensemble des formes exploitées durant le processus d’optimisation. Les résultats de la Section 5.3 abondent dans ce sens. La confrontation aux données expérimentales des deux modèles de turbulence $Bl - \overline{v^2}/k$ et $k - \omega$ SST indique une différence de comportement physique que l’on retrouve dans les résultats de l’optimisation. Il faut toutefois bien garder à l’esprit que l’optimisation est relative à un modèle²² et que lorsque l’on change ce modèle le problème traité n’est plus le même.

Les changements de la méthode de propagation de la déformation de la géométrie et du solveur CFD sont moins critiques que ceux concernant le modèle physique. De légères différences apparaissent au niveau de la topologie de la distribution des individus optimaux dans l’espace des paramètres, et la mise en application de la méthode peut être plus sensible²³. Néanmoins, les formes optimales mises en évidence par le *clustering* sont marginalement différentes, essentiellement à cause d’une variation de l’angle ψ .

22. que l’on espère représentatif de la réalité,

23. Certaines observations sont inatteignables ou les solveurs ne convergent pas.

En considérant ces résultats d'un point de vue purement pratique, si deux simulateurs conduisent à des formes similaires à ± 30 deg d'angle, il faut s'assurer que lors de la fabrication, les tolérances permettent effectivement de différencier ces deux formes. Autrement, elles peuvent être considérées identiques et les deux simulateurs conduisent à la même solution.

Enfin, les trois changements de simulateur abordés dans ce chapitre sont représentatifs de ceux qu'un ingénieur pourrait être amené à faire dans l'application de la méthode présentée dans ces travaux. La méthode est donc suffisamment robuste pour fournir des surfaces de réponse et des optima malgré ces changements. Il devra toutefois être conscient que le modèle physique associé au simulateur reste un point sensible qui impacte grandement les résultats.

CHAPITRE 6

Robustesse à la complexité physique

Ce chapitre présente une analyse des résultats de l'optimisation lorsque la complexité de la physique étudiée s'accroît. Sont considérées l'augmentation du nombre d'échelles au travers d'une méthode globale et d'une méthode CFD, ainsi que la prise en compte d'une dynamique d'encrassement.

Sommaire

6.1	Introduction	160
6.2	Obtention de corrélations pour l'intensificateur	160
6.2.1	Construction des métamodèles	161
6.2.2	Analyse des métamodèles	163
6.2.3	Analyse des corrélations	165
6.2.4	Optimisation de l'intensificateur	165
6.3	Passage à l'échelle par une méthode globale	168
6.3.1	Présentation du problème d'optimisation	169
6.3.2	Analyse des résultats de l'optimisation	171
6.3.3	Étude de sensibilité des performances thermiques	172
6.3.4	Conclusions	173
6.4	Passage à l'échelle via la simulation numérique	174
6.4.1	Problème d'optimisation	175
6.4.2	Construction des métamodèles	175
6.4.3	Analyse des résultats	177
6.4.4	Conclusions	184
6.5	Encrassement	184
6.5.1	Temps courts	185
6.5.2	Temps longs	188
6.5.3	Conclusions	194
6.6	Conclusions du chapitre	194

6.1 Introduction

Comme présenté au Chapitre 2, de nombreuses études existent concernant l'optimisation d'un motif d'échangeur à l'échelle locale via un outil CFD. De même des optimisations de forme à l'échelle globale existent. Toutefois des études réalisant une optimisation plus complexe liant les deux échelles ou introduisant une nouvelle physique sont très peu nombreuses. Ce chapitre cherche à étudier les résultats et la robustesse de la méthode d'optimisation lorsque la complexité de la physique étudiée augmente. Dans les présents travaux, cela se traduit de deux façons différentes :

- une augmentation du nombre d'échelles considérées ou comment une modification locale de la forme impacte les performances globales de l'échangeur, et quelle est l'influence de la partie distribution ;
- l'ajout d'une problématique d'encrassement en plus des considérations thermohydrauliques au niveau de l'intensificateur.

Pour réaliser ces études, différentes configurations parmi celles présentées au Chapitre 4 sont utilisées.

La configuration TWOSIDE, qui est représentative d'un motif d'intensificateur d'un échangeur à plaques, est utilisée à l'échelle locale. La simulation numérique, associée à la métamodélisation par krigeage, permet de construire des corrélations pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge en fonction des paramètres de forme et des conditions de l'écoulement (nombre de Reynolds). Par ailleurs, ces métamodèles permettent également de réaliser une optimisation de forme à l'échelle locale avec $-Nu/Nu_0$ et C_f/C_{f0} comme objectifs à minimiser.

La configuration ECH-0D fournit un premier cadre pour une approche multiéchelle de l'échangeur. Il s'agit d'un échangeur à plaques à courants croisés idéalisé modélisé en utilisant les corrélations locales pour calculer l'efficacité et la perte de charge. Les performances globales sont alors optimisées. L'étude est ensuite complexifiée grâce à la configuration ECH-3D, qui via la simulation numérique de l'ensemble de l'échangeur, permet de prendre en compte les effets de la distribution et rajoute l'angle de diffusion comme paramètre à l'optimisation des performances.

Enfin, l'encrassement tel qu'observé dans les EGR coolers est modélisé par l'intermédiaire d'un solveur CFD sur la base de la configuration TWOSIDE. Une optimisation à plus de deux objectifs (performances thermohydrauliques et encrassements) à l'échelle locale est alors réalisée.

6.2 Obtention de corrélations pour l'intensificateur

La simulation numérique de la configuration TWOSIDE permet de construire un couple de métamodèles pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge en fonction des paramètres de forme du *rib* et du nombre de Reynolds. Ces métamodèles sont alors utilisés en tant que corrélations par les modèles d'échangeurs plus globaux (ECH-0D et ECH-3D).

Les plages de variation des paramètres de forme du *rib* sont définies par les Eqns. (4.21) à (4.23) et le nombre de Reynolds Re_{D_H} varie entre 3 000 et 13 000. Cependant, la borne inférieure de $E/2H$ est une fonction de la valeur du paramètre $e/2H$. Afin de

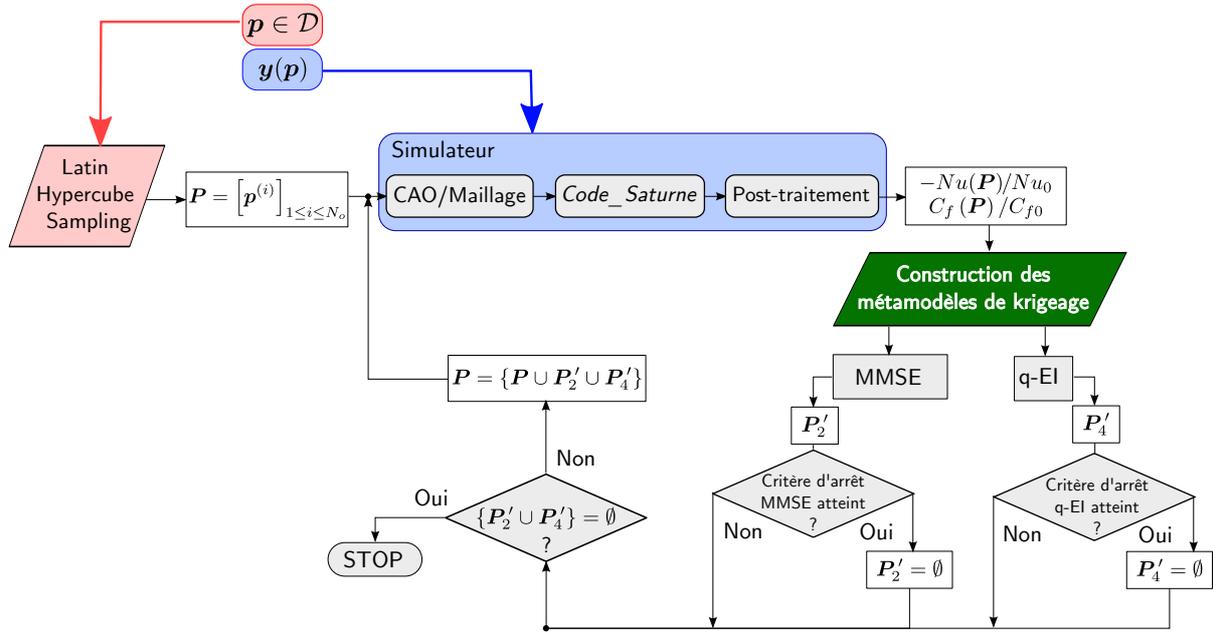


Figure 6.1 – Représentation schématique de l'algorithme d'enrichissement.

s'affranchir de cette dépendance, un changement de variable est introduit, et on définit :

$$\tilde{E} = \frac{0.9 \frac{e}{2H} - \frac{E}{2H}}{0.9 \frac{e}{2H} - 0.525} \in [0; 1] \quad (6.1)$$

Le vecteur de paramètres est $\mathbf{p} = (h_{rib}, e, \tilde{E}, Re_{DH})$ et l'espace de construction des métamodèles est défini comme :

$$\mathcal{D} = \begin{cases} \mathbf{p} \in \mathbb{R}^4 & (6.2) \\ \text{sachant } h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (6.3) \\ e/2H \in [0.0375; 0.45] & (6.4) \\ \tilde{E} \in [0; 1] & (6.5) \\ Re_{DH} \in [3\ 000; 13\ 000] & (6.6) \end{cases}$$

Les deux fonctions à approcher par la métamodélisation sont l'opposé du nombre de Nusselt normalisé $-Nu/Nu_0$ et le coefficient de perte de charge normalisé C_f/C_{f0} , afin de se positionner dans un problème de minimisation. Nu_0 est issu de la corrélation de Dittus-Boelter (Eqn. (4.27)) et C_{f0} de la corrélation de Blasius (Eqn. (4.28)).

6.2.1 Construction des métamodèles

6.2.1.1 Stratégie d'enrichissement

Afin de construire les approximations les plus précises possibles et à moindre coût numérique, un algorithme d'enrichissement des métamodèles, représenté sur la Figure 6.1 est utilisé.

Deux critères parmi ceux présentés dans la Section 3.3.5 ont été retenus. Le premier est le critère MMSE qui permet l'exploration de l'espace des paramètres. Son choix est motivé par l'utilisation des métamodèles en tant que corrélations, et donc, par la nécessité

de réduire l'incertitude de la prédiction de la moyenne de krigeage sur l'ensemble de l'espace. D'autre part, la quantification de l'incertitude maximale fournit un critère d'arrêt à l'algorithme d'enrichissement.

Le second critère est l'amélioration espérée multipoints q-EI (Section 3.3.5.2). Ce critère d'exploitation permet d'enrichir¹ les métamodèles dans les zones de minimum probable respectives. On suppose en effet que les optima des performances de l'intensificateur se situent dans la même zone que les optima des performances de l'échangeur. Il présente également l'avantage de quantifier l'amélioration et de pouvoir définir un critère d'arrêt.

L'algorithme débute par la création d'un plan d'expériences \mathbf{P} par LHS optimisé grâce à l'algorithme ESE et le critère de discrédance (voir Section 3.3.2.2). Les observations de \mathbf{P} sont évaluées par le simulateur (configuré selon la mise en données présentée dans la Section 4.3). Les métamodèles sont ensuite construits et les valeurs des critères d'enrichissement calculées. Les deux métamodèles reposent sur des plans d'expériences séparés et s'enrichissent indépendamment l'un de l'autre. A chaque itération et pour chaque métamodèle $N_o = 6$ observations sont obtenues par l'enrichissement. Deux d'entre elles le sont par la MMSE (\mathbf{P}'_2). Les quatre autres observations sont issues du q-EI (\mathbf{P}'_4). Les critères d'arrêt sont définis par les Eqns. (3.53) et (3.54) et les tolérances sont fixées à $\delta_{\text{MMSE}} = 3\%$ et $\delta_{\text{q-EI}} = 0.1\%$. Si la valeur d'un critère (MMSE ou q-EI) est inférieure à sa tolérance, alors aucune observation n'est ajoutée pour ce critère, comme l'illustre la Figure 6.1. La valeur du critère $\delta_{\text{q-EI}}$ dérive de la valeur usuellement utilisée pour l'EI (voir Section 3.3.5.4), réduite pour prendre en compte l'aspect multipoint. La valeur de δ_{MMSE} a été choisie légèrement inférieure à la valeur utilisée dans des approches reposant sur la RMSE (Saleh et al., 2013a) car donnant une information plus locale. Si les deux tolérances d'arrêt sont atteintes, l'enrichissement du métamodèle est terminé. Sinon, les nouvelles observations sont ajoutées aux plans d'expériences et évaluées par le simulateur. Les paramètres des métamodèles de krigeage sont recalculés et six nouvelles observations sont obtenues grâce aux critères d'enrichissement.

6.2.1.2 Options de construction

Les options de construction des métamodèles sont résumées dans le Tableau 6.1. Le noyau de covariance Matérn $\nu = 5/2$ est utilisé pour assurer la stabilité de l'estimation des paramètres du krigeage. La répétabilité de cette estimation est assurée par l'emploi de l'algorithme GENOUD pour maximiser la vraisemblance. L'effet de pépète est estimé afin de pallier les possibles perturbations de la réponse du simulateur. Une tendance constante est utilisée car aucune pré-supposition sur la variation des réponses n'est faite.

A chaque changement du plan d'expériences, les paramètres du krigeage sont ré-estimés. La résolution du problème de maximisation de la MSE énoncé Eqn. (D.26), est réalisée par l'algorithme GENOUD. Les deux observations sont obtenues grâce à une stratégie heuristique similaire à la méthode du *Kriging Believer* proposé par Ginsbourger et al. (2010) et présentée dans l'Annexe D.3.3.2. Le problème de maximisation du q-EI énoncé Eqn. (D.46) est résolu en utilisant la méthode du *Constant Liar* avec le mensonge défini par l'Eqn. (D.48) (voir Annexe D.3.3.2).

1. via plusieurs observations simultanément,

Noyau de covariance	Maximisation de la vraisemblance	Effet de pépité	Tendance
Matérn $\nu = 5/2$	GENOUD (Mebane Jr et al., 2011) Pop. = 500 Max. gen. = 15	Estimation	Constante

Tableau 6.1 – Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage.

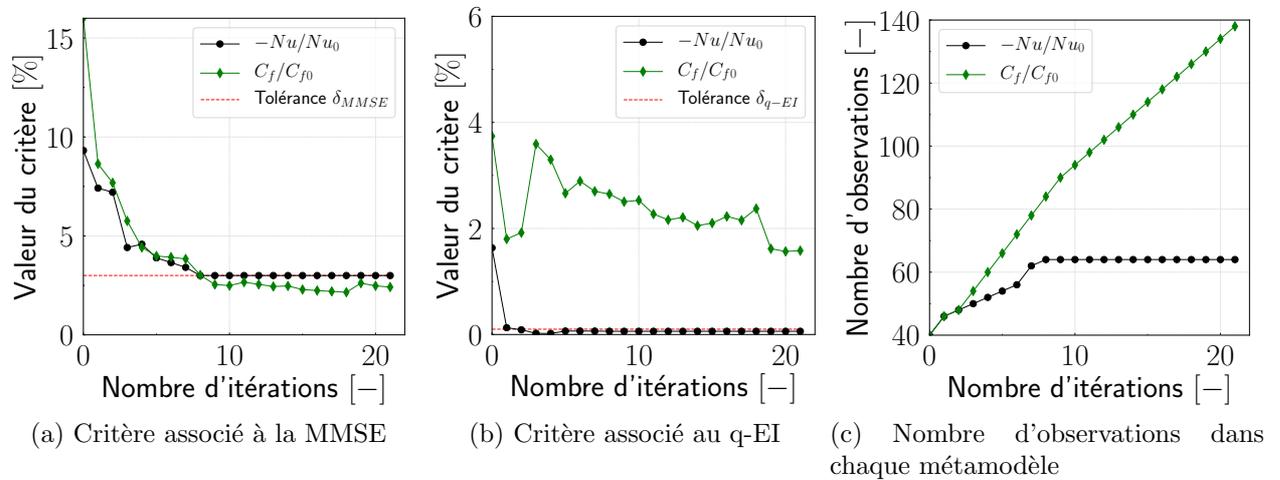


Figure 6.2 – Évolution du nombre d'observations et des critères donnés par la MMSE et le q-EI en fonction des itérations de l'algorithme d'enrichissement. Les informations concernant le métamodèle de $-Nu/Nu_0$ sont en noir et celles du métamodèle de C_f/C_{f0} en vert. La ligne en pointillés rouges indique la tolérance associée à chaque critère.

6.2.2 Analyse des métamodèles

Les plans d'expériences initiaux sont constitués de 40 observations. A la fin du processus d'enrichissement, le métamodèle du nombre de Nusselt repose sur 64 observations et le métamodèle du coefficient de perte de charge sur 138 observations.

6.2.2.1 Convergence des métamodèles

La Figure 6.2 montre l'évolution de la valeur des critères d'enrichissement et du nombre d'observations constituant les plans d'expériences en fonction du nombre d'itérations de l'algorithme d'enrichissement.

La valeur du critère associé à la MMSE décroît de manière monotone et, pour les deux métamodèles, elle atteint la valeur de la tolérance à la huitième itération. Cette itération marque la fin de l'enrichissement pour le métamodèle $-Nu/Nu_0$.

L'évolution de la valeur du critère associé au q-EI est différente pour les deux métamodèles. Dans le cas du nombre de Nusselt, la tolérance est atteinte à la troisième itération. La décroissance de la valeur du critère dans le cas de C_f/C_{f0} est plus fastidieuse et n'atteint pas la tolérance. La fin de l'enrichissement pour ce métamodèle a été décidée arbitrairement à l'itération 22 car la valeur du critère associé à la MMSE est en deçà de la tolérance et le gain sur le q-EI n'est plus significatif pour les trois dernières itérations.

L'évolution du nombre d'observations dans chaque plan d'expériences met en évidence la fin de l'enrichissement pour le métamodèle du nombre de Nusselt. Le changement de

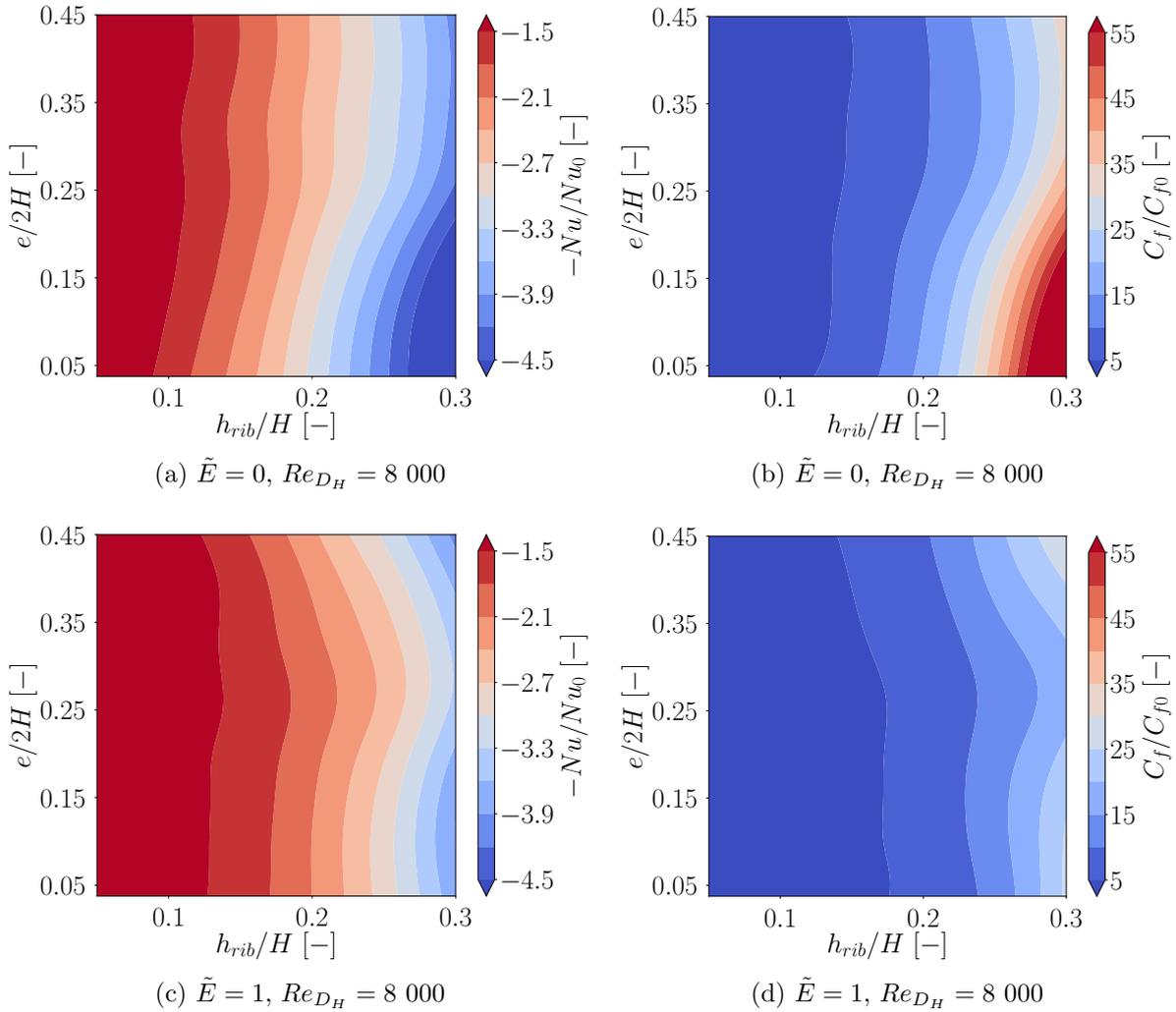


Figure 6.3 – Courbes de niveaux des surfaces de réponse pour $Re_{D_H} = 8\,000$ et deux valeurs de \tilde{E} : zéro (en haut) et l’unité (en bas). Le nombre de Nusselt est à gauche et le coefficient de perte de charge à droite. La zone de minima (bleu) de C_f/C_{f0} est plus étendue que celle de $-Nu/Nu_0$.

penne pour le coefficient de frottement correspond au moment où la valeur du critère associé à la MMSE atteint la tolérance.

Cette différence de comportement sur le critère q-EI trouve une explication dans l’allure des surfaces de réponse des deux moyennes de krigeage. Les courbes de niveaux sont tracées sur la Figure 6.3 en fonction de h_{rib}/H et de $e/2H$ pour un nombre de Reynolds de 8 000 et deux valeurs de \tilde{E} (0 et 1).

Les Figures 6.3(a) et 6.3(c) montrent les courbes de niveaux associées au nombre de Nusselt. On remarque que la zone de minima (en bleu) est relativement réduite, les gradients dans son voisinage sont importants et que la variation est monotone. Ainsi, le critère d’amélioration espérée identifie aisément cette zone d’intérêt et l’enrichissement est rapide.

Les Figures 6.3(b) et 6.3(d) illustrent la variation du coefficient de perte de charge. Pour cette grandeur, la zone de minima est très étendue avec des gradients peu importants. Un comportement similaire a été observé lorsque C_f/C_{f0} évolue en fonction de \tilde{E} et du

nombre de Reynolds. Ainsi, l'amélioration espérée y trouve à chaque itération un vecteur de paramètres comme candidat probable à la minimisation de la réponse. La quantification de l'amélioration ne diminuant pas, il est raisonnable de penser que celle-ci s'approchera de la tolérance lorsque l'ensemble de la zone aura été échantillonné. Cependant, l'ajout de trop nombreuses observations dans cette zone peut induire une dégradation de la prédiction ailleurs car augmentant le "bruit". Ceci est d'autant plus probable lorsque l'effet de pépite est estimé (Mastripolito et al., 2018b). Ceci est observable sur la Figure 6.2, où pour les trois dernières itérations, la valeur du critère de MMSE ré-augmente légèrement.

6.2.2.2 Qualité de la prédiction et sensibilité

En l'état, les métamodèles semblent être construits convenablement. Afin de les valider, une quantification de la qualité de la prédiction est réalisée au moyen d'une *cross-validation* à 10 sous-ensembles. Pour les deux métamodèles, le coefficient de corrélation quadratique Q^2 est égal à 0.97. Les valeurs de $RMSE_{CV}$ et de MAE_{CV} relatives sont inférieures à 2% pour les deux métamodèles. De plus, les variations des paramètres de portée et des coefficients de la tendance des métamodèles au cours du processus de validation sont négligeables.

L'ajout d'un effet de pépite permet de se prémunir des perturbations que pourrait induire le simulateur, suite à des défauts de convergence du solveur CFD par exemple. Il convient alors de vérifier son influence sur la prédiction des métamodèles. Celle-ci est quantifiée par la valeur de la variance estimée τ^2 , qui est de l'ordre de $10^{-6}\%$ de l'amplitude de variation des réponses pour les deux métamodèles. Cela permet donc de conclure que cet effet n'a pas d'influence sur la précision de la prédiction.

Une tendance constante est utilisée pour construire les métamodèles et réaliser l'enrichissement. *A posteriori*, différentes tendances (linéaire, polynôme d'ordre deux avec effets croisés) ont été testées sans grandes différences ou améliorations significatives.

6.2.3 Analyse des corrélations

La Figure 6.4 illustre la variation du nombre de Nusselt normalisé par la corrélation de Dittus-Boelter et du coefficient de pertes de charges normalisé par la corrélation de Blasius en fonction du nombre de Reynolds pour deux hauteurs de rib . Les autres paramètres sont fixés à $e/2H = 0.05$ et $\psi = 90$ deg.

On remarque que le transfert thermique diminue quand le nombre de Reynolds augmente tandis que le frottement augmente avec Re_{DH} . Augmenter le taux de blocage (en noir) conduit à des valeurs de nombre de Nusselt et de coefficient de perte de charge plus importantes. Ces tendances sont similaires à celles que l'on retrouve dans la littérature et notamment dans les travaux de Han et al. (1978).

6.2.4 Optimisation de l'intensificateur

Afin de comparer l'influence des différentes échelles par la suite, l'optimisation de l'intensificateur est réalisée. Conformément aux informations résumées dans la Section 4.4, l'écoulement dans le canal de l'échangeur considéré dans les présents travaux est caractérisé par un nombre de Reynolds moyen de l'ordre 8 000. C'est donc à cette valeur qu'est réalisée l'optimisation. Les objectifs à minimiser sont l'opposé du nombre de Nusselt normalisé et le coefficient de perte de charge normalisé. Formellement, le problème d'optimisation s'écrit :

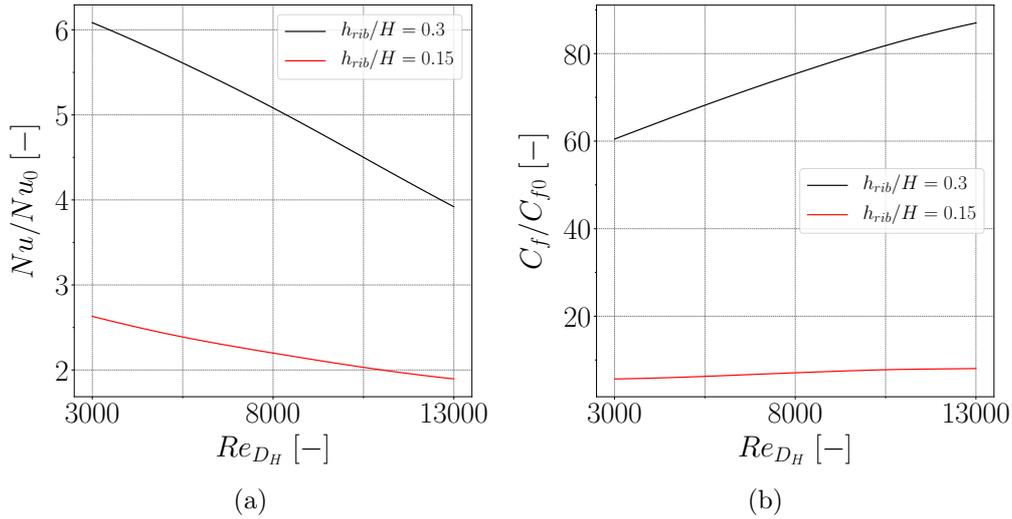


Figure 6.4 – Variation du nombre de Nusselt (a) et du coefficient de perte de charge (b) en fonction du nombre de Reynolds pour deux hauteurs de *rib* ($e/2H = 0.05$ et $\psi = 90$ deg).

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^4} & -Nu(\mathbf{p})/Nu_0 & (6.7) \\ \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^4} & C_f(\mathbf{p})/C_{f0} & (6.8) \\ \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (6.9) \\ & e/2H \in [0.0375; 0.45] & (6.10) \\ & \tilde{E} \in [0; 1] & (6.11) \\ & Re_{DH} = 8000 & (6.12) \end{array} \right.$$

Pour résoudre ce problème, l'algorithme NSGA-II est paramétré pour faire évoluer 900 individus sur 200 générations. La Figure 6.5 illustre la convergence de la recherche d'une solution optimale dans l'espace des paramètres. La distribution des individus, répartis en cinq classes pour h_{rib}/H et $e/2H$ et quatre pour \tilde{E} , se stabilise autour d'une valeur moyenne (lignes pointillées) après la génération 50. Les intervalles de confiance à 95% (en gris) sont inférieurs à 5%, et la solution est considérée convergée. L'analyse des résultats par *clustering* et la construction des SOM repose sur les cent dernières générations. Cela permet d'augmenter le nombre d'individus traités et d'accroître la robustesse de la méthode.

Les résultats de l'optimisation sont visibles sur la Figure 6.6. Comme dans la configuration à un seul *rib*, le front de Pareto (Figure 6.6(a)) met en évidence le comportement antagoniste des deux objectifs. Le *clustering* des individus formant ce front conduit à 7 groupes visibles dans l'espace des paramètres sur la Figure 6.6(b). Les performances des centres de ces groupes sont reportées sur le front de Pareto en symboles vides. Les performances de ces groupes issues de simulations de validation apparaissent en symboles pleins sur le front de Pareto avec les champs de différence de température associés². Le Tableau 6.2 résume la valeur des paramètres, les performances et les écarts entre la prédiction des métamodèles et les simulations pour chacun de ces centres. Les écarts relatifs pour le nombre de Nusselt sont en moyenne de 5%, excepté pour le centre \diamond . En effet celui-ci se

2. différence entre la température moyenne des parois inférieure et supérieure et la température locale.

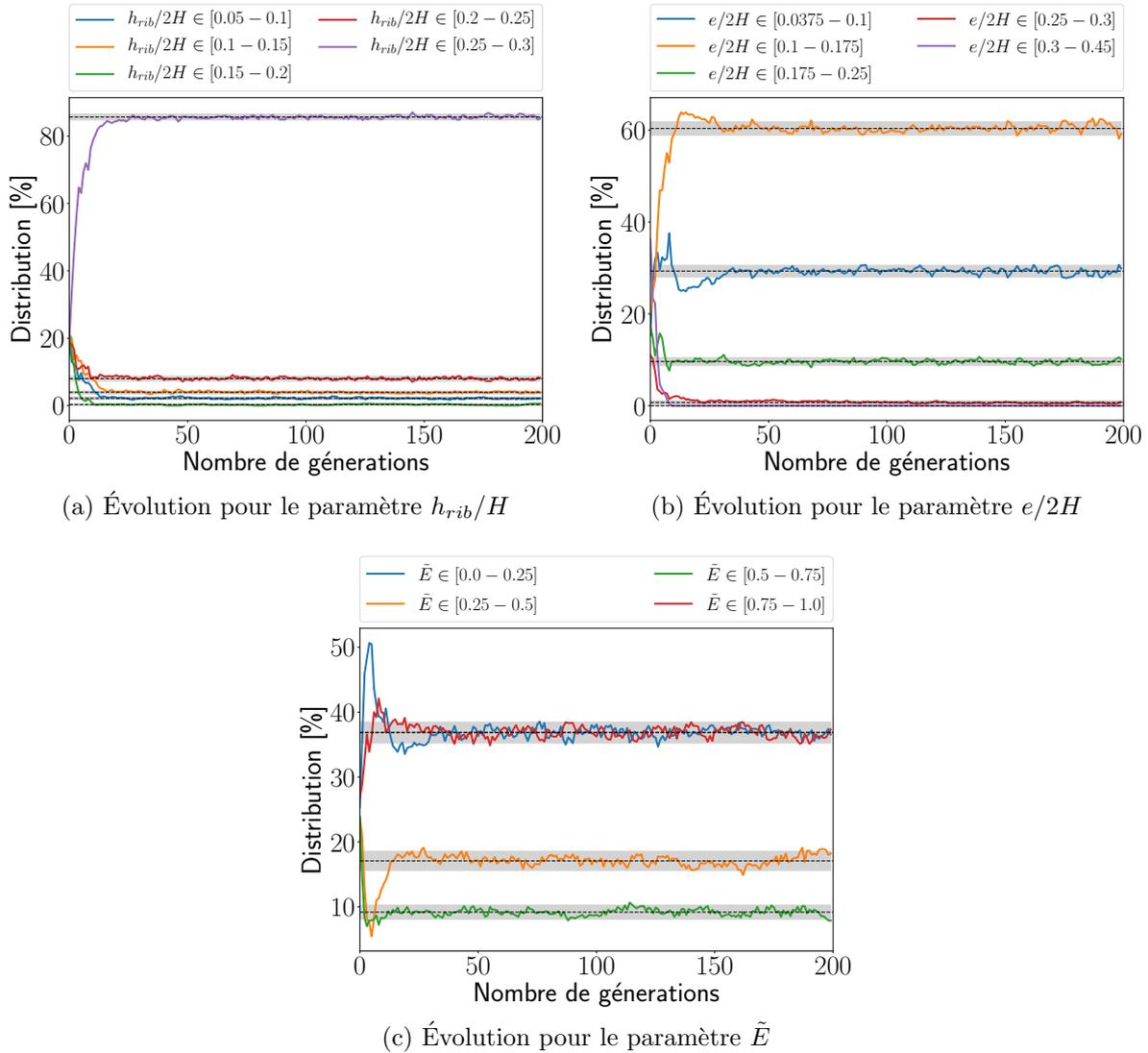


Figure 6.5 – Évolution de la distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans les différentes classes en fonction du nombre de générations pour les trois paramètres de l'optimisation - (a) h_{rib}/H - (b) $e/2H$ - (c) \tilde{E} .

trouve dans une zone de l'espace moins échantillonnée par le plan d'expériences car loin de la zone de minima de $-Nu/Nu_0$ (critère q-EI) et ne présentant pas une forte incertitude au sens du critère MMSE. Les écarts plus importants pour le coefficient de perte de charge (en moyenne de 10%) peuvent s'expliquer par la difficulté à échantillonner correctement l'espace des paramètres dans les zones de minima, comme expliqué précédemment (voir Figure 6.3).

L'analyse des SOM de la Figure 6.6(c) met en évidence que la variation des deux objectifs est essentiellement pilotée par la hauteur d'ailette h_{rib}/H . En effet sa carte et celles des objectifs sont largement semblables. Une hauteur maximale va ainsi induire un transfert et une perte de charge importants, et inversement lorsque la hauteur est minimale. Les autres évolutions des objectifs reposent ensuite sur des variations conjointes de la largeur en tête d'ailette et de l'angle. A partir d'une forme étroite et rectangulaire (\triangleleft), $e/2H$ et ψ vont augmenter entraînant une diminution du transfert et de la perte de charge (de ∇ vers \square). On observe également un changement de pente sur le front

Centre	Paramètres			Objectifs		Écart métamodèle/simulation [%]			
	h_{rib}/H	$e/2H$	$E/2H$	$-\frac{Nu}{Nu_0} [-]$	$\frac{C_f}{C_{f0}} [-]$	$-\frac{Nu}{Nu_0}$	$\frac{C_f}{C_{f0}}$	Moyenne	Écart-type
◇	0.0755	0.0414	0.5250	-1.00	1.68	16.9	14.5	$-Nu/Nu_0$	
◊	0.1144	0.0789	0.0711	-1.65	4.05	4.3	10.8	5.73	4.77
◦	0.2453	0.0475	0.5250	-2.67	13.0	3.87	13.55		
□	0.2998	0.1954	0.5223	-3.54	25.1	3.95	13.1	C_f/C_{f0}	
△	0.3000	0.1290	0.4678	-3.84	32.4	5.11	7.3	10.7	2.95
▽	0.3000	0.1511	0.2987	-4.45	48.4	0.63	8.02		
◁	0.3000	0.1305	0.1176	-4.83	72.2	5.34	7.1		

Tableau 6.2 – Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les sept centres de groupes.

de Pareto entre les centres Δ et \square , qui semble principalement dû à une augmentation soudaine de $e/2H$. Les formes les moins efficaces thermiquement mais qui génèrent le moins de pertes de charge sont obtenues suite à une diminution de la hauteur d'ailette et une augmentation de ψ . Les formes caractérisées par les centres \diamond et \diamond sont finalement très peu différentes d'une plaque plane.

Les champs de température montrent que les hauteurs importantes induisent des recirculations propices à l'homogénéisation de la température et donc au transfert thermique. *A contrario*, les faibles hauteurs conduisent à une stratification de la température qui dégrade le transfert.

Le choix final d'une forme de *rib* dépend évidemment des contraintes de fonctionnement de l'échangeur (puissance à transférer, perte de charge admissible) mais le changement de pente visible sur le front de Pareto donne une bonne indication du compromis. A droite du centre \square , on obtient une amélioration du nombre de Nusselt pour une faible dégradation de la perte de charge. A gauche du centre Δ , l'augmentation du coefficient de perte de charge est beaucoup plus important que le gain relatif pour le transfert thermique. La première zone semble donc plus prometteuse.

6.3 Passage à l'échelle par une méthode globale

Jusqu'à présent, seules les performances locales d'un motif d'intensificateur ont été considérées pour l'optimisation. Toutefois, d'un point de vue pratique il est courant de s'intéresser aux performances globales de l'échangeur, à savoir son efficacité et la perte de charge qu'entraîne la circulation des fluides (et qui doit être au moins compensée par la pompe). De la même manière que Hajabdollahi et al. (2011), les présents travaux proposent d'utiliser une méthode globale (ε -NUT) alimentée par des corrélations. Celles-ci sont construites à partir de simulations CFD et de métamodèles de krigeage (voir Section 6.2).

L'optimisation des performances globales de l'échangeur est réalisée et les paramètres utilisés sont ceux de la forme locale. Les formes optimales obtenues sont alors comparées à celles de l'intensificateur. Cela permettra de conclure quant à l'intérêt de considérer le couplage entre l'échelle globale et l'échelle locale pour l'optimisation.

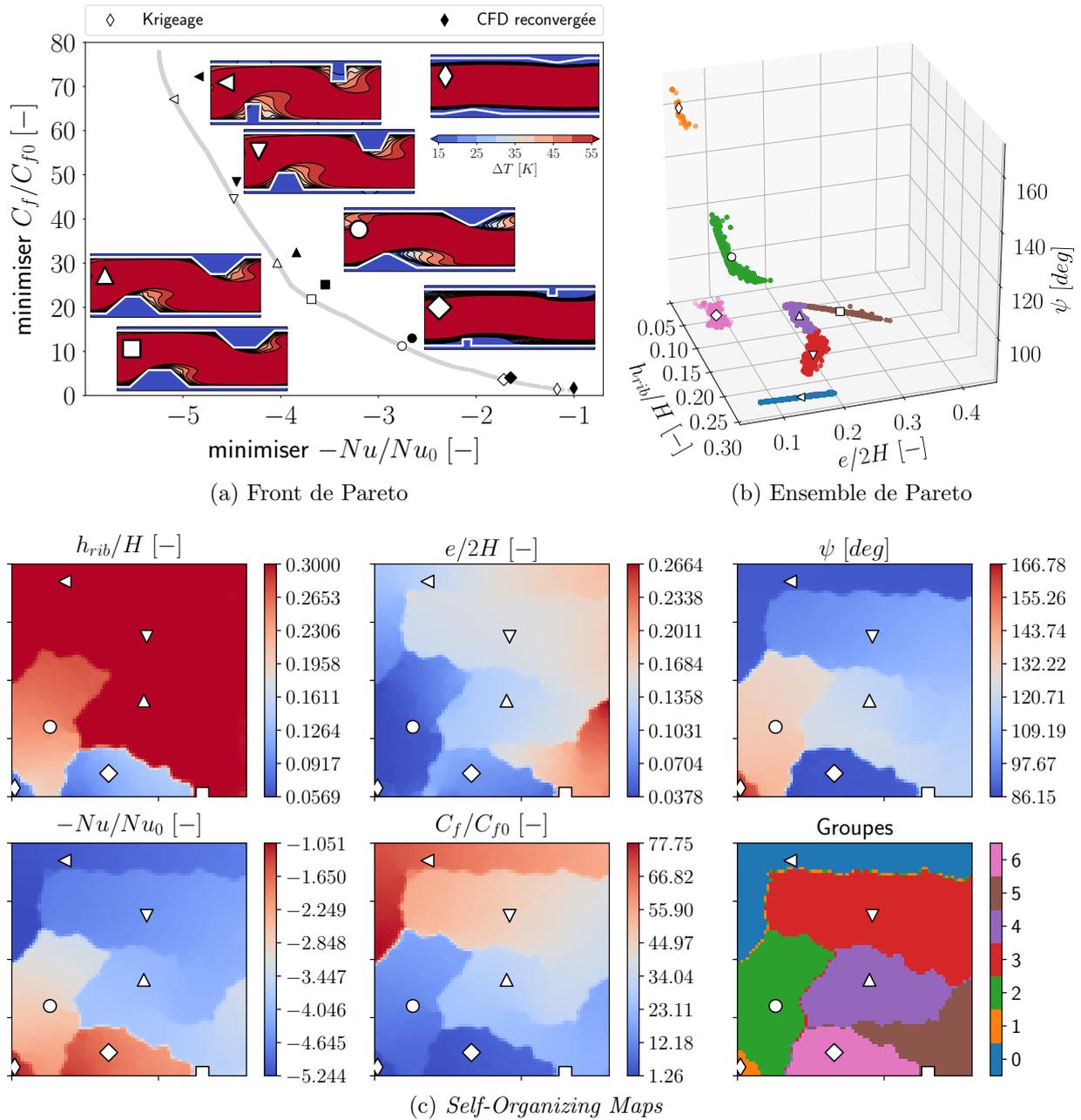


Figure 6.6 – Résultats de l’optimisation de référence TWOSIDE pour $Re_{DH} = 8\,000$ - (a) le front de Pareto avec les sept centres de groupe mis en évidence. Les symboles vides marquent la prédiction de la moyenne de krigeage et les symboles pleins indiquent les performances issues d’une simulation de qualification. - (b) Distribution des individus de l’ensemble de Pareto dans l’espace des paramètres avec une coloration par groupe. Les centres de groupes sont mis en évidence par les symboles vides. (c) *Self-Organizing Maps* des individus de l’ensemble et du front de Pareto identifiant les trois paramètres (en haut), les deux objectifs et les groupes (en bas).

6.3.1 Présentation du problème d’optimisation

La configuration ECH-0D, présentée Section 4.4, décrit l’échangeur à plaques et à courants croisés qui est utilisé pour cette étude. Les canaux chauds sont munis de *ribs* et les canaux froids sont laissés lisses. L’optimisation ne porte que sur la géométrie des

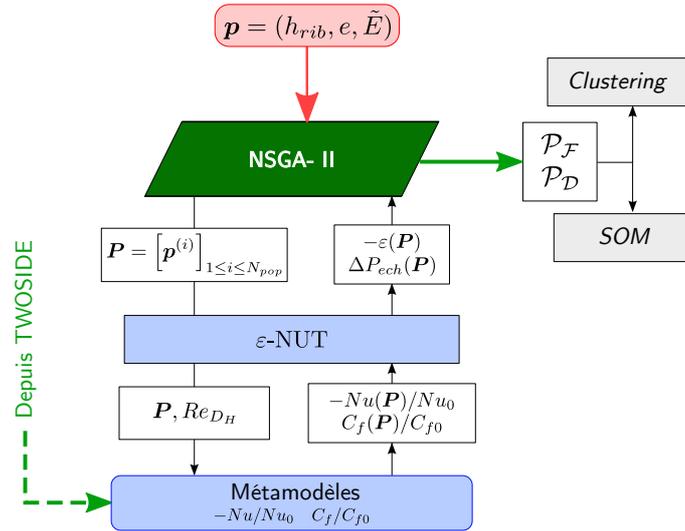


Figure 6.7 – Représentation schématique de la procédure de résolution du problème d'optimisation ECH-0D.

ribs et les conditions de fonctionnement restent constantes. À partir des informations sur les conditions de fonctionnement ainsi que sur la géométrie des *ribs* et de l'échangeur, l'algorithme ε -NUT (voir page 113) permet de déterminer l'efficacité de l'échangeur ε et la perte de charge des côtés froid et chaud. Les informations relatives au *rib* (Nu/Nu_0 et C_f/C_{f0}) sont obtenues grâce aux corrélations construites à partir des simulations de la configuration TWOSIDE. Le problème d'optimisation multiobjectif est formulé comme :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & -\varepsilon(\mathbf{p}) & (6.13) \\ \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & \Delta P_{ech}(\mathbf{p}) & (6.14) \\ \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (6.15) \\ & e/2H \in [0.0375; 0.45] & (6.16) \\ & \tilde{E} \in [0; 1] & (6.17) \end{array} \right.$$

avec le vecteur de paramètres $\mathbf{p} = (h_{rib}, e, \tilde{E}) \in \mathbb{R}^3$. L'objectif de perte de charge ΔP_{ech} est la somme de la perte de charge côté chaud ΔP_h , qui varie avec \mathbf{p} , et de la perte de charge coté froid ΔP_c , qui est constante :

$$\Delta P_{ech}(\mathbf{p}) = \Delta P_h(\mathbf{p}) + \Delta P_c \quad (6.18)$$

La Figure 6.7 illustre la procédure de résolution du problème d'optimisation. L'algorithme ε -NUT peut être considéré comme un conditionneur qui transforme les informations issues des corrélations ($-Nu/Nu_0$ et C_f/C_{f0}) en performances globales de l'échangeur. Le coût numérique de cet algorithme étant très peu élevé, il ne nécessite pas d'étape de métamodélisation et il peut être directement connecté au NSGA-II.

Lors de l'étape d'évaluation de l'algorithme génétique, les métamodèles/corrélations sont interrogés pour prédire le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge du motif sachant les paramètres de la forme et le nombre de Reynolds. Celui-ci est déterminé par l'algorithme ε -NUT à partir des conditions de fonctionnement de l'échangeur. Ces informations sont ensuite transmises à la méthode de dimensionnement globale qui renvoie la valeur de l'efficacité et de ΔP_{ech} .

6.3.2 Analyse des résultats de l'optimisation

Ce problème est résolu par l'algorithme NSGA-II avec une population de 900 individus sur 200 générations. La distribution des individus dans les différentes classes de paramètres se stabilise après la génération 50.

6.3.2.1 Résultats de l'optimisation

La Figure 6.8 illustre les résultats de l'optimisation. La distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans l'espace des paramètres est visible sur la Figure 6.8(b). Le *clustering* met en évidence 7 groupes et leurs centres sont repérés par les symboles vides. Les performances de ces centres sont également indiquées sur le front de Pareto en symboles vides. Les symboles noirs marquent les performances obtenues suite à la simulation des centres (par l'Alg. 1 alimenté par la simulation *Code_Saturne* des motifs locaux, sans recourir aux métamodèles construits à la Section 6.2).

La distribution des individus est indiscernable de celle obtenue suite à l'optimisation du motif local du *rib* visible sur la Figure 6.6(b). Les centres caractérisant ces groupes sont également identiques. L'allure du front de Pareto est globalement similaire, mais on peut remarquer que le changement de pente (entre \square et Δ) est plus marqué ici.

Le Tableau 6.3 résume les paramètres des centres, leurs performances issues de la simulation et les écarts relatifs entre la prédiction des métamodèles et les simulations. Pour la perte de charge ΔP_{ech} , les écarts sont identiques à ceux du coefficient de perte de charge C_f/C_{f0} du Tableau 6.2. Les écarts pour l'efficacité ont eux considérablement diminué par rapport à ceux de Nu/Nu_0 , passant de 5% à moins de 3% en moyenne. Le centre identifié par le symbole \diamond exhibe toujours un écart important.

6.3.2.2 Analyse des relations entre performances locales et globales

Ces résultats s'expliquent par la dépendance de ε et de ΔP_{ech} au nombre de Nusselt et au coefficient de perte de charge. Comme l'indique l'Eqn. (4.60) de l'algorithme 1, le nombre de Nusselt permet de calculer le coefficient d'échange global U et on a :

$$U = \frac{Nu/Nu_0}{C_1 + C_2 Nu/Nu_0} \quad (6.19)$$

avec $C_1 = D_H/\lambda_h Nu_0$ et $C_2 = \frac{1}{Nu_0} (D_H/Nu_c \lambda_c + e_p/2\lambda_s)$, strictement positifs. Ainsi, bien que non linéaire, la relation entre le coefficient d'échange et le nombre de Nusselt est monotone. Ensuite, la relation entre le nombre d'unité de transfert et U est linéaire. Enfin, bien que complexe, l'Eqn. (4.53) indique que l'efficacité croît monotonement avec NUT. Il est alors possible de déduire que l'efficacité va augmenter de manière monotone quand le nombre de Nusselt augmente. La Figure 6.9(a) illustre ce comportement entre les deux quantités.

L'analyse concernant la relation entre la perte de charge ΔP_{ech} et C_f/C_{f0} est plus rapide, car l'Eqn. (2.19) montre qu'elle est linéaire. Cela est également visible sur la Figure 6.9(b).

La Figure 6.9 et l'analyse précédente expliquent en grande partie les résultats de l'optimisation. Étant donné que les performances globales et locales varient monotonement les unes en fonction des autres, l'algorithme ε -NUT ne fait que modifier les amplitudes de variations des objectifs. Néanmoins, la position des minima dans l'espace des paramètres reste la même. L'allure de l'efficacité ε en fonction de Nu/Nu_0 permet de comprendre pourquoi le changement de pente est plus marqué à gauche du symbole Δ : en effet plus

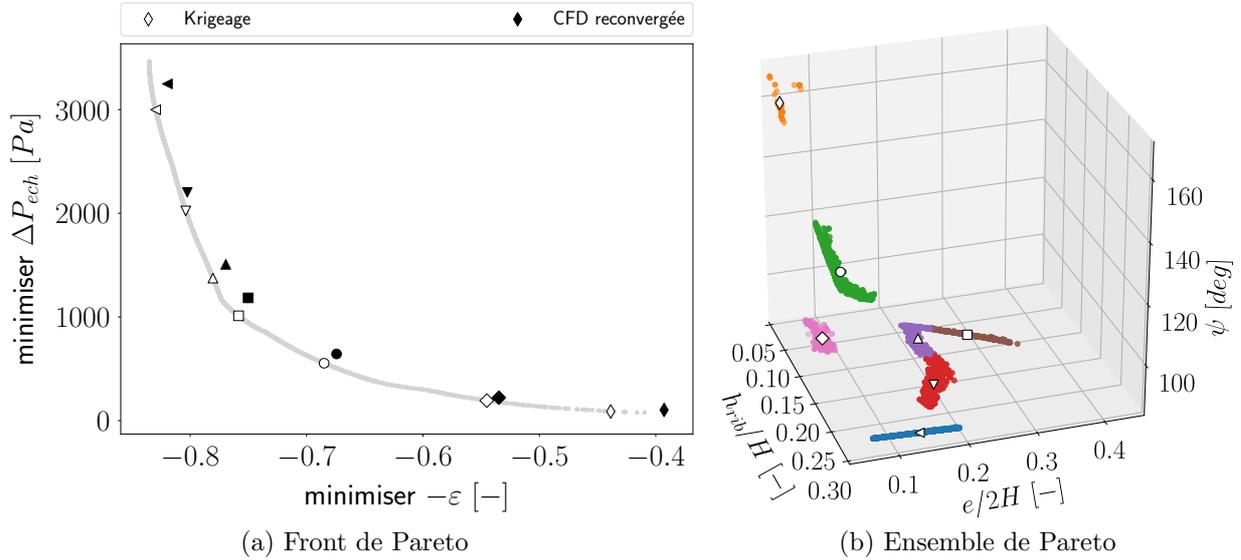


Figure 6.8 – Résultats de l'optimisation de la configuration ECH-0D - (a) le front de Pareto avec les sept centres de groupes mis en évidence. Les symboles vides marquent la prédiction de la moyenne de krigeage et les symboles pleins indiquent les performances issues d'une simulation de qualification. - (b) Distribution des individus de l'ensemble de Pareto dans l'espace des paramètres avec une coloration par groupe. Les centres de groupes sont mis en évidence par les symboles vides.

Centre	Paramètres			Objectifs		Écart métamodèle/simulation [%]			
	h_{rib}/H	$e/2H$	$E/2H$	$-\varepsilon$ [-]	ΔP_{ech} [Pa]	$-\varepsilon$	ΔP_{ech}	Moyenne	Écart-type
◇	0.0755	0.0414	0.5250	-0.39	100	11.7	14.1	$-\varepsilon$	
◇	0.1144	0.0789	0.0711	-0.53	220	1.94	12.8	2.7	3.7
○	0.2453	0.0475	0.5250	-0.67	640	1.6	13.9	ΔP_{ech}	
□	0.2998	0.1954	0.5223	-0.75	1180	1.1	14.6		
△	0.3000	0.1290	0.4678	-0.77	1500	1.4	8.8	11.4	2.8
▽	0.3000	0.1511	0.2987	-0.80	2200	0.2	8.1		
◁	0.3000	0.1305	0.1176	-0.82	3250	1.2	7.6		

Tableau 6.3 – Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les sept centres de groupes.

Nu/Nu_0 est grand, plus faible est l'accroissement de ε . La linéarité de ΔP_{ech} en fonction de C_f/C_{f0} explique que les écarts métamodèle/simulation soient similaires.

6.3.3 Étude de sensibilité des performances thermiques

La réduction des écarts prédiction/simulation³ lors du passage du nombre de Nusselt à l'efficacité est analysée dans cette section. Pour cela, une étude de sensibilité des performances thermiques des deux échelles (Nu/Nu_0 et ε) en fonction des paramètres de forme

3. entre les prédictions des métamodèles et les résultats issus directement de la simulation (CFD ou CFD puis ε -NUT)

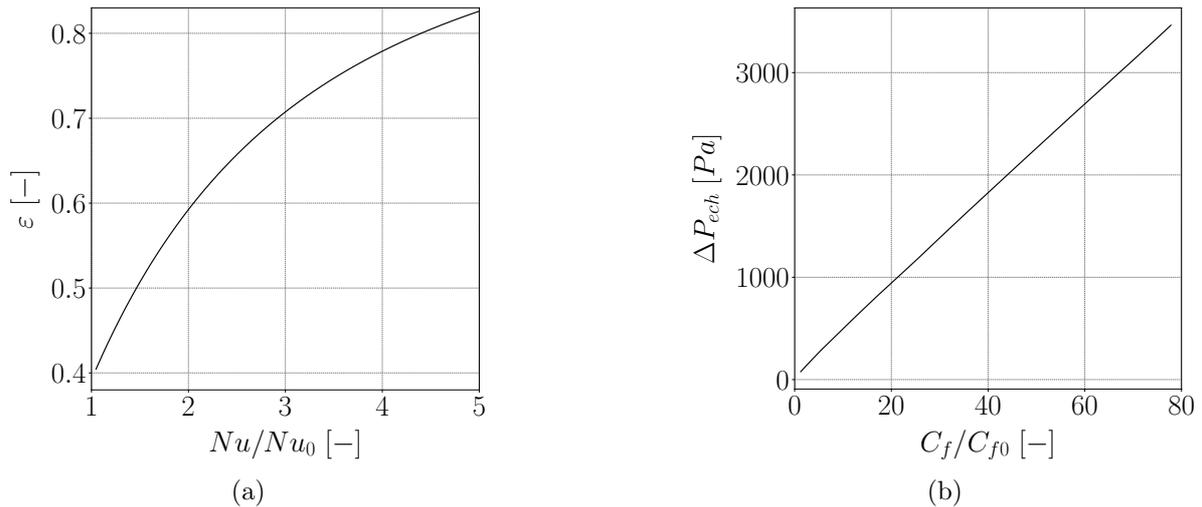


Figure 6.9 – Courbes représentant l'évolution des performances globales de l'échangeur en fonction des performances locales du *rib*.

est réalisée conjointement. Les valeurs de Nu/Nu_0 sont obtenues grâce au métamodèle pour un nombre de Reynolds de 8 000. L'efficacité de l'échangeur est ensuite calculée grâce à l'algorithme ε -NUT.

L'analyse repose sur la forme définie par les paramètres $h_{rib}/H = 0.175$, $e/2H = 0.20$ $\psi = 104.5$ deg, se situant au "centre" de l'espace des paramètres. Ses performances thermiques sont $Nu/Nu_0 = 2$ (local) et $\varepsilon = 0.6$ (global). La Figure 6.10 montre l'évolution de Nu/Nu_0 et ε en fonction de la variation des paramètres, indépendamment les uns des autres. Comme attendu, les sens de variations sont les mêmes. On remarque néanmoins que les amplitudes de variation du nombre de Nusselt (relatif) sont au moins deux fois supérieures à celles de l'efficacité.

Cela montre que, dans ce cas, l'efficacité est moins sensible que Nu/Nu_0 aux variations des paramètres. C'est pour cela que les écarts entre prédiction et simulation sont réduits, pour les performances thermiques, lors du passage à l'échelle globale (comme mis en évidence par les Tableaux 6.2 et 6.3).

6.3.4 Conclusions

L'optimisation des performances de l'échangeur à l'échelle globale en fonction de la forme d'un intensificateur définie à l'échelle locale a mis en évidence un comportement similaire à l'optimisation de la seule échelle locale. Cela s'explique par la monotonie entre l'accroissement du nombre de Nusselt et de l'efficacité et la linéarité entre le coefficient de perte de charge et la perte de charge. Les abaques et les graphes donnant l'efficacité, et disponibles dans de nombreux ouvrages sur les échangeurs (Shah and Sekulic, 2003; Bergman et al., 2011), permettent de conclure que ce comportement sera le même dans une majorité des cas pratiques⁴. Il semble donc envisageable, d'un point de vue mathématique,

4. On pourra noter le cas particulier de l'échangeur tube en U et calandre TEMA G (TEMA, 2007), dont l'efficacité augmente quand NUT augmente, atteint un maximum puis diminue. Le comportement de cet échangeur très particulier s'explique par l'écoulement des fluides : dans certains cas, l'échange thermique entre tube (chaud) et calandre (froid) peut s'inverser si le transfert est trop performant dans la première passe du tube, car au niveau de la seconde passe, le fluide dans le tube se trouve être plus froid que la calandre.

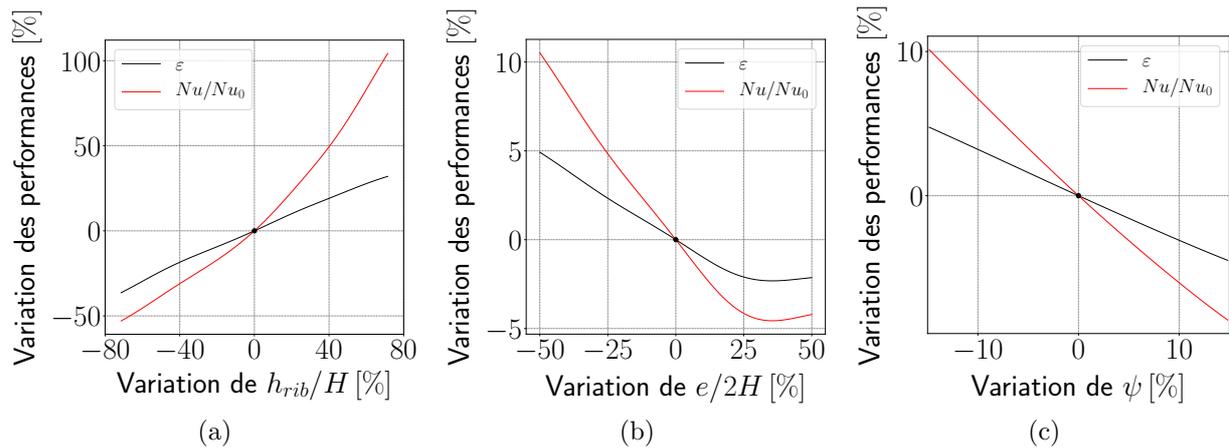


Figure 6.10 – Variation (en pourcent) des performances thermiques en fonction de la variation (en pourcent) des paramètres. L’efficacité est en noir et Nu/Nu_0 en rouge. La forme de référence est $h_{rib}/H = 0.175$, $e/2H = 0.20$ et $\psi = 104.5$ deg

de ne plus réaliser que des optimisations locales sans considération des performances globales de l’échangeur.

Toutefois, même si les résultats sont similaires, le passage à l’échelle globale présente certains avantages. Le fait que l’efficacité soit, dans ce cas, moins sensible aux variations des paramètres permet d’envisager plus sereinement la phase d’industrialisation. En effet, la prédiction de l’optimisation est plus robuste et les tolérances de fabrication impacteront moins les performances thermiques de l’échangeur. Les résultats de l’optimisation seront donc plus prédictifs. On pourrait également envisager que des paramètres très influents sur les performances à l’échelle locale se trouvent être peu discriminants et importants à l’échelle globale.

D’autre part, l’utilisation d’autres objectifs comme le coût, l’encombrement ou la masse (qui n’ont pas été considérés dans les présents travaux) ne peut se faire qu’à l’échelle globale. De même, c’est à cette échelle qu’il faut raisonner lorsque l’optimisation intègre des paramètres tel que le nombre de motifs, le nombre de plaques ou l’arrangement des passes de l’échangeur.

6.4 Passage à l’échelle via la simulation numérique

L’étude précédente, bien que permettant de considérer les performances globales de l’échangeur, reste limitée par l’hypothèse de distribution uniforme des débits entre les canaux. Les présents travaux proposent de réaliser une optimisation des performances globales de l’échangeur prenant également en compte l’effet de la distribution. Pour cela, l’approche multiniveau ECH-3D, présentée Section 4.5, est utilisée.

Elle permet de considérer l’influence d’une distribution du débit non-homogène sur les pertes de charge et le transfert thermique au sein de l’échangeur. Pour cela, elle couple une simulation CFD de type ”poreuse” à des informations issues de corrélations numériques construites avec des simulations locales et des outils de métamodélisation.

L’utilisation des trois paramètres définissant l’intensificateur (TWO SIDE) et de la longueur du diffuseur L_D couple l’influence des différentes échelles. Les résultats de l’optimisation des performances globales reposant sur ces quatre paramètres sont comparés à

ceux de l'échangeur idéal ECH-0D.

6.4.1 Problème d'optimisation

Le problème consiste donc à optimiser les performances d'un échangeur à plaques à courants croisés air/eau muni d'un diffuseur en entrée et sortie du côté chaud. L'hypothèse d'homogénéité des débits entre les canaux du coté air n'est plus utilisée. La question se pose alors de déterminer la longueur de diffuseur conduisant aux meilleures performances thermohydrauliques. Dans la pratique, on suppose souvent que c'est une longueur importante, conduisant à une plus petite recirculation, qui assure une bonne homogénéité. Mais n'existe-t-il pas des configurations pour lesquelles une petite longueur est acceptable ?

Les simulations de l'approche multiniveau permettent de déterminer l'efficacité de l'échangeur ε ainsi que la perte de charge de l'échangeur des côtés chaud et froid en fonction des trois paramètres de la forme locale des *ribs* et de la longueur du diffuseur.

Le problème d'optimisation est formulé comme :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^4} & -\varepsilon(\mathbf{p}) & (6.20) \\ \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^4} & \Delta P_{ech}(\mathbf{p}) & (6.21) \\ \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (6.22) \\ & e/2H \in [0.0375; 0.45] & (6.23) \\ & \tilde{E} \in [0; 1] & (6.24) \\ & L_D/H_{in} \in [2; 5] & (6.25) \end{array} \right.$$

avec le vecteur de paramètres $\mathbf{p} = (h_{rib}, e, \tilde{E}, L_D) \in \mathbb{R}^4$. L'objectif de perte de charge ΔP_{ech} est la somme de la perte de charge côté chaud ΔP_h , qui varie avec \mathbf{p} , et de la perte de charge coté froid ΔP_c , qui est constante :

$$\Delta P_{ech}(\mathbf{p}) = \Delta P_h(\mathbf{p}) + \Delta P_c \quad (6.26)$$

Le simulateur permettant d'obtenir la valeur des objectifs pour un jeu de paramètres étant très coûteux⁵, il n'est pas envisageable de l'utiliser directement en tant que carburant pour l'optimisation. Ainsi, comme présenté Chapitre 3, la résolution est constituée de deux étapes, illustrées sur la Figure 6.11. La première consiste à construire les métamodèles (carburant raffiné) pour chaque objectif. Pour cela, une stratégie d'enrichissement reposant sur plusieurs critères est utilisée. La seconde étape consiste à résoudre le problème d'optimisation en alimentant l'algorithme génétique grâce aux métamodèles.

6.4.2 Construction des métamodèles

Afin de construire un métamodèle précis avec un nombre limité de simulations et de s'affranchir des possibles optima biaisés (voir Section 3.3.5), la première étape du processus d'optimisation utilise une stratégie d'enrichissement.

5. Une simulation de la configuration ECH-3D réalisée en parallèle sur 80 processeurs met en moyenne une cinquantaine d'heures pour atteindre le régime permanent.

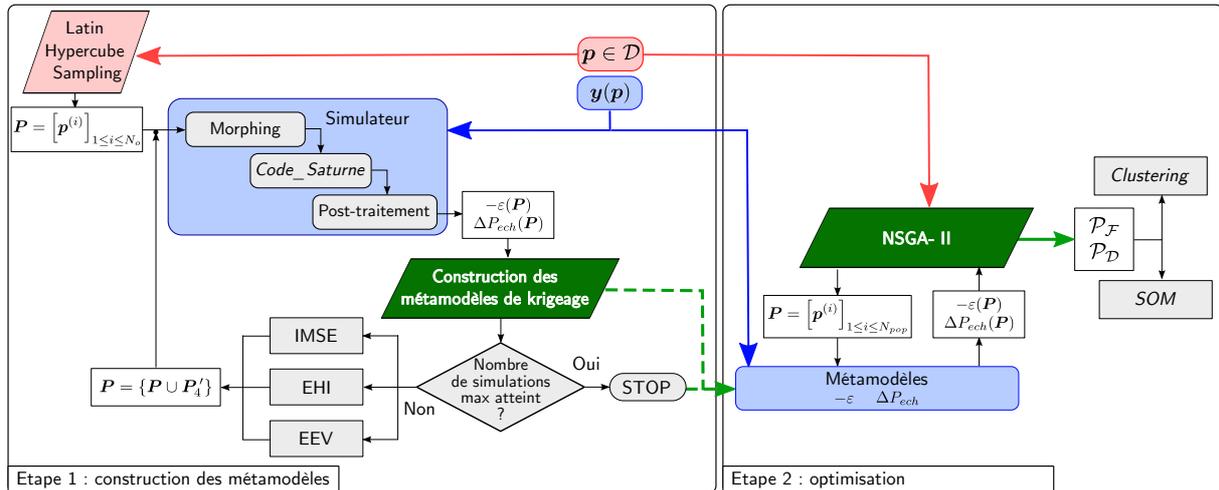


Figure 6.11 – Représentation schématique de la procédure de résolution du problème d’optimisation ECH-3D.

6.4.2.1 Stratégie d’enrichissement

L’algorithme d’enrichissement, présenté par l’étape 1 de la Figure 6.11, repose sur trois critères d’exploration et d’exploitation. Leur combinaison permet de tirer profit de leurs avantages respectifs.

Le premier critère est le critère d’exploration IMSE. Pour chacun des deux métamodèles, l’observation dont l’ajout au plan d’expériences va réduire l’incertitude intégrée de la prédiction, est déterminée. Cela améliorer la qualité de prédiction moyenne du métamodèle. Ce critère donne une estimation moins locale de l’incertitude que la MMSE et a donc moins tendance à rajouter les observations aux frontières du domaine (voir Section 3.3.5). Son utilisation permet d’améliorer la qualité de la prédiction de chacun des métamodèles de manière indépendante.

Dans le cadre de cette étude, les métamodèles sont construits afin de servir de carburant à un moteur d’optimisation bi-objectif. Ainsi, des critères d’exploitation multiobjectifs sont utilisés. Ils visent à enrichir le plan d’expériences d’observations susceptibles d’améliorer la description du front de Pareto. Le deuxième critère utilisé repose sur la maximisation de l’amélioration espérée de l’hypervolume (EHI) et le troisième, sur le volume espéré d’excursion (EEV). Le point de référence pour le calcul de l’hypervolume est pris proche des valeurs maximales de variation des objectifs obtenues pour l’optimisation de la Section 6.3. Il est caractérisé par une valeur d’efficacité nulle et une valeur de perte de charge de 4 000 Pa, soit $\mathbf{y}^{ref} = (0, 4\ 000)$. Ces critères sont présentés Section 3.3.5 et leur formulation est détaillée dans l’Annexe D.3.3.

L’algorithme débute par la création d’un plan d’expériences \mathbf{P} par LHS optimisé grâce à l’algorithme ESE et au critère de discrédance (voir Section 3.3.2.2). Les observations de \mathbf{P} sont évaluées par le simulateur (configuré selon la mise en données présentée dans la Section 4.5). Les métamodèles sont ensuite construits et les valeurs des critères d’enrichissement calculées. Bien que les observations issues du critère IMSE soient rattachées à un métamodèle précis, elles sont utilisées pour enrichir simultanément les deux métamodèles afin de profiter de chaque simulation coûteuse. A chaque itération $N_o = 4$ observations (\mathbf{P}'_4) sont obtenues grâce aux différents critères : deux par l’IMSE, une par EHI et la dernière par EEV. Contrairement à la construction des métamodèles des corrélations

Noyau de covariance	Maximisation de la vraisemblance	Effet de pépité	Tendance
Matérn $\nu = 5/2$	GENOUD (Mebane Jr et al., 2011) Pop. = 500 Max. gen. = 15	Désactivé	Constante

Tableau 6.4 – Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage.

TWOSIDE, l'arrêt de l'algorithme d'enrichissement ne repose pas sur des informations relatives aux critères d'enrichissement, mais sur un nombre de simulations maximales. Cela place la présente étude dans les conditions d'une étude industrielle, qui est limitée à la fois en temps et en ressources numériques⁶.

6.4.2.2 Options de construction

Les options de construction des métamodèles sont résumées dans le Tableau 6.4. Le noyau de covariance Matérn $\nu = 5/2$ est utilisé pour assurer la stabilité de l'estimation des paramètres du krigeage. La répétabilité de cette estimation est assurée par l'emploi de l'algorithme GENOUD pour maximiser la vraisemblance. L'effet de pépité n'a pas été activé du fait du faible nombre d'observations. Une tendance constante est utilisée car aucune pré-supposition sur la variation des réponses n'est faite.

A chaque itération de l'algorithme d'enrichissement, tous les paramètres du krigeage sont ré-estimés (paramètres de portées, variance et coefficient de la tendance).

6.4.3 Analyse des résultats

La construction du métamodèle commence avec un plan d'expériences composé de 40 observations. Cependant, suite à des problèmes numériques lors des simulations, seulement 37 observations ont été utilisées. La limite maximale de simulations a été fixée à 80. Cela revient à construire un métamodèle sur la base de 20 observations par paramètre.

L'enrichissement a été réalisé durant 12 itérations, ajoutant 4 observations à chaque fois. Après avoir retiré les simulations n'ayant pas convergé, un total de 76 observations est utilisé, ce qui correspond à environ deux mois de simulation sur un ordinateur interne et 360 processeurs accessibles.

6.4.3.1 Convergence et qualité des métamodèles

Les valeurs des trois critères (IMSE, EHI et EEV) utilisés se prêtent difficilement à un suivi de la convergence de l'enrichissement des métamodèles. Trois indicateurs ont donc été préférés.

Le premier est la valeur de l'hypervolume couvert par les observations non-dominées du plan d'expériences. Cet indicateur est principalement lié aux critères d'exploitation multiobjectifs (EHI et EEV). En effet, lorsque sa valeur se stabilise, la proportion du front de Pareto découverte par les nouvelles observations devient (quasiment) nulle. Ainsi, il est raisonnable de considérer que les observations du plan d'expériences décrivent le front de Pareto et que les métamodèles fournissent une prédiction précise des réponses autour de ce front (Picheny, 2015).

Les deux autres indicateurs sont associés au critère d'exploration IMSE. Il s'agit du coefficient de corrélation quadratique (Q^2) et de l'erreur quadratique moyenne relative

6. Par exemple, suite à la location d'un certain nombre d'heures sur un ordinateur de production.

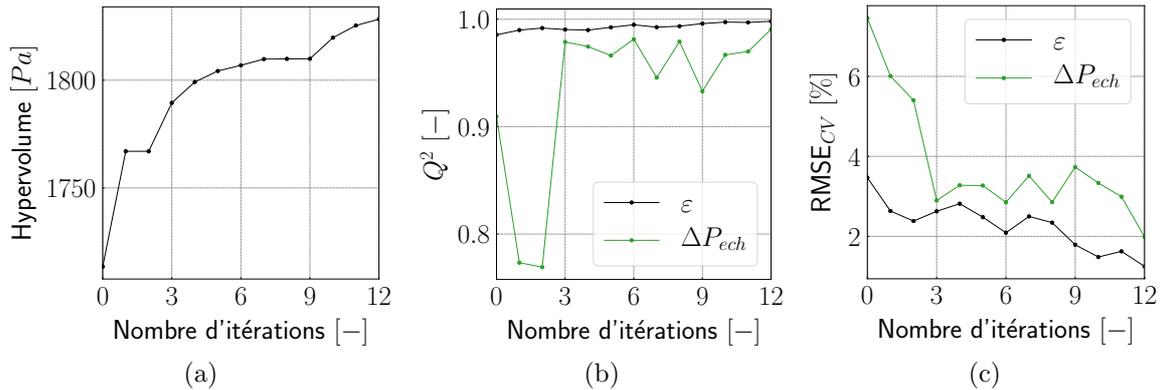


Figure 6.12 – Évolution des indicateurs de convergence de l'enrichissement en fonction du nombre d'itérations (l'itération 0 correspond au plan LHS).

de *cross-validation* ($RMSE_{CV}$). Ils permettent de vérifier, au cours de l'enrichissement la bonne qualité de la prédiction.

L'évolution de ces trois indicateurs au cours de la procédure d'enrichissement est visible sur la Figure 6.12. On remarque que la valeur de l'hypervolume des observations non-dominées croît au fil des itérations. Après une stabilisation des itérations 7 à 9, cet indicateur ré-augmente. Cela est dû à la découverte d'une nouvelle partie du front de Pareto par le critère EEV à l'itération 10. Au moment de l'arrêt de l'enrichissement, il semble que la valeur tende à se stabiliser à nouveau, mais la nouvelle partie du front n'est pas encore tout à fait bien décrite. L'évolution des indicateurs de la qualité de la prédiction indique une forte sensibilité du métamodèle de ΔP_{ech} aux nouvelles observations. Cela peut également provenir d'un biais introduit par la *cross-validation*. En effet, la découverte d'une nouvelle partie du front implique l'exploration d'une nouvelle zone de l'espace des paramètres. Lors de la *cross-validation*, il est possible que ces nouvelles observations ne fassent pas partie des 9 ensembles de construction et que leur prédiction soit erronée. À la douzième itération et pour chaque métamodèle, les valeurs de Q^2 sont proches de l'unité et celles de $RMSE_{CV}$ sont inférieures à 2%.

Afin d'analyser l'apport de chacun des critères d'enrichissement, les 76 observations obtenues sont représentées dans l'espace des objectifs sur la Figure 6.13(a). Elles sont distinguées en fonction des critères ayant conduit à leur ajout au plan d'expériences. Les observations non-dominées sont indiquées par des croix noires.

Les observations initiales (en gris), obtenues par LHS, assurent un "remplissage" optimal de l'espace des paramètres qui se traduit par une dispersion des observations dans l'espace des objectifs. Le critère IMSE conduit lui aussi, de part sa nature exploratoire, à une bonne dispersion des observations dans les espaces des objectifs (en vert). Ce critère permet également de "remplir" les zones peu échantillonnées de l'espace des objectifs, comme c'est le cas pour les valeurs d'efficacité ε inférieures à -0.5 sur la Figure 6.13(a).

Une grande différence de comportement est visible concernant les deux critères d'exploitation. Les observations obtenues grâce au critère EHI (en rouge) se concentrent autour de $\varepsilon = -0.28$ et $\Delta P_{ech} = 250$ Pa, alors que celles issues du critère EEV (en bleu) sont plus réparties. Ce comportement est typique de la sensibilité du critère EHI à la différence d'échelle entre les objectifs (voir Section 3.3.5). En effet, la courbe de niveaux associée à la

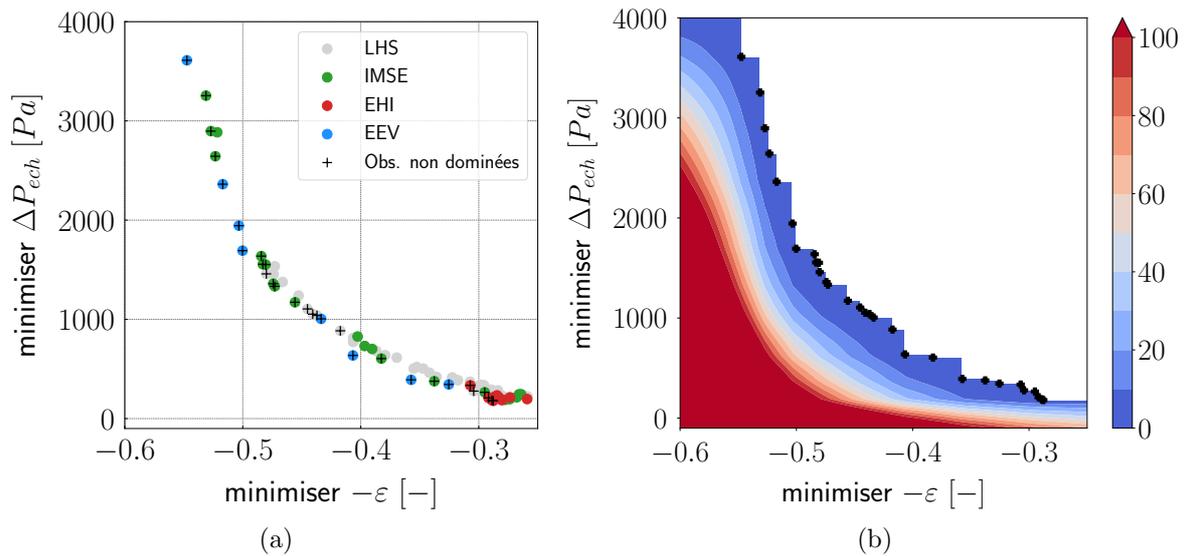


Figure 6.13 – Résultats de l'enrichissement - (a) Observations dans l'espace des objectifs pour chaque critère - (b) Contour de la fonction d'amélioration de l'hypervolume \mathcal{I}_H , les observations non-dominées apparaissant en noir.

fonction d'amélioration de l'hypervolume⁷, illustrée sur la Figure 6.13(b), indique que le critère tend à privilégier la zone inférieure droite de l'espace des objectifs. Cette zone est jugée plus opportune, au sens de la fonction, car ses valeurs et ses gradients sont plus importants. L'importante différence d'échelles entre les objectifs rend, dans ce cas, le critère EHI peu efficace dans la recherche de nouvelles observations. Au contraire, le critère EEV, qui n'est pas sensible à cette différence, permet d'ajouter au plan d'expériences des observations importantes pour la minimisation de $-\varepsilon$. La partie gauche de l'espace des objectifs ($-\varepsilon \leq -0.5$) reste relativement peu observée par rapport la partie droite ($-\varepsilon \geq -0.5$), ce qui tend à confirmer que l'enrichissement n'est pas achevé après 12 itérations.

6.4.3.2 Métamodélisation de la distribution pour l'analyse

Afin de pouvoir également analyser l'influence de la forme locale et de la longueur du diffuseur sur la distribution des débits, les valeurs de l'écart-type de la distribution Υ , obtenues pour chaque observation du plan d'expériences, sont utilisées pour construire un métamodèle. Les options de construction sont résumées dans le Tableau 6.4. Les indicateurs de qualité concluent à un métamodèle précis ($Q^2 = 0.987$, $RMSE_{CV} = 3\%$ et $MAE_{CV} = 2\%$).

L'analyse des variations du métamodèle, visible sur la Figure 6.14, met en évidence une forte dépendance de Υ à la hauteur du *rib* et à la longueur du diffuseur. En effet, L_D va impacter la taille de la recirculation et ainsi l'accessibilité du fluide à certains canaux. La hauteur h_{rib} influence les pertes de charge à l'intérieur des canaux et, par équilibrage des pertes, va impacter la distribution des débits. Elle est en revanche plus faible pour les deux autres paramètres ($e/2H$ et \tilde{E}).

7. on rappelle que le point de référence est $\mathbf{y}^{ref} = (0, 4\ 000)$

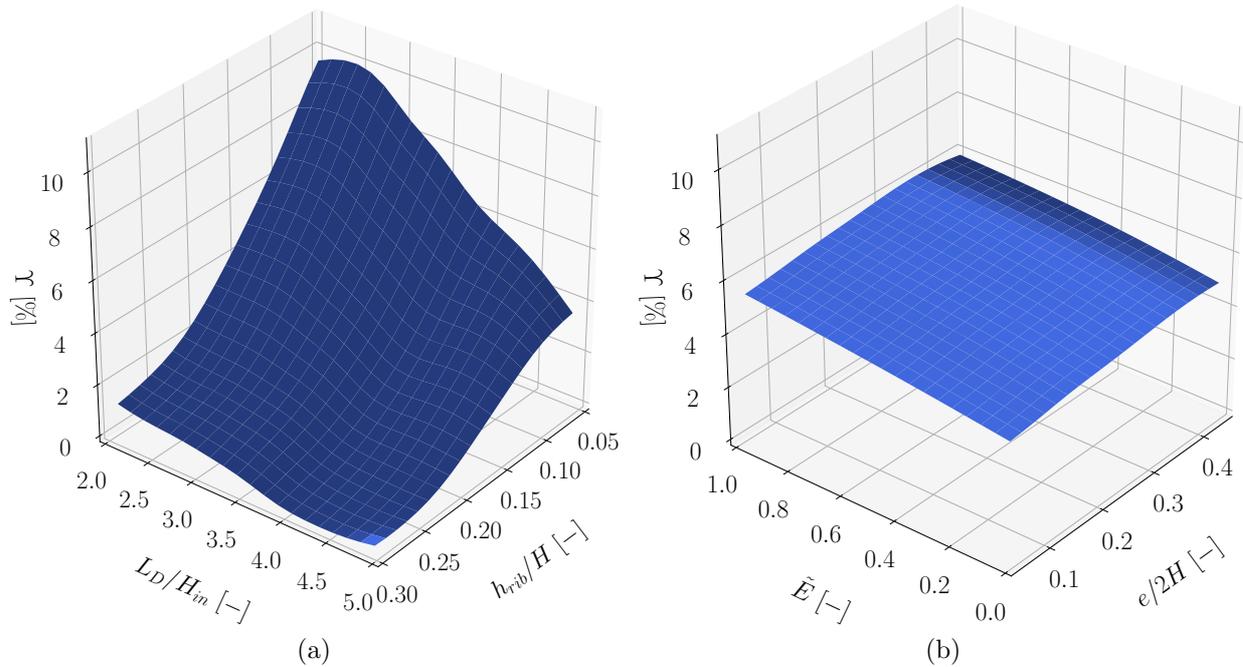


Figure 6.14 – Visualisation en perspective de la surface de réponse de l'écart-type de la distribution - (a) en fonction de la hauteur du *rib* et de la longueur du diffuseur ($e/2H = 0.1$ et $\tilde{E} = 0$) - (b) en fonction des largeurs en tête et en pied ($h_{rib}/H = 0.15$ et $L_D = 2$).

Centre	Paramètres				Objectifs			Écart métamodèle/simulation [%]			
	h_{rib}/H	$e/2H$	$E/2H$	L_D/H_{in}	$-\varepsilon$ [-]	ΔP_{ech} [Pa]	Υ [%]	$-\varepsilon$	ΔP_{ech}	Moyenne	Écart-type
◇	0.1219	0.2014	0.1836	4.2195	-0.32	331	3.5	0.5	10	$-\varepsilon$	
◇	0.2072	0.0666	0.5244	4.5664	-0.376	473	1.8	0.63	5.9	0.88	0.75
○	0.2678	0.1028	0.5244	2.0000	-0.46	1108	2.6	1.0	0.9		
□	0.2999	0.1612	0.3836	2.0000	-0.52	2220	1.8	0.24	5.5	ΔP_{ech}	
△	0.2778	0.0534	0.0481	4.5098	-0.54	3516	0.1	2.3	6.7	5.9	3.0

Tableau 6.5 – Paramètres, performances issues de la simulation et écart relatif en pourcent de la prédiction de la moyenne de krigeage par rapport à la valeur issue de la CFD, pour les cinq centres de groupes.

6.4.3.3 Résultats de l'optimisation

L'optimisation est réalisée grâce à une population de 900 individus sur 200 générations. La distribution des individus dans les cinq classes pour le paramètre $e/2H$ est visible sur la Figure 6.15(a). Il s'agit du paramètre pour lequel la distribution fluctue le plus. Toutefois, elle semble se stabiliser autour d'une valeur moyenne. Les intervalles de confiance à 95% sont inférieurs à 5% de la valeur moyenne. La solution de l'optimisation est considérée convergée.

Les résultats de l'optimisation dans l'espace des objectifs sont illustrés Figure 6.15(b). Le front de Pareto (en gris) est proche des observations non-dominées du plan d'expériences (en rouge). Le *clustering* des individus de ce front, en fonction des paramètres de forme, a mis en évidence cinq formes distinctes. Les performances, prédites par les métamodèles, sont indiquées sur le front par les symboles vides. Les symboles pleins identifient les per-

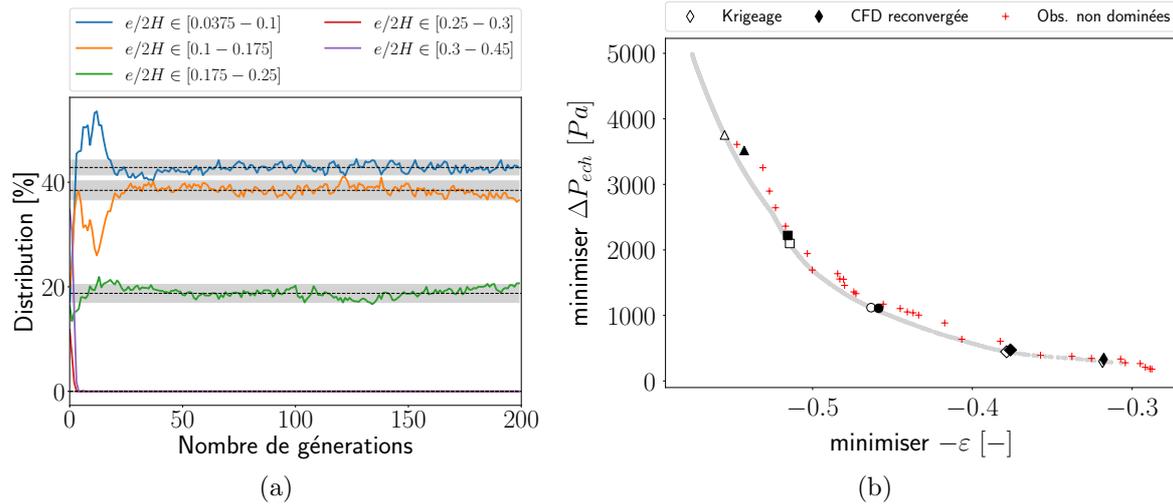


Figure 6.15 – Résultats de l’optimisation de la configuration ECH-3D - (a) Évolution de la distribution des individus de l’ensemble de Pareto dans cinq classes en fonction du nombre de générations pour le paramètre $e/2H$ - (b) Front de Pareto avec les performances des cinq centres de groupe mis en évidence (en symboles vides les prédictions des métamodèles, en symboles pleins les simulations de qualification). Les observations non-dominées du plan d’expériences apparaissent en rouge.

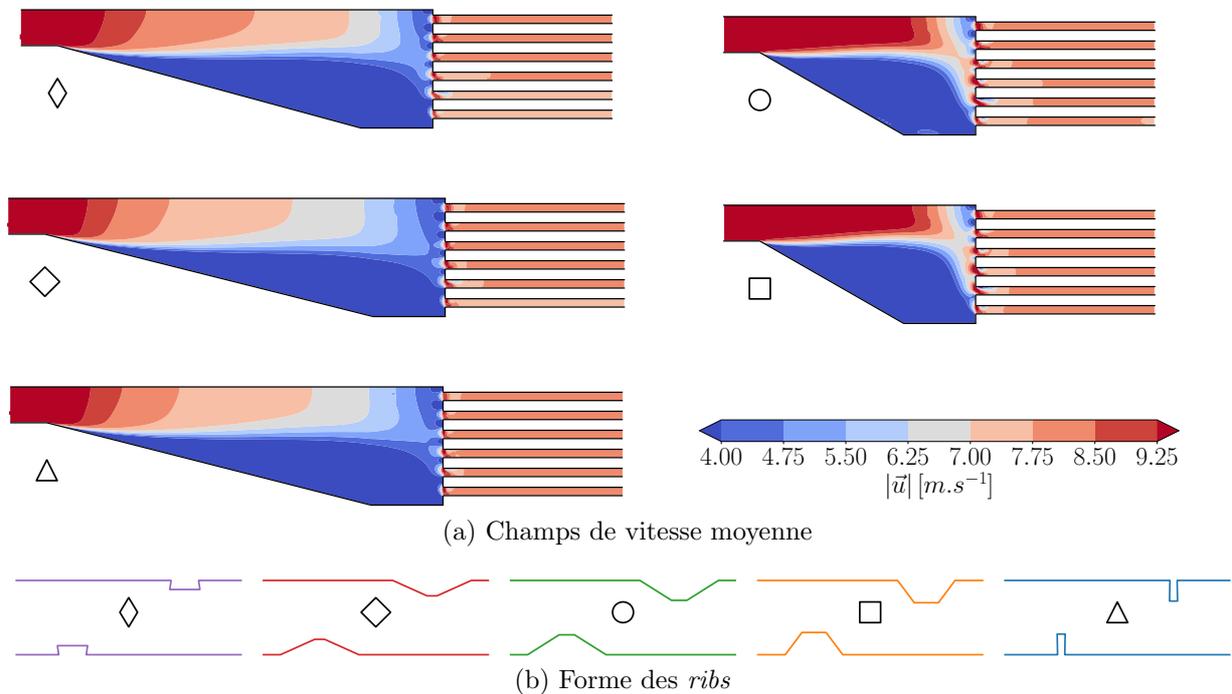


Figure 6.16 – Illustration des cinq formes optimales de la configuration ECH-3D obtenues grâce par *clustering* - (a) représentation des champs de vitesse moyenne - (b) forme des ribs colorées en fonction du groupe.

performances de ces mêmes formes obtenues grâce à des simulations de qualification. Les écarts entre les prédictions des métamodèles et les simulations, ainsi que les paramètres de formes des centres et les performances sont résumés dans le Tableau 6.5. Les écarts sont faibles pour l’efficacité avec une valeur moyenne inférieure à 1%. La valeur maximale est

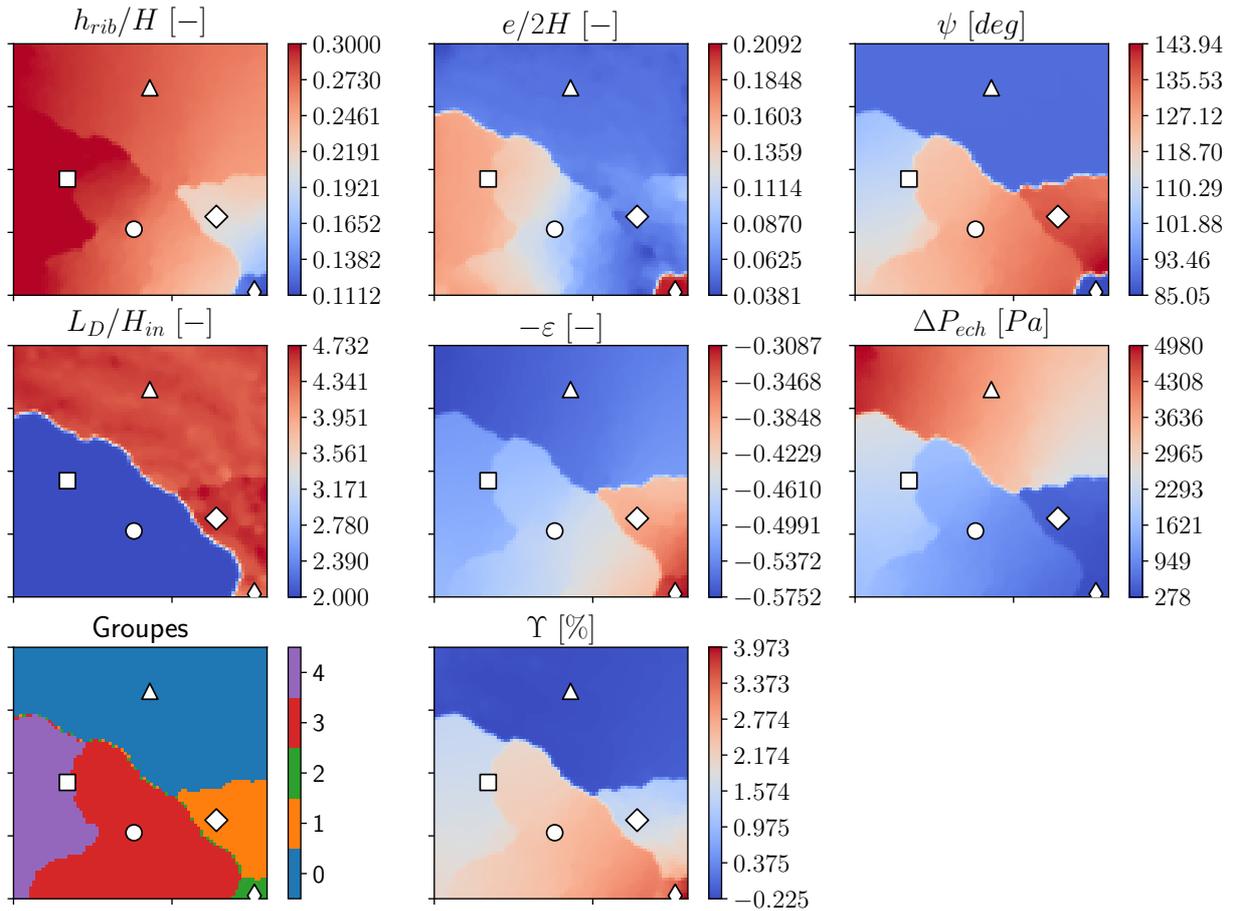


Figure 6.17 – SOM des résultats de l’optimisation de la configuration ECH-3D : en haut, les trois paramètres de la forme locale ; au milieu, le paramètre de longueur du diffuseur et les deux objectifs ; en bas, les groupes et l’écart-type de la distribution dans les canaux.

atteinte pour la forme Δ . Comme le montre la répartition des observations dans l’espace des objectifs de la Figure 6.15(b), il s’agit d’une partie de l’espace très peu observée. De fait, la prédiction donnée par les deux métamodèles est extrapolée et donc entachée d’une certaine erreur. L’écart est plus important pour la perte de charge avec une moyenne de 6%. Cela est vraisemblablement dû à l’importante amplitude de variation de cet objectif.

Les cinq formes optimales obtenues grâce au *clustering* sont représentées sur la Figure 6.16. La Figure 6.16(a) montre la longueur du diffuseur et le champ de vitesse moyenne. Les recirculations sont mises en évidence par les zones de faible vitesse (en bleu). La Figure 6.16(b) illustre la forme des *ribs*, colorée différemment en fonction des groupes.

Les SOM, visibles sur la Figure 6.17, mettent en évidence le comportement conjoint des paramètres et des objectifs. Les cinq groupes et la valeur de l’écart-type de distribution du débit sont également représentés. Le paramètre le plus influent sur les performances de l’échangeur (ε et ΔP_{ech}) est la hauteur du *rib*. Lorsqu’elle est importante, correspondant aux centres Δ , \square et \circ , l’efficacité l’est également (valeurs minimales de $-\varepsilon$) tout comme la perte de charge. La transition visible sur les SOM entre le groupe bleu (Δ) et les groupes violet et rouge (\square et \circ), correspond à un changement de longueur du diffuseur L_D/H_{in} . Elle passe d’une valeur maximale à la valeur minimale de sa plage de variation. Une seconde transition entre ces trois groupes est également visible lorsque l’angle ψ augmente, passant de moins de 90 deg pour le groupe Δ à environ 120 deg pour le groupe

◦, comme le montre également la Figure 6.16(b). Les formes de la partie active conduisant aux pertes de charge les moins importantes sont marginalement différentes d'une plaque plane. En effet, le centre ◊ est caractérisé par une hauteur et une largeur en tête d'ailette ($e/2H$) faibles associées à un angle important, et le centre ◇ est défini par une hauteur et un angle minimaux, mais une largeur de *rib* importante, comme l'illustre la Figure 6.16(b). Dans les deux cas, la longueur du diffuseur est maximale.

L'écart-type de la distribution permet de déterminer si les différents canaux de l'échangeur sont alimentés avec la même quantité de fluide. En pratique, les ingénieurs tendent à privilégier des longueurs du diffuseur importantes en supposant que ce sont les géométries conduisant aux distributions les plus homogènes possibles. Les informations de la SOM de Υ semblent être accord avec cette hypothèse. En effet, pour le centre Δ , la longueur du diffuseur est maximale et la valeur de Υ est minimale. Il est à noter que cette valeur est négative à cause de l'extrapolation des métamodèles dans cette partie de l'espace des paramètres. La simulation de qualification donne une valeur faible (moins de 0.1%) qui permet de supposer que, même si le métamodèle n'est pas exact, la prédiction conserve les bonnes tendances. Le centre \square , dont les performances thermiques sont proches de celles du centre Δ , atteint une perte de charge moins importante pour un *rib* légèrement plus haut mais possédant un angle plus important. L'originalité de cette forme repose sur sa longueur de diffuseur qui est minimale mais qui conduit à une bonne distribution des débits⁸, allant à l'encontre des suppositions usuellement faites. Cela est vérifié par la Figure 6.16 qui montre que, malgré une recirculation importante, la vitesse moyenne dans chacun des canaux est sensiblement la même. Enfin, le centre ◊, caractérisé par une longueur L_D/H_{in} maximale et une hauteur réduite affiche la même valeur d'écart-type de la distribution que le centre \square . La Figure 6.16(a) met en évidence un petite recirculation mais la vitesse moyenne du premier canal (en bas) est plus faible que celle des autres. Ces résultats montrent clairement que la distribution dans les canaux est la conséquence de deux phénomènes : la recirculation dans le diffuseur et les pertes de charge dans la partie active. Même si la recirculation est importante (comme c'est le cas pour le centre \square), des pertes de charge importantes dans les canaux auront tendance à homogénéiser la distribution.

Si l'on compare les valeurs des performances obtenues pour cette configuration (Figure 6.15(b)) à celles de la configuration ECH-0D (Figure 6.8(a)), on remarque que les valeurs de l'efficacité sont presque réduites de moitié et que la perte de charge augmente légèrement (d'un facteur 1.2 environ).

Certaines hypothèses parmi celles exposées Section 2.2.2.1 sont appliquées pour les deux configurations (les hypothèses 1, 2, 4 et 6 notamment). Toutefois, un apport notable de l'approche multiniveau est qu'elle permet de prendre de compte la variation de la température dans le sens de l'écoulement et dans le sens transverse directement⁹. Ce phénomène, qui conduit à obtenir une variation de la puissance échangée en fonction de la position dans la partie active, est très important dans le cas des échangeurs à courants croisés. De plus, la conduction dans le sens de l'écoulement étant prise en compte, des variations de performances apparaissent. Enfin, dans certains cas, la différence de distribution entre les canaux réduit la puissance échangée. Ces considérations peuvent expliquer les différences entre les deux configurations.

Concernant ΔP_{ech} , la présence de la recirculation dans le diffuseur et les effets de sortie

8. La valeur de Υ est de 1.8% à comparer à la valeur maximale parmi les observations qui est de 11.8%.

9. c'est-à-dire sans passer par une relation ε -NUT, soumise à des hypothèses supplémentaires.

des canaux engendrent une augmentation de la perte de charge dans l'échangeur qui n'est pas prise en compte par la méthode ε -NUT décrite dans les présents travaux.

6.4.4 Conclusions

L'étude de la configuration ECH-3D démontre que la stratégie d'optimisation mise en œuvre dans les présents travaux permet d'optimiser efficacement un échangeur de chaleur dont les performances sont issues d'une simulation numérique complexe. Deux points peuvent être mis en évidence.

Le premier concerne la construction du métamodèle grâce à la stratégie d'enrichissement. L'utilisation conjointe de plusieurs critères permet de tirer parti des avantages de chacun afin de bâtir une prédiction la plus précise possible dans les zones d'intérêt. Dans ce cas là, il s'agissait de prédire correctement le voisinage du front de Pareto. Il faut toutefois bien faire attention aux différences d'échelle entre les objectifs lors de l'utilisation du critère EHI. De plus, une meilleure convergence de l'enrichissement, indiquée notamment par une stabilisation de la valeur d'hypervolume, permettrait d'éviter des prédictions faussées comme observées pour l'écart-type de la distribution.

Le second point concerne la capacité de l'approche multiniveau à rendre compte efficacement des couplages pouvant exister entre les échelles locale et globale. Cela s'illustre en partie par le comportement observé pour la distribution des débits entre les canaux. Des formes locales, qui entraînent des pertes de charge importantes, permettent d'utiliser des diffuseurs courts mais conduisant à une bonne distribution des débits.

6.5 Encrassement

Comme introduit dans le Chapitre 2, l'encrassement est un phénomène courant dans les échangeurs de chaleur, conduisant à une dégradation des performances thermohydrauliques. Dans les présents travaux, l'encrassement particulaire dans les EGR coolers est étudié. On se concentre sur le dépôt se formant sur le motif périodique décrit par la configuration TWOSIDE. Grâce au modèle présenté Section 4.3.5, l'évolution d'un dépôt ainsi que son influence sur l'écoulement et les transferts thermiques sont estimées par simulation numérique. Il est alors possible d'optimiser la géométrie pour réduire les effets de l'encrassement.

Les présents travaux proposent deux façons de considérer ce problème d'encrassement, avec deux approches dites **aux temps courts** et **aux temps longs**. Dans le premier cas, on cherche la forme qui va retarder au maximum l'apparition d'une couche encrassante sur le motif¹⁰. Dans la seconde approche, on cherche une forme qui, une fois encrassée, présentera la dégradation minimale des performances thermohydrauliques. On suppose atteindre un régime asymptotique sans colmatage. Ces deux formulations introduisent de nouveaux objectifs vraisemblablement concurrentiels vis à vis du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge.

A priori, il n'est pas possible de déterminer si ces deux formulations conduisent au même résultat optimal. La présente étude propose en partie de répondre à cette interrogation mais également d'étudier le comportement de la stratégie d'optimisation quand le nombre d'objectifs augmente et "tire" le résultat optimal dans d'autres directions.

10. Ceci est typiquement recherché lorsque l'apparition du dépôt conduit à l'arrêt d'une installation pour nettoyer l'échangeur et que l'on souhaite retarder et réduire ces opérations de maintenance.

Noyau de covariance	Maximisation de la vraisemblance	Effet de pépité	Tendance
Matérn $\nu = 5/2$	GENOUD (Mebane Jr et al., 2011) Pop. = 500 Max. gen. = 15	Estimation	Constante

Tableau 6.6 – Options utilisées pour la construction des métamodèles de krigeage.

6.5.1 Temps courts

La notion de temps courts se réfère à l'apparition d'un dépôt sur une surface initialement "propre". Elle peut être quantifiée par l'introduction d'une vitesse initiale d'encrassement, définie comme :

$$u_e = \frac{J_{dep} - J_{arr}}{\rho_p} \quad (6.27)$$

Cette vitesse est normalisée par une vitesse de référence $u_{e0} = 1 \cdot 10^{-9} \text{ m.s}^{-1}$. Elle dépend donc des débits surfaciques de dépôt (J_{dep}) et d'arrachement (J_{arr}) ainsi que de la masse volumique de la particule encrassante (ρ_p) et présente l'avantage d'être instantanée. De plus, il est possible d'obtenir cette grandeur sans coût (numérique) supplémentaire. En effet, elle s'extrait des champs physiques obtenus grâce à une simulation de l'état propre. Une forme donnée s'encrassera d'autant moins que cette vitesse est réduite.

Les objectifs à minimiser sont donc l'opposé du nombre de Nusselt normalisé, le coefficient de perte de charge normalisé et la vitesse d'encrassement. Le problème d'optimisation à trois objectifs et trois paramètres est donc formulé par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} \quad -Nu(\mathbf{p})/Nu_0 \end{array} \right. \quad (6.28)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} \quad C_f(\mathbf{p})/C_{f0} \end{array} \right. \quad (6.29)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} \quad u_e(\mathbf{p})/u_{e0} \end{array} \right. \quad (6.30)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{sachant} \quad h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] \end{array} \right. \quad (6.31)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \quad \quad e/2H \in [0.0375; 0.45] \end{array} \right. \quad (6.32)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \quad \quad \tilde{E} \in [0; 1] \end{array} \right. \quad (6.33)$$

Le nombre de Reynolds est fixé à 8 000.

6.5.1.1 Métamodélisation

La résolution de ce problème d'optimisation repose sur les métamodèles de chacun des objectifs. Ceux du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge sont obtenus suite à l'étude présentée Section 6.2. On rappelle que ces deux métamodèles ont été construits à partir de plans d'expériences différents.

Afin de capitaliser au maximum sur les informations déjà accessibles et d'éviter de réaliser de nouvelles simulations coûteuses, le métamodèle de la vitesse d'encrassement est construit sur la base de toutes les observations des deux plans d'expériences précédents. Après suppression des doublons, cela porte le nombre total d'observations à 150. Les options de construction du métamodèle sont résumées dans le Tableau 6.6.

La réponse du simulateur pour la vitesse d'encrassement semble irrégulière. Comme l'illustrent les Figures 6.18(a) et 6.18(c), la surface de réponse obtenue est très bruitée. Ce comportement est vraisemblablement induit par le modèle permettant d'obtenir le débit

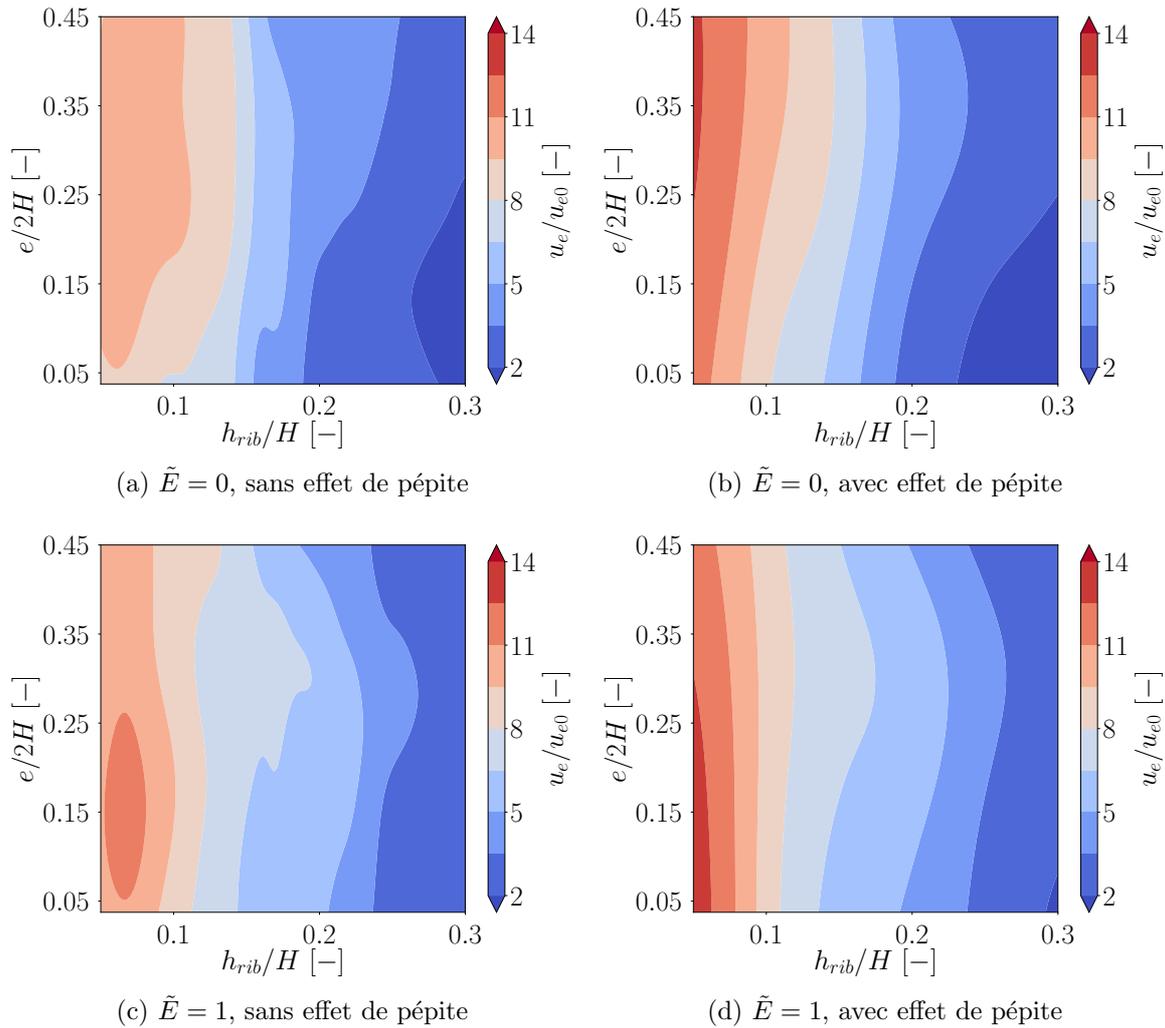


Figure 6.18 – Courbes de niveaux des surfaces de réponse pour deux valeurs de \tilde{E} (zéro en haut et l’unité en bas), avec(à droite) et sans (à gauche) ajout d’un effet de pépite.

surfaccie d’arrachement J_{arr} . En effet, celui-ci repose sur une inégalité introduisant un comportement binaire du phénomène : une légère variation de la vitesse peut faire basculer l’équilibre des forces et conduire à un arrachement du dépôt. L’ajout d’un effet de pépite permet alors de lisser cette variabilité du modèle en augmentant la valeur des paramètres de portée (comme abordé Section 5.4.3.3), comme l’illustrent les courbes de niveaux des Figures 6.18(b) et 6.18(d). La valeur de la variance τ^2 de l’effet de pépite, normalisée par l’amplitude de variation des observations de u_e , est de l’ordre de 0.86%. Ceci est relativement élevé par rapport aux autres applications abordées dans les présents travaux.

On s’attend donc à ce que la capacité de prédiction de ce métamodèle soit plus faible que celle des autres études. Ceci est confirmé par les résultats d’une *cross-validation* à 10 sous-ensembles. La valeur du coefficient de corrélation quadratique est $Q^2 = 0.97$, correspondant aux valeurs obtenues pour les métamodèles du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge. Cependant, les valeurs de $RMSE_{CV}$ et MAE_{CV} relatives sont respectivement de 4% et 3%, ce qui est légèrement plus important que pour $-Nu/Nu_0$ et C_f/C_{f0} (voir Section 6.2.2).

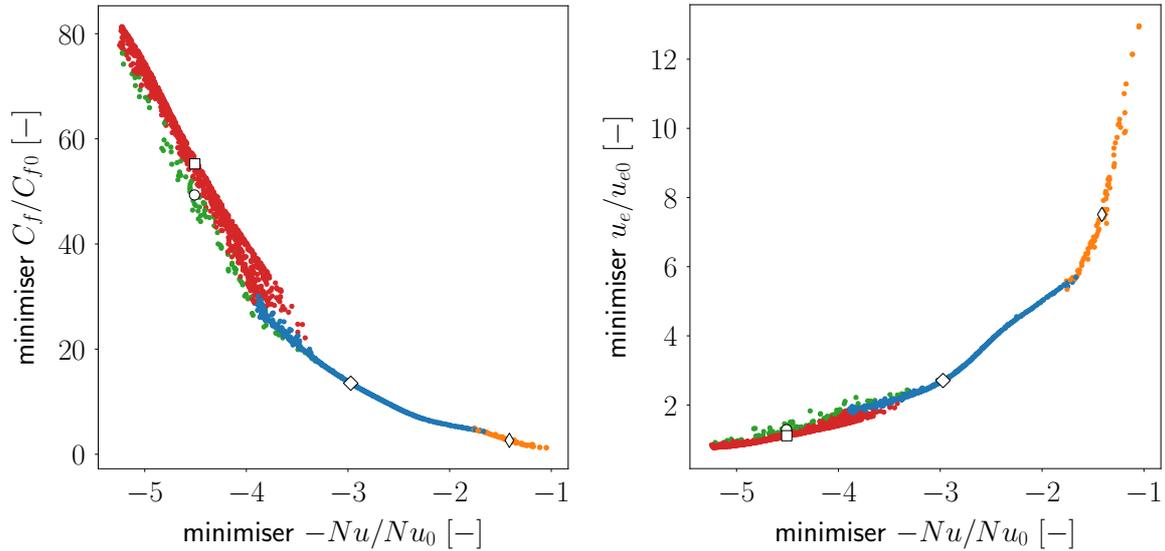
(a) Projection sur le plan $(-Nu/Nu_0, C_f/C_{f0})$ (b) Projection sur le plan $(-Nu/Nu_0, u_e)$

Figure 6.19 – Front de Pareto pour l’optimisation du problème d’encrassement aux temps courts. Les individus sont colorés en fonction de leur groupe, et les performances des centres de groupes, prédites par les métamodèles, sont indiquées par les symboles vides.

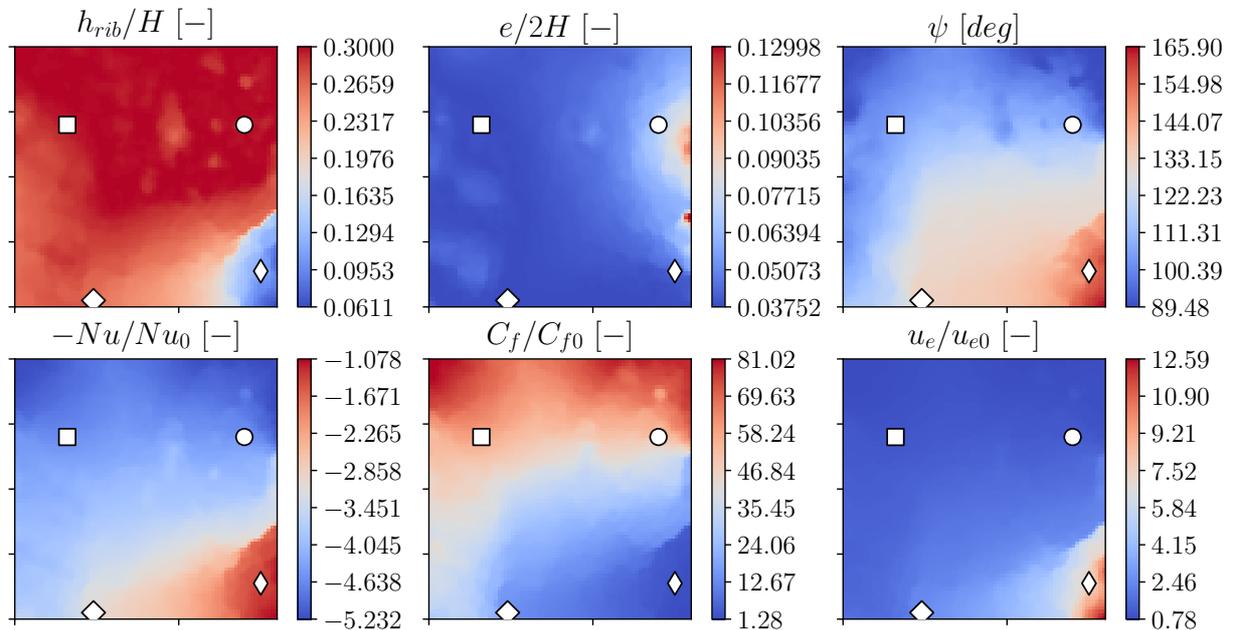


Figure 6.20 – *Self-Organizing Maps* des individus optimaux du problème d’optimisation de l’encrassement aux temps courts. Les trois paramètres sont en haut et les trois objectifs en bas.

6.5.1.2 Résultats de l’optimisation

La recherche de solutions optimales est effectuée par l’algorithme NSGA-II avec une population de 1200 individus sur 200 générations. La population (front et ensemble de Pareto) se stabilise autour de la génération 100 et les générations 150 à 200 sont utilisées pour analyser les résultats (*clustering* et SOM).

Le front de Pareto est visible sur la Figure 6.19. Il est projeté sur deux des trois plans

de l'espace des objectifs. La projection sur le plan $(-Nu/Nu_0, C_f/C_{f0})$ met en évidence un front proche de celui obtenu lors de l'optimisation de l'intensificateur (voir Section 6.2.4). L'introduction du troisième objectif se traduit par une dispersion des individus pour des valeurs de $-Nu/Nu_0$ inférieures à -3.5 . La projection sur le plan $(-Nu/Nu_0, u_e)$ montre que minimiser l'opposé du nombre de Nusselt revient à minimiser la vitesse d'encrassement.

Les groupes vert et rouge, caractérisés par les centres \circ et \square , illustrent bien cette dispersion. En effet, les deux centres ont des valeurs du nombre de Nusselt similaire mais un coefficient de perte de charge différent. Il est plus important pour le centre \square , ce qui se traduit par une vitesse d'encrassement plus faible.

Les SOM, visibles sur la Figure 6.20, mettent en évidence plusieurs caractéristiques de la population optimale. La similarité du comportement du nombre de Nusselt et de la vitesse d'encrassement est clairement visible, tout comme l'antagonisme de l'évolution du coefficient de perte de charge. Deux paramètres apparaissent comme peu discriminants. En effet, plus de 80% des individus sont caractérisés par une hauteur maximale et la carte de $e/2H$ indique que la quasi totalité des individus ont une largeur minimale. On peut toutefois noter que cette largeur pour le centre \circ est légèrement supérieure à celle du centre \square . Cela explique la différence mise en évidence sur le front de Pareto. La variation du nombre de Nusselt et du coefficient de perte de charge est aussi fortement corrélée à la variation de l'angle ψ . Un angle minimal (\square et \circ), correspondant à un *rib* rectangulaire haut et étroit, induit un transfert maximal et une perte de charge maximale. *A contrario*, un angle important (\diamond) permet d'atteindre des pertes de charge faibles mais au prix d'une dégradation du transfert thermique. On peut noter qu'une hauteur de *rib* minimale (\diamond) conduit à la plus petite perte de charge. L'analyse conjointe de la carte u_e et de la carte ψ met en évidence la corrélation entre ces deux grandeurs.

Il apparaît donc que l'introduction de l'objectif visant à limiter l'apparition d'un dépôt conduise à des *ribs* caractérisés par une hauteur importante, une largeur en tête minimale et une valeur d'angle la plus faible possible. Ces formes sont celles qui génèrent d'importantes recirculations. Cela maximise le transfert thermique entre le solide et le fluide et homogénéise la température du fluide. Ainsi la différence entre la température débitante du fluide et la température de l'interface fluide/solide est réduite, ce qui entraîne une diminution du terme de thermophorèse du modèle d'encrassement. De plus, l'augmentation des recirculations et la réduction de la section de passage localement augmentent la probabilité qu'un arrachement ait lieu.

6.5.2 Temps longs

La notion de temps longs se réfère à un état pour lequel l'encrassement au sein de l'échangeur atteint un régime asymptotique. Ce phénomène est souvent observé et rapporté dans la littérature (Abarham et al., 2010; Han et al., 2015). Dans la pratique, il serait concevable de considérer qu'une fois ce régime atteint, on souhaite que l'échangeur soit capable de transférer une certaine proportion de l'énergie thermique à perte de charge raisonnable.

Pour la configuration TWOSIDE étudiée, le temps long a été fixée à 40 heures, pour deux raisons principales. Tout d'abord, les simulations ont montré que passée cette valeur, la variation du nombre de Nusselt est inférieure à 5% en moyenne. Ensuite, pour certaines formes, le modèle utilisé dans les présents travaux (voir Section 4.3.5) ne permet plus de prendre en compte l'accroissement du dépôt après 40 heures car la méthode de déformation

du maillage conduit à des cellules à volume négatif.

D'un point de vue optimisation, la prise en compte de l'encrassement aux temps longs peut se traduire par un problème à quatre objectifs, visant à optimiser les performances (Nu/Nu_0 et C_f/C_{f0}) à l'état propre et à l'état encrassé simultanément. Cela permet d'obtenir une "hypersurface" de compromis. Formellement, le problème s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & -Nu(\mathbf{p}, 0)/Nu_0 \end{array} \right. \quad (6.34)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & C_f(\mathbf{p}, 0)/C_{f0} \end{array} \right. \quad (6.35)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & -Nu(\mathbf{p}, 40)/Nu_0 \end{array} \right. \quad (6.36)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & C_f(\mathbf{p}, 40)/C_{f0} \end{array} \right. \quad (6.37)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] \end{array} \right. \quad (6.38)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} & e/2H \in [0.0375; 0.45] \end{array} \right. \quad (6.39)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} & \tilde{E} \in [0; 1] \end{array} \right. \quad (6.40)$$

avec un nombre de Reynolds fixé à 8 000. Les deux premiers objectifs se rapportent à l'état propre et les deux suivants à l'état encrassé à 40 heures.

6.5.2.1 Métamodélisation

Comme pour l'approche aux temps courts, la construction des métamodèles cherche à capitaliser sur les informations déjà disponibles, issues de l'étape de construction des corrélations (voir Section 6.2). Afin de prendre en compte l'évolution des performances causée par l'encrassement, un nouveau paramètre temporel a été introduit. Ainsi, les métamodèles approchent la réponse du simulateur en fonction des paramètres de forme, du nombre de Reynolds et du temps. Comme pour l'élaboration des corrélations, un plan d'expériences par objectif ($-Nu/Nu_0$ et C_f/C_{f0}) est utilisé.

Pour chaque observation, représentant un état propre, et issue de chacun des deux plans d'expériences élaborés dans la Section 6.2, l'encrassement a été simulé sur 40 heures avec un pas de temps de 10 heures. Après élimination des simulations n'ayant pas convergé¹¹, les plans d'expériences sont respectivement constitués de 231 et 497 observations pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge.

L'ajout du nouveau paramètre étant réalisé *a posteriori* des études précédentes, il convient de s'assurer que cela ne change pas (ou marginalement) la prédiction des métamodèles pour l'état propre (correspondant à $t = 0$ h). Les options de construction restent inchangées et sont résumées dans le Tableau 6.1. Pour cela, les bornes de variation des paramètres de portée¹², relatifs aux paramètres de forme et au nombre Reynolds, ont été modifiées. Cela permet aux valeurs de ces paramètres de rester proches de celles obtenues pour les métamodèles de la Section 6.2. La plage de variation du paramètre de portée pour le temps est laissée à sa valeur par défaut. L'ajout d'un effet de pépite permet de se prémunir des potentielles perturbations des réponses du simulateur.

La Figure 6.21 compare la prédiction des nouveaux métamodèles (avec prise en compte de l'encrassement) et des métamodèles de la configuration sans encrassement. La comparaison est réalisée pour les individus du front de Pareto issus de l'optimisation de

11. soit à cause d'un problème numérique, soit à cause de l'étape de déformation du maillage incluse dans le modèle d'encrassement.

12. utilisées pour la maximisation de la log-vraisemblance

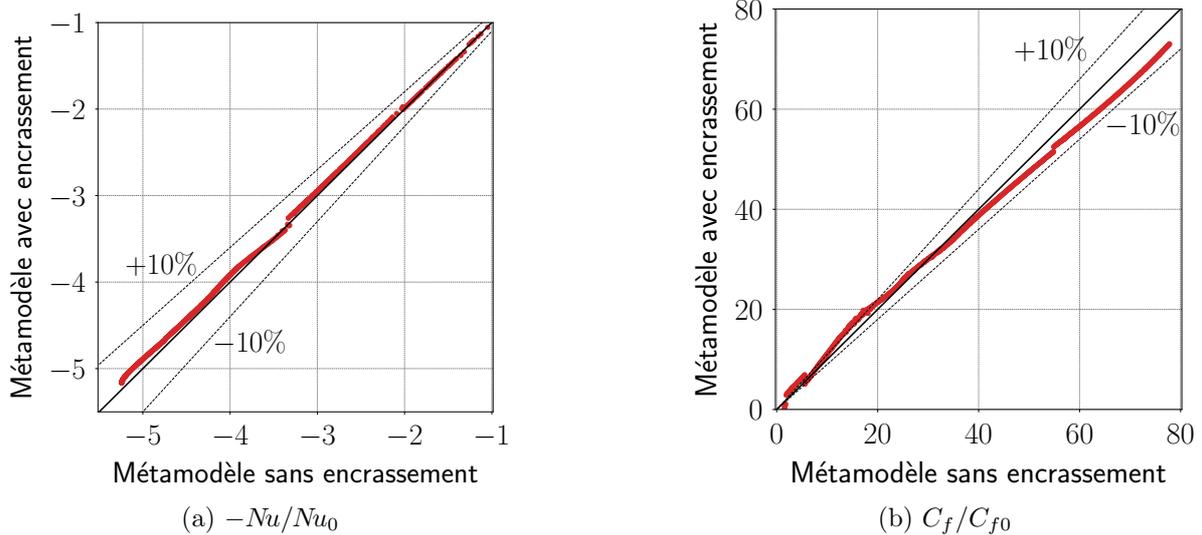


Figure 6.21 – Comparaison de la prédiction des individus du front de Pareto (obtenu dans la Section 6.2) entre les métamodèles sans prise en compte de l’encrassement et avec. Les variations à $\pm 10\%$ sont indiquées par les lignes pointillées.

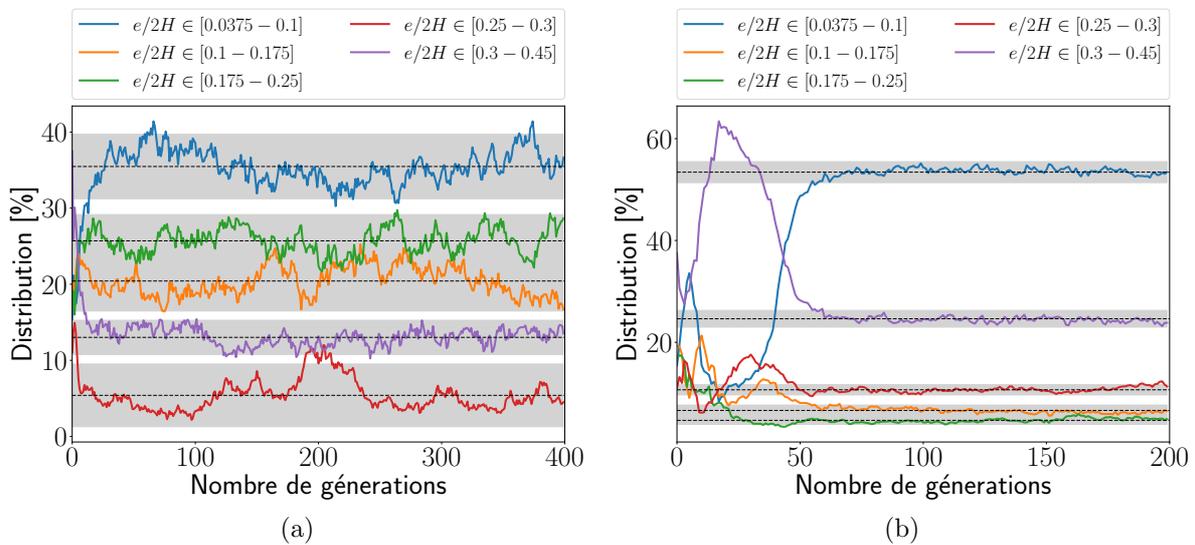


Figure 6.22 – Évolution de la distribution des individus de l’ensemble de Pareto dans les différentes classes en fonction des générations pour $e/2H$ pour l’optimisation à quatre objectifs (a) et à deux objectifs sous contraintes (b).

l’intensificateur (voir Section 6.2.4). On remarque que les résultats pour le nombre de Nusselt sont peu impactés par l’ajout du nouveau paramètre alors que ceux du coefficient de frottement le sont beaucoup plus, avec plus de 10% d’écart pour les faibles valeurs. Il semble donc que ce changement dégrade la qualité de la prédiction du métamodèle C_f/C_{f0} .

Les indicateurs de qualité issus d’une *cross-validation* à 10 sous-ensembles conduisent aux mêmes conclusions. En effet, ils sont particulièrement bons pour le métamodèle du nombre de Nusselt ($Q^2 = 0.99$, $RMSE_{CV} = 1.13\%$ et $MAE_{CV} = 0.68\%$) contrairement à celui de C_f/C_{f0} . Le coefficient de corrélation quadratique est égal à 0.91 et les erreurs sont de 3.6% pour la $RMSE_{CV}$ et de 1.6% pour la MAE_{CV} . La plus faible valeur de Q^2 indique

que la prédiction est moins précise et que les interpolations réalisées entre les observations sont entachées d'erreurs. Cela s'explique d'une part par le "forçage" des paramètres de portée, qui conduit à une maximisation biaisée de la log-vraisemblance, dégradant ainsi la prédiction (mais nécessaire pour assurer une cohérence avec la Section 6.2.4). D'autre part, la réponse du simulateur pour le coefficient de perte de charge est plus bruitée que pour le nombre de Nusselt. En effet, la prise en compte de l'évolution du dépôt sur l'écoulement induit un comportement instationnaire plus marqué, la section de passage du fluide étant plus accidentée, comme l'illustre la Figure 4.16 à la page 110. La perte de charge est donc plus fluctuante et la moyenne des champs effectuée lors de l'étape de post-traitement n'est peut-être plus représentative dans certains cas. Cela conduit à une estimation moins fiable du coefficient C_f , des observations plus bruitées et un métamodèle moins précis.

6.5.2.2 Optimisation

Le problème d'optimisation défini par les équations (6.34) à (6.40) est résolu par l'algorithme NSGA-II avec 1200 individus sur 400 générations. Toutefois, comme le montre la forte variation de la distribution et les importants intervalles de confiance sur la Figure 6.22(a), celui-ci peine à converger vers un ensemble de solutions optimales.

Deux raisons sont suspectées. Premièrement, il est possible que l'espace d'optimisation (paramètres et objectifs) soit trop complexe à parcourir et à explorer et que l'évolution des individus d'une génération à l'autre soit délicate. Deuxièmement, le nombre d'objectifs est trop important et l'algorithme ne parvient pas à discriminer les individus prometteurs. En effet, il a été constaté que dès la génération 10, tous les individus sélectionnés pour former la génération suivante sont compris dans le premier front. Cette seconde cause semble plus probable car il s'agit d'une lacune connue du NSGA-II (Jain and Deb, 2013).

Deux solutions peuvent être envisagées. La première consiste à se tourner vers l'algorithme NSGA-III (Jain and Deb, 2013), développé afin de résoudre des problèmes d'optimisation à plus de trois objectifs. La seconde est de modifier le problème pour le ramener à deux objectifs en traitant les deux autres comme des contraintes. La seconde approche est préférée, car le NSGA-II est un outil bien maîtrisé de la stratégie d'optimisation, et que le passage au NSGA-III requiert des efforts de développement informatique n'ayant pas pu être mis en œuvre durant la réalisation des présents travaux.

Le problème d'optimisation modifié vise à déterminer les formes conduisant aux performances optimales à l'état propre, tout en imposant que leur dégradation à 40 heures soit inférieure à une certaine tolérance. Formellement, cela s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & -Nu(\mathbf{p}, 0)/Nu_0 & (6.41) \\ \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3} & C_f(\mathbf{p}, 0)/C_{f0} & (6.42) \\ \text{sous contraintes} & \frac{|Nu(\mathbf{p}, 40) - Nu(\mathbf{p}, 0)|}{Nu(\mathbf{p}, 0)} \leq \epsilon_{Nu} & (6.43) \\ & \frac{|C_f(\mathbf{p}, 40) - C_f(\mathbf{p}, 0)|}{C_f(\mathbf{p}, 0)} \leq \epsilon_{C_f} & (6.44) \\ \text{sachant} & h_{rib}/H \in [0.05, 0.3] & (6.45) \\ & e/2H \in [0.0375; 0.45] & (6.46) \\ & \tilde{E} \in [0; 1] & (6.47) \end{array} \right.$$

Le choix des tolérances influence grandement les résultats de l'optimisation. Si elles sont trop importantes, l'espace de recherche n'est pas assez limité et on retrouve les résultats de l'optimisation à l'état lisse. Au contraire, si elles sont trop petites, les contraintes sont trop restrictives et le problème n'a pas de solution. La valeur de ces contraintes pour les observations du plan d'expériences varie entre 0.6 et 0.8 pour le nombre de Nusselt et entre 0.8 et 17 pour le coefficient de perte de charge. Au vu de ces valeurs, les tolérances ont été fixées à :

$$\epsilon_{Nu} = 0.72 \quad (6.48)$$

$$\epsilon_{C_f} = 4.6 \quad (6.49)$$

La résolution du problème repose sur l'algorithme NSGA-II avec 1200 individus sur 200 générations. La convergence de la recherche des solutions optimales, visible sur la Figure 6.22(b), montre que l'algorithme gère bien l'ajout des contraintes. La distribution de la population se stabilise après la génération 80. Les individus des générations 100 à 200 sont alors utilisés pour le *clustering*.

La Figure 6.23 illustre les résultats de l'optimisation avec prise en compte de l'encrassement aux temps longs (en couleur) et les compare aux résultats de l'optimisation de l'intensificateur Section 6.2 (en noir). Le front de Pareto du présent problème est discontinu mais proche de celui obtenu précédemment. En plus des performances à l'état propre des individus de ces deux fronts, celles d'un état encrassé à 40 heures sont également représentées. Cela permet de rendre compte visuellement de l'influence des contraintes (6.43) et (6.44). Le *clustering* met en évidence 10 groupes, caractérisés par leurs centres et colorés sur le front de Pareto. Les formes des *ribs* associées sont représentées sur la Figure 6.24. La prise en compte des contraintes permet d'obtenir des formes plus performantes une fois encrassées car situées à gauche des points noirs. En effet, on voit que les groupes violet (\circ), gris (\square), cyan (\triangleright) et vert pomme (\star) sont prometteurs. Il s'agit de formes caractérisées par une hauteur réduite.

Pour chacun des centres, une simulation de qualification a été effectuée. Les performances sont indiquées par des symboles rouges sur la Figure 6.23. On remarque que l'écart moyen entre les prédictions des métamodèles et les résultats issus des simulations sont faibles pour l'état propre (2.4% pour le nombre de Nusselt et 4.9% pour le coefficient de frottement). Cependant pour l'état encrassé, des écarts importants sont visibles entre les performances prédites par le métamodèle et celles simulées (en moyenne 15% pour le nombre de Nusselt et 18% pour le coefficient de frottement). On notera que pour trois centres (\circ , \square et \triangleleft) le modèle¹³ n'a pas permis de réaliser l'encrassement à 40 heures. Ces résultats sont en accord avec l'analyse de la qualité des métamodèles, notamment pour le coefficient de frottement.

La réalisation d'une optimisation considérant des conditions d'encrassement semble réalisable. Toutefois, l'analyse physique des résultats est limitée par la prédiction des métamodèles trop peu précise.

Ce manque de précision peut s'expliquer par le modèle d'encrassement, qui par sa prise en compte discontinue (binaire) de l'arrachement, conduit à des résultats bruités et difficilement "métamodélisables". D'autre part, la stratégie d'ajout du nouveau paramètre temporel, sur la base des observations déjà réalisées semble limitée. Il faudrait construire les métamodèles en utilisant une stratégie d'enrichissement en prenant en considération le paramètre temporel dès le début.

13. associant CFD et accroissement du dépôt

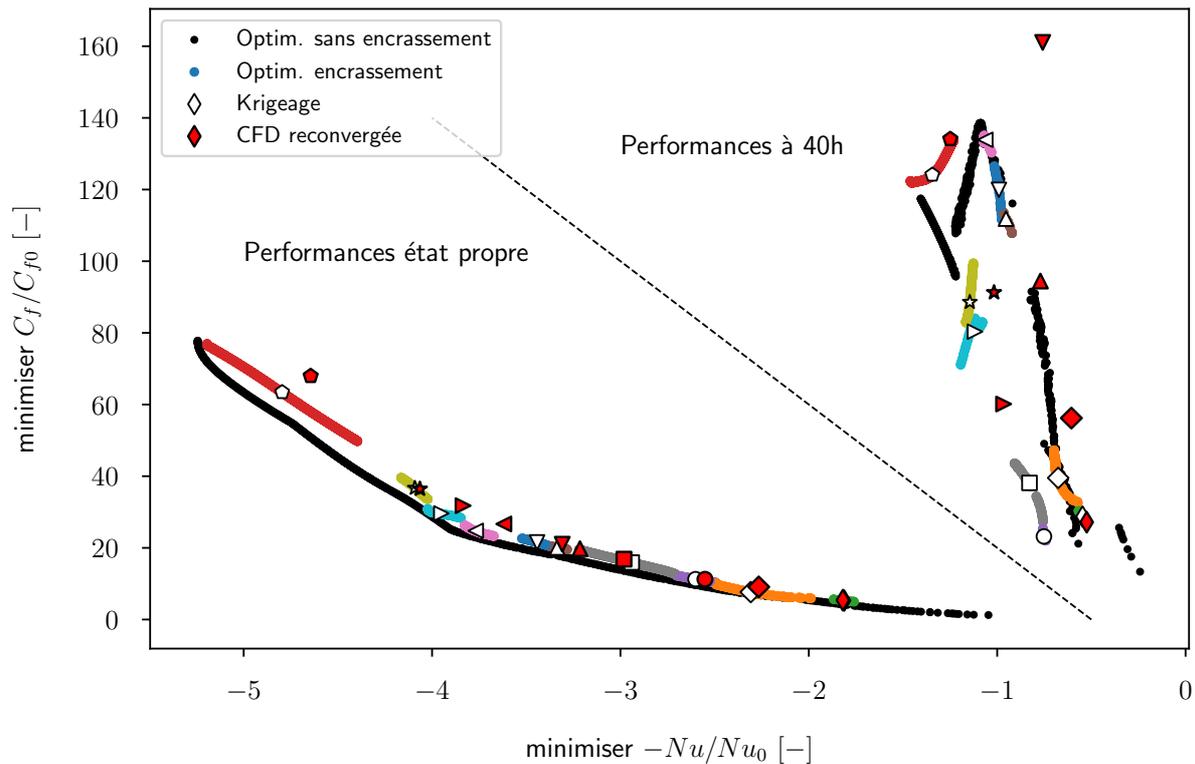


Figure 6.23 – Front de Pareto de l’optimisation avec encrassement avec les groupes mis en évidence (couleur) comparé au front de l’optimisation sans encrassement (noir). Les états propre et encrassé sont représentés. Les performances des centres de chaque groupe prédites par les métamodèles sont identifiées par des symboles vides et en symboles rouges pour les performances issues des simulations de qualification.

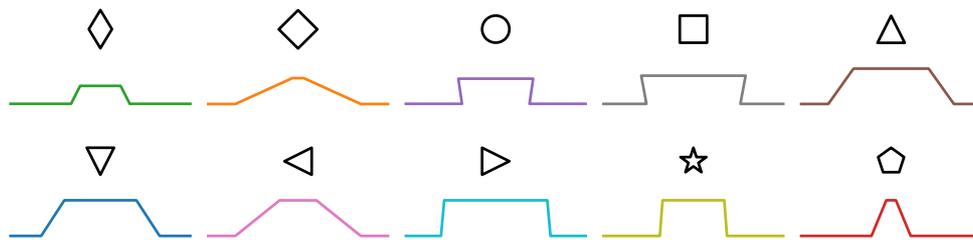


Figure 6.24 – Visualisation des formes des centres de groupes

6.5.3 Conclusions

L’encrassement dans les échangeurs a été traité dans le cadre d’une optimisation en considérant une approche aux temps courts et aux temps longs. Les résultats des deux approches mettent en évidence les limites du modèle d’encrassement, qui génère des réponses bruitées. Ainsi, l’étape de métamodélisation conduit à des prédictions peu précises. Par ailleurs, il faudrait également intégrer l’aspect encrassement (vitesse et/ou évolution temporelle) au début de la construction du métamodèle, ce qui n’a pu être fait dans les présents travaux par manque de temps.

L’augmentation du nombre d’objectifs à quatre a également montré les limites de l’algorithme NSGA-II.

D’un point de vue résultats, il semble qu’optimiser aux temps courts conduise à

des formes présentant un fort taux de blocage, permettant une homogénéisation de la température et réduisant l'effet de la thermophorèse. Au contraire, aux temps longs, ce sont ces mêmes formes qui sont susceptibles de subir une importante variation relative de leurs performances.

Il aurait été possible de considérer l'encrassement via une intégration des performances par rapport au temps de fonctionnement. Ces performances intégrées pourraient alors être utilisées en tant qu'objectifs de l'optimisation

6.6 Conclusions du chapitre

Dans ce chapitre, le processus d'optimisation a été appliqué à des configurations d'échangeurs considérant une approche multiéchelle ou multiphysique (encrassement). Cela s'est traduit par la transformation des fonctions objectifs ou l'augmentation de leur nombre, ainsi que par la prise en compte de nouveaux paramètres.

Les résultats ont montré qu'optimiser le motif de l'intensificateur conduit aux mêmes formes, que l'on considère ses performances locales (nombre de Nusselt et coefficient de perte de charge) ou bien les performances globales de l'échangeur (efficacité et perte de charge par une méthode ε -NUT). Ceci s'explique par la monotonie des fonctions de transfert permettant d'obtenir les performances globales à partir de la réponse locale.

L'approche multiéchelle reposant sur la simulation numérique permet de prendre en compte les interactions entre les phénomènes globaux et locaux. C'est notamment le cas pour le comportement de la distribution. Elle a de plus l'avantage de pouvoir lever plusieurs hypothèses des méthodes globales, conduisant à une estimation des performances plus proche de la réalité.

Le processus d'optimisation utilisé dans les présents travaux a permis de gérer efficacement ces aspects multiéchelles. Ceci est dû à une stratégie d'enrichissement des métamodèles adéquate, que ce soit pour l'élaboration de corrélations (exploration) et pour leur utilisation en tant que carburants raffinés pour le moteur d'optimisation (exploitation).

Enfin, l'ajout d'une dynamique d'encrassement a montré certaines limites de ce processus d'optimisation. L'étape de métamodélisation a été rendue moins précise par l'ajout d'un modèle décrivant la physique de manière trop irrégulière¹⁴. D'un autre côté, l'augmentation du nombre d'objectifs suggère d'utiliser un autre moteur d'optimisation mieux adapté aux grandes dimensions.

14. à cause de la prise en compte binaire de l'arrachement

Les présents travaux se concentrent sur la conception d'une méthode d'optimisation permettant de traiter les différentes situations rencontrées lors de l'optimisation des échangeurs de chaleur. Ils se sont limités à l'optimisation de forme paramétrique d'échangeurs travaillant avec des fluides sans changement de phase et dont l'écoulement est incompressible.

Le Chapitre 2 a mis en évidence le comportement fortement multiéchelle d'un échangeur de chaleur, que ce soit au niveau des éléments le constituant (intensificateur, partie distribution) mais également au niveau des phénomènes physiques qu'il met en jeu (distribution du débit, turbulence au niveau de l'intensificateur). La mécanique des fluides numérique est utilisée afin de modéliser et de simuler tous ces phénomènes. Elle se substitue également de plus en plus à l'expérience lors de la construction de corrélations pour les intensificateurs. Celles-ci sont ensuite utilisées dans des méthodes déterminant les performances globales de l'échangeur (au moyen de méthodes globales ou de la CFD). Cela en fait un outil d'intérêt pour l'optimisation car permettant d'investiguer l'influence de nouvelles formes sur les performances de l'échangeur.

Le Chapitre 3 a résumé un ensemble de méthodes mathématiques permettant de résoudre un problème d'optimisation multiobjectif. L'association d'un algorithme génétique (NSGA-II) et de plusieurs métamodèles de krigeage alimentés par des simulations CFD a été retenue. L'usage de métamodèles réduit considérablement le coût de l'optimisation en construisant une approximation de la réponse du solveur CFD. Les stratégies d'enrichissement (*adaptive sampling*) diminuent encore ce coût en n'utilisant que des simulations pertinentes pour construire les métamodèles. Cette pertinence est exprimée au travers de différents critères, dérivés du formalisme probabiliste de la méthode de krigeage. Cinq parmi ceux de la littérature ont été utilisés :

- la MMSE, visant à réduire l'incertitude maximale du métamodèle et l'IMSE, qui cherche à diminuer l'incertitude moyenne ;
- le q-EI, qui vise à enrichir les métamodèles dans les zones d'optima probables du métamodèle ;
- l'EHI et l'EEV, qui cherchent à améliorer la description des compromis le long du front de Pareto.

Configuration	Modélisation	Etude	N_d	N_{obj}
ONESIDE	CFD	Comparaison simulateur	3	2
TWO SIDE	CFD	Corrélations	4	2
		Optimisation locale	3 (4)	2
		Encrassement temps courts	3 (4)	3
		Encrassement temps longs	3 (5)	4 (2)
ECH-0D	ε -NUT + correl.	Optimisation globale	3	2
ECH-3D	CFD multiniveau + correl.	Optimisation globale	4	2

Tableau 7.1 – Récapitulatifs des configurations, de leurs modélisations et des différentes études réalisées. Le nombre de paramètres N_d considéré est indiqué, avec entre parenthèses le nombre de paramètres sur lequel sont construits les métamodèles. Le nombre d’objectifs N_{obj} pour l’optimisation (ou pour la métamodélisation entre parenthèses) est rappelé.

La méthode de krigeage construit des métamodèles ”les moins incertains possibles” en utilisant des critères d’exploration (MMSE et IMSE), fort à propos pour la construction de corrélations. Elle permet également la construction de métamodèles visant à être ”exploités” par un moteur d’optimisation (via les critères q-EI, EHI et EEV). Ces deux volets favorisent l’utilisation de cette méthode pour la modélisation et l’optimisation des échangeurs. Des méthodes d’analyse (*clustering*) et de visualisation (*Self Organizing Maps*) des résultats de l’optimisation ont également été introduites.

Les différentes configurations de test présentées dans le Chapitre 4 sont résumées dans le Tableau 7.1. Le but de chacune d’elles est rappelé ainsi que la méthode de modélisation, le nombre de paramètres de l’optimisation et/ou de la métamodélisation, et le nombre d’objectifs à optimiser et/ou de réponses à approcher.

Les Chapitres 5 et 6 rassemblent les études évaluant la robustesse de la méthode d’optimisation à différentes évolutions du simulateur (un solveur de mécanique des fluides dans les présents travaux).

L’influence des paramètres ”internes” du simulateur (maillage, modèles physiques, type de solveur) et de la complexité de la physique simulée (plusieurs échelles, nouvelle physique) sur la réponse de l’optimisation est analysée. Il en ressort que la méthode est capable dans chaque cas de générer les métamodèles et de réaliser l’optimisation, se concrétisant par un front de Pareto et un ensemble de ”cartes” (SOM). Dans le cas typique de l’encrassement, le simulateur fournit un ensemble de réponses bruitées. L’ajout d’un effet de pépite permet de lisser la surface de réponse et de réaliser une optimisation conservant les tendances. Cela accroît la polyvalence de la méthode d’optimisation, qui devient moins sensible à la qualité de la réponse du simulateur. La capacité de l’algorithme génétique à converger vers un ensemble de solutions optimales reste toutefois limitée lorsque le nombre d’objectifs est supérieur à trois (strictement).

L’étape de métamodélisation est la clé de voûte de cette méthode. C’est en grande partie elle qui assure la robustesse et la polyvalence exposées précédemment. C’est également cette étape qui assure la robustesse de l’optimisation pour l’aspect multiéchelle. D’une part, elle permet la construction de corrélations, et d’autre part, elle conduit à des métamodèles adaptés à l’exploitation par un algorithme génétique. La méthode de kri-

geage considère, lors de la construction des prédictions, des paramètres et des phénomènes en échelles d'espace et en temps différentes de manière égale. Cela est mis en évidence par la configuration ECH-3D.

Enfin, les méthodes d'analyse retenues sont pertinentes. Les *Self Organizing Maps* permettent de représenter graphiquement de manière claire de grandes populations caractérisées par plusieurs objectifs et paramètres. Le *clustering* des individus optimaux met en évidence un nombre fini de formes représentatives. Cette extraction présente un intérêt particulier pour l'industrie, limitant le nombre de formes à considérer et à étudier plus en détails dans un processus post-optimisation (nouvelles études numériques ou expérimentales).

Les résultats obtenus sont encourageants quant à la capacité de la méthode proposée dans les présents travaux de traiter différentes configurations d'échangeurs, considérant différentes échelles (géométriques et caractéristiques de l'écoulement et des transferts thermiques) et différents phénomènes physiques. Elle présente un réel intérêt dans le processus de conception des échangeurs.

Perspectives

Ces résultats soulèvent également certaines interrogations et ouvrent des axes de recherche.

Lors de la simulation du transfert thermique par CFD, la confiance que peut avoir l'utilisateur envers les modèles physiques qu'il utilise est une donnée importante. Les résultats ont montré que deux modèles de turbulence peuvent donner deux réponses très différentes. Ainsi, comment est-il possible d'intégrer cette donnée au processus d'optimisation ? Une première réponse pourrait être apportée par les approches de multifidélité, en supposant qu'un des deux modèles est plus "réaliste" que l'autre. Il est également envisageable de considérer l'écart entre les réponses comme une incertitude du simulateur. Celle-ci pourrait ensuite être utilisée dans le processus d'optimisation pour favoriser la recherche dans les zones peu fiables (au sens où la réponse des deux modèles est différente) ou alors pour s'en servir comme critère d'analyse des résultats. D'autre part, les résultats ont montré que la modélisation des phénomènes d'encrassement est entachée d'une forte erreur, rendant l'optimisation complexe à réaliser et à analyser. Il pourrait être intéressant de réaliser une optimisation sous incertitudes en considérant que l'encrassement agit comme une incertitude sur les performances. Des travaux similaires existent pour l'aérodynamique (Ju and Zhang, 2016).

Une autre difficulté lors de l'utilisation d'un solveur de mécanique des fluides numérique dans un processus d'optimisation concerne le traitement de simulations non-convergées. Dans les présents travaux, celles-ci étaient systématiquement écartées au prix d'une perte d'informations. Des discussions avec Helbert (2018), ont permis d'envisager l'utilisation de métamodèles de classification (Rasmussen and Williams, 2006, Chap. 3) prenant en compte ces simulations afin de disposer des informations sur les zones de l'espace non-convergées, que ce soit à cause d'un problème numérique ou bien d'une incapacité du modèle utilisé à décrire la physique.

La configuration ECH-3D a mis en évidence que l'amplitude de variation des objectifs pouvait avoir une influence importante sur les résultats de l'enrichissement (EHI notamment) et donc de l'optimisation. Afin de s'affranchir de cette influence, il serait possible

d'utiliser un conditionneur pour normaliser les objectifs. Celui-ci pourrait être calibré à partir des observations tirées du LHS initial.

Une autre piste d'amélioration sur les outils mathématiques concerne la mise en œuvre du krigeage. Lors de la métamodélisation de l'encrassement, le paramètre temporel était traité avec le même noyaux de covariance que les autres paramètres. Or, le temps est un paramètre intrinsèquement différent des paramètres de forme (spatiaux). Il serait donc envisageable de changer le noyau de covariance pour être en accord avec cette différence.

L'aspect multiéchelle peut également être amélioré. Le métamodèle de krigeage permet de considérer de manière équivalente les paramètres locaux et globaux. Il pourrait néanmoins être intéressant de considérer ces paramètres comme influant différemment sur les objectifs au moyen d'une optimisation par équilibre de Nash. Chacun des deux joueurs se verrait attribuer des paramètres locaux ou globaux et serait en compétition pour l'optimisation des performances de l'échangeur. Des travaux similaires existent dans la communauté aéronautique (Tang and Zhang, 2016).

L'optimisation multiobjectif multiparamétrique mise en œuvre dans les présents travaux reste limitée en nombre d'objectifs et de paramètres (trois objectifs et cinq paramètres). L'algorithme NSGA-II ne permet pas de considérer plus de trois objectifs, la convergence étant laborieuse. Il serait donc souhaitable d'utiliser le NSGA-III afin de prendre en compte plus d'objectifs. Les formes paramétrées sont également restées assez simples pour pouvoir mener à bien les différentes comparaisons. De nouvelles approches de description de la géométrie sont envisageables, comme les courbes de Bézier par exemple. Il serait également intéressant de valider la robustesse de la méthode lorsque le nombre de paramètres de forme augmente. La question se pose aussi de savoir comment se comporteraient les méthodes d'analyse et de visualisation dans des cas à beaucoup d'objectifs et de paramètres : les SOM seraient-elles aussi claires et le *clustering* permettrait-il de distinguer toujours un nombre fini de formes représentatives ?

Liste des publications

Les présents travaux ont donné lieu aux publications suivantes :

Aubert, S., Matrippolito, F., Rendu, Q., Buisson, M., and Ducros, F. (2017). Planar Slip Condition For Mesh Morphing Using Radial Basis Functions. *Procedia Engineering*, 203, 349-361.

Matrippolito F., Aubert, S., Ducros, F., and Buisson, M. (2018). On the use of Schur complement to improve the efficiency of RBF-based mesh deformation applied on internal cooling. *53rd 3AF International Conference on Applied Aerodynamics*, 26-28 Mars 2018, Salon-de-Provence, France

Matrippolito, F., Aubert, S., Ducros, F., Ferrand, M. and Fourmigue, J.-F. (2018). Optimisation de forme multiobjectif d'un échangeur de chaleur à plaques : approche multiéchelle. *26 ème Congrès de la Société Française de Thermique*, 29 mai-1er juin 2018, Pau, France

Matrippolito, F., Aubert, S., Ducros, F. and Buisson, M. (2019). RBF-based mesh morphing improvement using Schur complement applied to rib shape optimization (**Soumis**) *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*

Annexes

Mécanique des fluides numérique et *Code_Saturne*

Sommaire

A.1	Équations de Navier-Stokes	203
A.2	Modélisation de la turbulence	204
A.2.1	Équations moyennées	204
A.2.2	Modèles de turbulence - tenseur de Reynolds	205
A.2.3	Modélisation des flux de chaleur turbulents	209
A.3	Présentation de <i>Code_Saturne</i>	209
A.3.1	Fonctionnalités générales	209
A.3.2	Couplage monolithique	212
A.3.3	Surcharge du coefficient d'échange	213
A.3.4	Communication entre <i>Code_Saturne</i> et les métamodèles	213
A.4	Mise en données de la périodicité	214
A.4.1	Champ de vitesse	214
A.4.2	Champ de pression	214
A.4.3	Champ de température	215
A.4.4	Application dans <i>Code_Saturne</i>	216

A.1 Équations de Navier-Stokes

Le mouvement d'un fluide est régi par les équations de Naviers-Stokes traduisant la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale de celui-ci. Dans les présents travaux, l'écoulement incompressible d'un fluide newtonien est considéré. Sous leur forme conservative, ces équations s'écrivent :

$$\operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\vec{\nabla} P + \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}_v) \quad (\text{A.2})$$

$$c_p \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} T) \right) = -\operatorname{div}(\vec{\varphi}) \quad (\text{A.3})$$

avec \vec{u} la vitesse du fluide, P la pression statique, T la température, σ_v le tenseur des contraintes visqueuses, φ le flux de chaleur, ρ la masse volumique du fluide et c_p la capacité thermique. L'opérateur \otimes est le produit tensoriel. L'équation de conservation de l'énergie totale (A.3) est écrite en température. L'influence des forces de volume est négligé dans l'équation de la conservation de la quantité de mouvement (A.2). La puissance thermique générée par les forces visqueuses est négligée dans l'équation de conservation de l'énergie.

Les hypothèses de Stokes et de fluide newtonien permettent d'écrire le tenseur des contraintes visqueuses comme dépendant uniquement de la viscosité dynamique du fluide μ et du tenseur du taux de déformation \mathbf{S} :

$$\sigma_v = 2\mu \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\mathbf{S}) \mathbb{I} \right) \quad (\text{A.4})$$

avec

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \vec{u} + \vec{\nabla} \vec{u}^T \right) \quad (\text{A.5})$$

$\operatorname{tr}(\cdot)$ la trace du tenseur et \mathbb{I} la matrice identité.

Le flux de chaleur $\vec{\varphi}$ est exprimé par la loi de Fourier :

$$\vec{\varphi} = -\lambda \vec{\nabla} T \quad (\text{A.6})$$

avec λ la conductivité thermique du fluide.

A.2 Modélisation de la turbulence

A.2.1 Équations moyennées

Les équations précédentes n'ont une solution analytique que dans de rares cas particuliers. Dans la majorité des cas pratiques, elles sont résolues par une discrétisation spatiale et temporelle. Parmi les approches de modélisation, la plus utilisée dans l'industrie actuellement consiste à décomposer l'écoulement en une composante statistique moyenne et une composante fluctuante. Pour une grandeur donnée A , cela revient à écrire :

$$A = \langle A \rangle + A' \quad (\text{A.7})$$

L'opérateur $\langle \cdot \rangle$ réalise la moyenne au sens de Reynolds. En appliquant cet opérateur aux équations (A.1), (A.2) et (A.3), on obtient les équations de Navier-Stokes moyennées, *Reynolds Average Navier-Stokes* (RANS)¹ :

$$\operatorname{div}(\rho \langle \vec{u} \rangle) = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial \rho \langle \vec{u} \rangle}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \langle \vec{u} \rangle \otimes \langle \vec{u} \rangle) = -\vec{\nabla} \langle P \rangle + \operatorname{div}(\langle \sigma_v \rangle) - \operatorname{div}(\rho \langle \vec{u}' \otimes \vec{u}' \rangle) \quad (\text{A.9})$$

$$c_p \left(\frac{\partial \rho \langle T \rangle}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \langle \vec{u} \rangle \langle T \rangle) \right) = -\operatorname{div}(-\lambda \vec{\nabla} \langle T \rangle) - c_p \operatorname{div}(\rho \langle \vec{u}' T' \rangle) \quad (\text{A.10})$$

1. On rappelle que l'écoulement est supposé incompressible.

Deux termes (en rouge) apparaissent dans l'équation de la quantité de mouvement (A.9) et dans l'équation de l'énergie (A.10). Le premier forme le tenseur des contraintes de Reynolds \mathcal{R} :

$$\mathcal{R} = \langle \vec{u}' \otimes \vec{u}' \rangle \quad (\text{A.11})$$

et le second les flux de chaleur turbulents :

$$\vec{\varphi}' = \langle \vec{u}' T' \rangle \quad (\text{A.12})$$

Des modèles de turbulence sont nécessaires pour déterminer ces grandeurs représentatives de la turbulence.

En fonction des modèles utilisés, il n'est pas toujours possible de résoudre les grandeurs turbulentes proche de la paroi. Des lois de paroi sont alors utilisées pour en modéliser le comportement. On dit alors que les modèles sont *Haut-Reynolds*. *A contrario* lorsque le comportement en proche paroi est résolu, les modèles sont dits *Bas-Reynolds*. Ces deux types de modèles requièrent des conditions spécifiques concernant la taille première cellule au contact d'une paroi. La distance à la paroi adimensionnée y^+ est utilisée pour définir la taille de la cellule. Cette distance s'exprime comme :

$$y^+ = \frac{\rho y u_\tau}{\mu} \quad (\text{A.13})$$

Les modèles Haut-Reynolds imposent $y^+ > 30$ et les modèles Bas-Reynolds $y^+ \simeq 1$.

A.2.2 Modèles de turbulence - tenseur de Reynolds

Il existe principalement deux approches pour modéliser le tenseur des contraintes de Reynolds : les modèles à loi de comportement (*Eddy Viscosity Models*) ou modèles du premier ordre et les modèles des tensions de Reynolds (*Reynolds Stress Models*) ou modèles du second ordre.

Seuls les modèles du premier ordre sont décrits ici. Ces modèles reposent sur le modèle de Boussinesq qui relie le tenseur de Reynolds au tenseur du taux de déformation via l'introduction d'une viscosité turbulente ν_t comme :

$$\mathcal{R} = -2\nu_t \mathbf{S} + \frac{2}{3} k \mathbb{I} \quad (\text{A.14})$$

avec, \mathbb{I} la matrice identité et k l'énergie cinétique turbulente :

$$k = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathcal{R}) \quad (\text{A.15})$$

On ne considérera ici que les modèles possédant *a minima* deux équations de transport. La viscosité turbulente est homogène à une longueur au carré divisé par un temps. Il convient de définir une échelle de longueur l et une échelle de temps τ intégrale², dont les évolutions répondent à deux équations de transport fermant le modèle. Dans la suite pour alléger les équations, on supprime le symbole de la moyenne ($\langle \cdot \rangle$) en gardant à l'esprit que ce sont des grandeurs moyennes.

2. *i.e.* pour les grosses structures

A.2.2.1 Modèle $k - \epsilon$

Ce modèle, initialement proposé par Launder (1974), utilise l'énergie cinétique turbulente k et le taux de dissipation turbulente ϵ pour construire les échelles :

$$\text{de longueur } \frac{k^{3/2}}{\epsilon}, \quad \text{de temps } \frac{k}{\epsilon} \quad (\text{A.16})$$

La viscosité turbulente s'exprime alors, en fonction d'une constante C_μ :

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (\text{A.17})$$

Les équations de transport associées à ces deux grandeurs sont :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \vec{\nabla} k \cdot \vec{u} = 2\nu_t \mathbf{S} : \mathbf{S} - \epsilon + \text{div} \left(\left[\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right] \vec{\nabla} k \right) \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \vec{\nabla} \epsilon \cdot \vec{u} = 2\nu_t C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \mathbf{S} : \mathbf{S} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon}{k} \epsilon + \text{div} \left(\left[\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right] \vec{\nabla} \epsilon \right) \quad (\text{A.19})$$

et les constantes sont déterminées à partir de considérations expérimentales :

$$\frac{C_\mu \quad C_{\epsilon 1} \quad C_{\epsilon 2} \quad \sigma_k \quad \sigma_\epsilon}{0.09 \quad 1.44 \quad 1.92 \quad 1 \quad 1.3}$$

Cette formulation est dite *Haut Reynolds*.

A.2.2.2 Modèle $k - \omega$

Ce modèle, proposé par Wilcox (1988), utilise l'énergie cinétique turbulente k et la fréquence caractéristique des tourbillons $\omega = \epsilon/k$ pour construire les échelles. La viscosité turbulente s'exprime alors :

$$\nu_t = \frac{k}{\omega} \quad (\text{A.20})$$

Les équations de transport associées à ces deux grandeurs sont :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \vec{\nabla} k \cdot \vec{u} = 2\nu_t \mathbf{S} : \mathbf{S} - \beta' k \omega + \text{div} \left(\left[\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right] \vec{\nabla} k \right) \quad (\text{A.21})$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \vec{\nabla} \omega \cdot \vec{u} = 2\alpha \mathbf{S} : \mathbf{S} - \beta \omega^2 + \text{div} \left(\left[\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\omega} \right] \vec{\nabla} \omega \right) \quad (\text{A.22})$$

avec ν la viscosité cinématique du fluide et les constantes, déterminées expérimentalement :

$$\frac{\beta' \quad \alpha \quad \beta \quad \sigma_k \quad \sigma_\omega}{0.09 \quad 5/9 \quad 3/40 \quad 2 \quad 2}$$

Cette formulation est *Haut Reynolds*.

A.2.2.3 Modèle $k - \omega$ SST

Proposé par Menter (1994), ce modèle *Shear Stress Transport* passe d'une formulation $k - \omega$ en proche paroi à une formulation $k - \epsilon$ au centre de l'écoulement afin de tirer parti des avantages de chacun des modèles. La viscosité turbulente s'exprime comme :

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, \sqrt{2\mathbf{S} : \mathbf{S}} F_2)} \quad (\text{A.23})$$

avec F_2 une fonction tangente hyperbolique telle que :

$$F_2 = \tanh \left(\left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right) \quad (\text{A.24})$$

avec y la distance à la paroi. Les équations de transport s'écrivent :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \vec{\nabla} k \cdot \vec{u} = P_k - \beta^* k \omega + \text{div} \left([\nu + \sigma_k \nu_t] \vec{\nabla} k \right) \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \vec{\nabla} \omega \cdot \vec{u} = 2\alpha \mathbf{S} : \mathbf{S} - \beta \omega^2 + \text{div} \left([\nu + \sigma_\omega \nu_t] \vec{\nabla} \omega \right) + 2(1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \vec{\nabla} k \cdot \vec{\nabla} \omega \quad (\text{A.26})$$

avec le terme de production :

$$P_k = \min(2\nu_t \mathbf{S} : \mathbf{S}, 10\beta^* k \omega) \quad (\text{A.27})$$

La fonction de pondération F_1 est définie comme :

$$F_1 = \tanh(\arg^4) \quad (\text{A.28})$$

avec

$$\arg = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \quad (\text{A.29})$$

et

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \vec{\nabla} k \cdot \vec{\nabla} \omega, 10^{-10} \right) \quad (\text{A.30})$$

Pour chacune des constantes $\phi = [\sigma_k, \sigma_\omega, \beta, \alpha]$, la valeur utilisée est pondérée par F_1 comme :

$$\phi = \phi_1 F_1 + \phi_2 (1 - F_1) \quad (\text{A.31})$$

Les constantes du modèle sont :

α_1	β_1	σ_{k1}	$\sigma_{\omega 1}$
5/9	3/40	0.85	0.5
α_2	β_2	σ_{k2}	$\sigma_{\omega 2}$
0.44	0.0828	1	0.856

Les constantes restantes sont :

β^*	a_1
0.09	0.31

Cette formulation est considérée comme *Bas Reynolds*.

A.2.2.4 Modèle $B_l - \overline{v^2}/k$

Le modèle $B_l - \overline{v^2}/k$ (Billard and Laurence, 2012) est une variante du modèle $\overline{v^2} - f$ de Durbin (1991) qui le premier a suggéré de transporter la grandeur turbulente $\overline{v^2}$ pour mieux prendre en compte l'anisotropie de la turbulence. Les changements apportés par les modèles $\zeta - f$ (Hanjalić et al., 2004) ou $B_l - \overline{v^2}/k$ ont surtout permis d'améliorer la robustesse. Ce modèle est un modèle à quatre équations. Les trois grandeurs transportées sont l'énergie cinétique turbulente k , le taux de dissipation ϵ et la grandeur sans dimensions, $\varphi = \overline{v^2}/k$, auxquelles s'ajoute un coefficient de pondération elliptique α . Les trois équations de transports sont

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \vec{\nabla} k \cdot \vec{u} = 2\nu_t \mathbf{S} : \mathbf{S} - \epsilon + \text{div} \left(\left[\frac{\nu}{2} + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right] \vec{\nabla} k \right) - 2\nu_t C_{\epsilon 3} (1 - \alpha)^3 \frac{k}{\epsilon} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k \partial x_j} \quad (\text{A.32})$$

avec $\partial^2 u_i / \partial x_k \partial x_j$ respectant la convention de sommation d'Einstein.

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \vec{\nabla} \epsilon \cdot \vec{u} = \frac{2C_{\epsilon 1} \nu_t \mathbf{S} : \mathbf{S} - C_{\epsilon 2}^* \epsilon}{\tau} + \text{div} \left(\left[\frac{\nu}{2} + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right] \vec{\nabla} \epsilon \right) \quad (\text{A.33})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{\nabla} \varphi \cdot \vec{u} = f - 2\nu_t \frac{\varphi}{k} \mathbf{S} : \mathbf{S} + \text{div} \left(\left[\frac{\nu}{2} + \frac{\nu_t}{\sigma_\varphi} \right] \vec{\nabla} \varphi \right) + \frac{2\nu_t}{k\sigma_k} \vec{\nabla} k \cdot \vec{\nabla} \varphi \quad (\text{A.34})$$

et α est solution de l'équation elliptique :

$$\alpha - L^2 \nabla^2 \alpha = 1 \quad (\text{A.35})$$

La valeur du terme de redistribution de l'énergie f est obtenue par pondération elliptique entre une valeur pariétale et une valeur au centre de l'écoulement :

$$f = -(1 - \alpha^3) \frac{\varphi \epsilon}{2k} - \frac{1}{\tau} \alpha^3 \left(C_1 - 1 + C_2 \frac{2\nu_t \mathbf{S} : \mathbf{S}}{\epsilon} \right) \left(\varphi - \frac{2}{3} \right) \quad (\text{A.36})$$

Les échelles de longueur l et de temps τ intégrales sont :

$$l = C_L \sqrt{\frac{k^3}{\epsilon^2} + C_\eta \frac{\nu^{2/3}}{\epsilon^{1/2}}} \quad (\text{A.37})$$

$$\tau = \sqrt{\frac{k^2}{\epsilon^2} + C_T^2 \frac{\nu}{\epsilon}} \quad (\text{A.38})$$

et une limite :

$$\tau_{lim} = \frac{0.6}{\sqrt{6} C_\mu \varphi \sqrt{\mathbf{S} : \mathbf{S}}} \quad (\text{A.39})$$

Finalement, la viscosité turbulente s'exprime :

$$\nu_t = C_\mu \varphi k \min(\tau, \tau_{lim}) \quad (\text{A.40})$$

La constante $C_{\epsilon 2}^*$ est donnée par la relation :

$$C_{\epsilon 2}^* = C_{\epsilon 2} + \alpha^3 (C_{\epsilon 4} - C_{\epsilon 2}) \tanh \left(\left| \frac{\text{div} \left(\nu_t / \sigma_k \vec{\nabla} k \right)}{\epsilon} \right|^{3/2} \right) \quad (\text{A.41})$$

Les constantes du modèle sont :

C_μ	σ_k	σ_ϵ	σ_φ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$C_{\epsilon 3}$	$C_{\epsilon 4}$	C_1	C_2	C_T	C_L	C_η
0.22	1	1.5	1	1.83	1.9	2.3	0.4	1.4	0.65	4	0.164	75

A.2.3 Modélisation des flux de chaleur turbulents

Comme pour le tenseur de Reynolds, il est possible de modéliser les flux de chaleur turbulents de deux façons (Dehoux, 2012). La première consiste à utiliser directement l'équation de transport vectorielle des flux. La seconde est d'utiliser des modèles algébriques simplifiés. Le modèle utilisé dans les présents travaux est le *Simple Gradient Diffusion Hypothesis*. Il repose sur une hypothèse de diffusivité turbulente isotrope qui est liée à la viscosité turbulente. Les flux de chaleur turbulents s'expriment alors en fonction du gradient de température (de manière similaire à la loi de Fourier) :

$$\langle \vec{u}'T' \rangle = -\frac{\nu_t}{\text{Pr}_t} \vec{\nabla} \langle T \rangle \quad (\text{A.42})$$

avec Pr_t le nombre de Prandtl turbulent, compris entre 0.8 et 1 et qui est extrait de configurations expérimentales ou de simulations numériques directes (DNS). La valeur par défaut dans *Code_Saturne* est 1.

A.3 Présentation de *Code_Saturne*

Code_Saturne (EDF R&D, 2018a) est un solveur de mécanique des fluides *open-source*, généraliste, qui peut traiter des écoulements monophasiques, laminaires ou turbulents, incompressibles ou faiblement dilatables. Différents "modules" sont disponibles pour prendre en compte des physiques particulières telles que les écoulements atmosphériques, le suivi de particules ou la combustion. Le code est également adapté pour des simulations avec transferts thermiques et pouvant inclure un couplage thermique fluide/solide. Il est conçu pour réaliser des calculs massivement parallèles. Le solveur possède une grande variété de modèles de turbulence RANS et LES.

La présente description du code se limite à des applications incompressibles et pour des modèles RANS. Pour une description plus complète, on pourra se référer à la documentation de *Code_Saturne* (EDF R&D, 2018b).

A.3.1 Fonctionnalités générales

Code_Saturne résout les équations de Navier-Stokes moyennées sous leur forme conservative telles que décrites par les équations (A.8), (A.9) et (A.10). Il résout également les équations de transport des grandeurs de la turbulence associées à chacun des modèles. En fonction des besoins, ces équations sont agrémentées de termes additionnels (termes sources, ...) (EDF R&D, 2018b).

Cette section détaille les schémas temporels et spatiaux principalement utilisés dans les présents travaux. Dans la suite les opérateurs de moyennes de Reynolds ont été supprimés pour plus de clarté.

A.3.1.1 Intégration temporelle

L'intégration temporelle de toutes les grandeurs (vitesse, pression, scalaires, grandeurs turbulentes) repose sur un θ -schéma. Elle est associée à une méthode de prédiction/correction pour la résolution couplée de la pression et de la vitesse (algorithme SIMPLEX).

La première étape prédit la vitesse en résolvant un système linéaire issu de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Le champ de vitesse ainsi prédit n'est

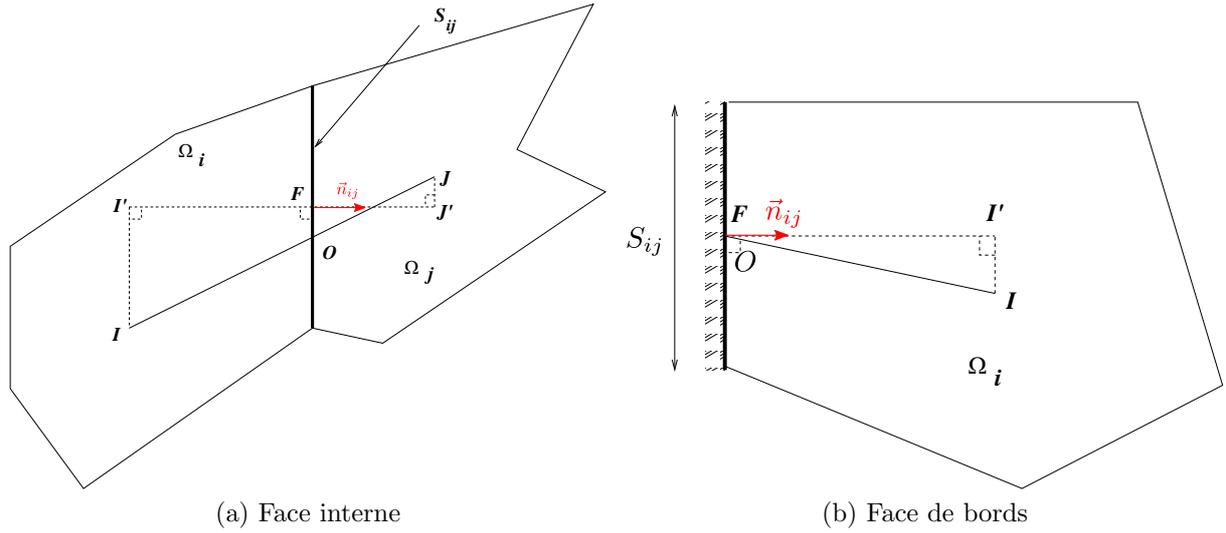


Figure A.1 – Schéma des informations géométriques (adapté de EDF R&D (2018b)).

toutefois pas à divergence nulle. La seconde étape calcule alors un incrément de vitesse nécessaire au respect l'équation de continuité.

A.3.1.2 Discrétisation spatiale

La discrétisation spatiale utilisée est de type volumes finis colocalisés (la pression, la vitesse et les grandeurs scalaires sont résolues au même point) au centre des cellules. La valeur discrète Y_i de la grandeur Y au centre de gravité I d'une cellule Ω_i est donnée par sa valeur moyenne :

$$Y_i = \frac{1}{\rho_i |\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \rho Y dV \quad (\text{A.43})$$

avec $|\Omega_i|$ le volume de la cellule. La valeur discrète de cette grandeur prise au niveau de la face S_{ij} commune entre deux cellules Ω_i et Ω_j , est donnée au barycentre F de la face comme :

$$Y_{ij} = \frac{1}{|S_{ij}|} \int_{S_{ij}} Y dS \quad (\text{A.44})$$

avec $|S_{ij}|$ la surface de la face. On appelle O l'intersection entre la face S_{ij} et la droite (IJ) reliant les deux centres de cellules. I' et J' sont les projetés orthogonaux des centres de cellules sur la normale sortante de direction \vec{n}_{ij} à la face S_{ij} passant par F . Les informations sont résumées sur la Figure A.1(a).

Lorsque la cellule est au bord du domaine, on dit que S_{ij} est une face de bord et $O \equiv F$, comme le montre la Figure A.1(b).

Le schéma volumes finis est obtenu en intégrant les équations (A.8), (A.9) et (A.10) sur une cellule Ω_i .

Le gradient de la grandeur Y au centre de la cellule Ω_i est donné par :

$$\vec{\nabla} Y_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in V(\Omega_i)} \mathcal{E}_{ij}(Y) |S_{ij}| \vec{n}_{ij} dS \quad (\text{A.45})$$

avec $V(\Omega_i)$ représentant les cellules voisines de Ω_i et $\mathcal{E}_{ij}(Y)$ un interpolateur de Y aux

barycentres des faces :

$$\mathcal{E}_{ij}(Y) = \alpha_{ij}Y_i + (1 - \alpha_{ij})Y_j + 0.5 \left(\vec{\nabla}Y_i + \vec{\nabla}Y_j \right) \cdot \vec{OF} \quad (\text{A.46})$$

où $\alpha_{ij} = \frac{FJ'}{FI'}$ est le rapport des distances entre le barycentre de la face et les projetés des centres de chaque cellule. La discrétisation de cette équation est implicite et nécessite une méthode de résolution itérative.

Les termes convectifs $\text{div}(\rho\vec{u}Y)$ dans les équations de Navier-Stokes, sous l'hypothèse d'incompressibilité, peuvent être écrits sous forme non conservative comme :

$$\text{div}(\rho\vec{u}Y) = \vec{\nabla}Y \cdot \rho\vec{u} - Y \text{div}(\rho\vec{u}) \quad (\text{A.47})$$

$$= \vec{\nabla}Y \cdot \rho\vec{u} \quad (\text{A.48})$$

La formulation volumes finis de cette équation conduit à l'intégrer sur une cellule Ω_i :

$$\int_{\Omega_i} \vec{\nabla}Y \cdot \rho\vec{u} dV = \sum_{j \in V(\Omega_i)} (Y_{ij} - Y_i) \rho\vec{u} \cdot |S_{ij}| \vec{n}_{ij} \quad (\text{A.49})$$

La détermination de la valeur de Y_{ij} à la face dépend du schéma de convection utilisé :

— schéma décentré amont d'ordre 1 (*upwind*)

$$Y_{ij} = Y_{ij}^u = \begin{cases} Y_i & \text{si } \rho\vec{u} \cdot |S_{ij}| \vec{n}_{ij} \geq 0 \\ Y_j & \text{si } \rho\vec{u} \cdot |S_{ij}| \vec{n}_{ij} \leq 0 \end{cases} \quad (\text{A.50})$$

$$(\text{A.51})$$

— schéma centré

$$Y_{ij} = Y_{ij}^c = \mathcal{E}_{ij}(Y) \quad (\text{A.52})$$

— schéma pondéré

$$Y_{ij} = \beta Y_{ij}^u + (1 - \beta) Y_{ij}^c \text{ avec } 0 \leq \beta \leq 1 \quad (\text{A.53})$$

Les termes diffusifs $\text{div}(\lambda\vec{\nabla}Y)$ intégrés sur une cellule Ω_i et discrétisés s'expriment :

$$\int_{\Omega_i} \text{div}(\lambda\vec{\nabla}Y) dV = \sum_{j \in V(\Omega_i)} \lambda_{ij} \vec{\nabla}Y_{ij} \cdot |S_{ij}| \vec{n}_{ij} \quad (\text{A.54})$$

avec λ_{ij} la diffusivité associée à la face S_{ij} . Numériquement, la valeur du produit scalaire n'est pas accessible. Elle se calcule, pour un maillage orthogonal³, comme :

$$\lambda_{ij} \vec{\nabla}Y_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} = \lambda_{ij} \frac{Y_j - Y_i}{IJ} \quad (\text{A.55})$$

Ce terme est appelé le flux diffusif.

3. le cas non-orthogonal est traité dans EDF R&D (2018b)

A.3.2 Couplage monolithique

Code_Saturne permet de réaliser des couplages de quantités scalaires entre plusieurs domaines. Le fonctionnement de ce couplage est décrit dans le cadre d'un couplage thermique entre un fluide et un solide. Il s'agit d'un couplage mono-instance (qui se déroule dans un même code) et implicite. En effet, les flux de chaleur sont échangés directement entre deux cellules voisines sans avoir recourt à une condition de type "condition à la limite" au niveau de la face qu'elles partagent.

Lors de l'initialisation du calcul, les domaines fluide et solide sont séparés au moyen d'une **paroi mince**, qui est considérée comme une face de bord pour la vitesse et la pression. Cela permet de prescrire des conditions aux limites annulant les flux de masse entre les domaines.

Le transfert thermique entre les deux domaines se fait au moyen du terme de diffusion, le terme de convection étant nul.

On considère une cellule Ω_i à l'intérieur d'un domaine 1 et une cellule Ω_j dans un domaine 2. Le flux diffusif normal entrant dans le domaine 1 depuis la face S_{ij} , que l'on notera $D_{int,ij}$, est :

$$D_{int,ij} = -h_{int}(Y_i - Y_F) \quad (\text{A.56})$$

avec $h_{int} = \frac{\lambda_{ij}}{l_F}$. Le flux normal sortant vers le domaine 2, que l'on notera $D_{ext,ij}$, est :

$$D_{ext,ij} = h_{ext}(Y_j - Y_F) \quad (\text{A.57})$$

avec $h_{ext} = \frac{\lambda_{ji}}{l_F}$. On précise que $\lambda_{ji} \neq \lambda_{ij}$. Si l'on regarde le flux à la face S_{ij} , il s'exprime :

$$D_{ij} = h_{eq}(Y_j - Y_i) \quad (\text{A.58})$$

L'égalité des flux impose que $D_{ext,ij} = D_{int,ij} = D_{ij}$ et on obtient que :

$$h_{eq} = \frac{h_{int}h_{ext}}{h_{int} + h_{ext}} \quad (\text{A.59})$$

Ainsi, le couplage thermique est effectué en remplaçant la conductivité de la face dans l'équation (A.55) par la conductivité équivalente h_{eq} .

Lorsque l'on considère une résolution non couplée des deux domaines, la matrice d'advection-diffusion⁴ \mathbf{A} est une matrice en bloc qui s'exprime :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.60})$$

Avec \mathbf{A}_1 la matrice d'advection-diffusion du domaine 1 et \mathbf{A}_2 celle du domaine 2. Les termes extra-diagonaux représentent les interactions de chacun des domaines avec l'autre. Dans le cas non couplé ils sont nuls. La condition de couplage, qui s'effectue par l'ajout de flux diffusifs entre les deux domaines, se traduit par l'apparition de termes hors de la diagonale :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{C}_{12} \\ \mathbf{C}_{21} & \mathbf{A}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.61})$$

Les matrices de couplages \mathbf{C}_{12} et \mathbf{C}_{21} dépendent des coefficients d'échange h_{int} et h_{ext} .

4. incluse dans le système linéaire associé à l'équation de l'énergie,

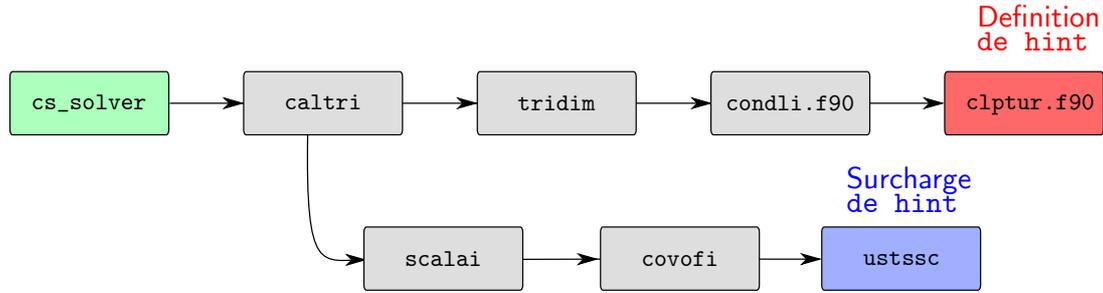


Figure A.2 – Pile d’appel des fonctions lors de la résolution par `cs_solver`. La résolution des équations de Navier-Stokes est réalisée dans la routine `tridim`.

A.3.3 Surcharge du coefficient d’échange

Lors de la mise en œuvre de la configuration ECH-3D ou de l’encrassement de la configuration TWOSIDE, le coefficient d’échange thermique est spécifié par l’utilisateur. Sa prise en compte se fait par la modification des valeurs de h_{int} et h_{ext} à la face, que l’on nommera **surcharge**.

Ces valeurs sont habituellement calculées par le solveur à chaque itération. Il faut donc veiller à les surcharger une fois qu’elles ont été définies par le solveur mais avant que la résolution de la température ne soit effectuée.

La Figure A.2 illustre les appels des différentes routines nécessaires à la résolution du calcul. La routine `caltri` appelle la routine `tridim`, qui permet entre autre de définir la valeur de h_{int} . Elle appelle ensuite la routine `scalai` qui permet de prendre en compte les fichiers utilisateurs pour les termes sources de scalaires `ustssc`. La routine `caltri` résout ensuite le système linéaire relatif à l’équation de l’énergie.

La surcharge est donc réalisée au niveau de la routine `ustssc` qui est définie dans le fichier `cs_user_source_terms.f90`. Elle passe par une sélection de faces de bord, la création d’un tableau contenant les nouvelles valeurs puis l’utilisation de la fonction de couplage `cs_ic_set_exhcoeff`⁵ qui permet de prendre en considération la mise à jour.

A.3.4 Communication entre *Code_Saturne* et les métamodèles

Lors de la simulation de la configuration ECH-3D, les valeurs du coefficient de perte de charge et du coefficient d’échange de chaque canal sont modifiées à chaque pas de temps en fonction du nombre de Reynolds du canal.

La surcharge du coefficient d’échange s’effectue dans le fichier utilisateur `cs_user_source_terms.f90` et la modification de la perte de charge dans le fichier `cs_user_head_losses.c`. Cette dernière se fait en indiquant la valeur d’un coefficient $\vec{c}ku$ pour chaque cellule, défini comme :

$$\vec{c}ku = \frac{1}{2} \frac{C_f}{D_H} \vec{u} \quad (\text{A.62})$$

et le terme source de gradient de pression devient :

$$\vec{\nabla}P = -\rho_h \vec{c}ku |\vec{u}| \quad (\text{A.63})$$

Afin de récupérer la valeur des coefficients, une communication doit être réalisée entre *Code_Saturne* et les métamodèles. Ceux-ci reposent sur le code de statistique R.

5. Attention, dans la version 5.2.0 de *Code_Saturne* cette fonction se nomme désormais `cs_ic_field_set_exhcoeff`

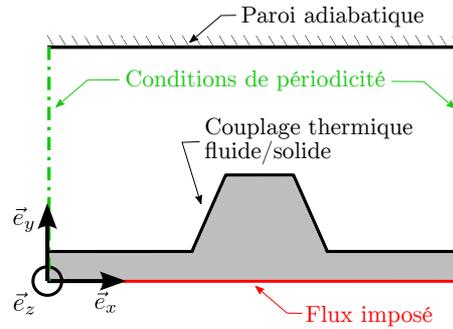


Figure A.3 – Les conditions de périodicité sont en vert.

Ainsi la prédiction des observations par les métamodèles se fait par l'intermédiaire d'un script `predict.R` qui peut être appelé en mode console grâce à la commande `"Rscript predict.R"`.

Il est donc envisageable de réaliser un *call system* depuis *Code_Saturne* avec la commande précédente. Cela ne pose pas de soucis pour la mise à jour de la perte de charge, les *call system* étant facilement réalisables en langage C. La mise à jour du coefficient d'échange est moins aisée car il est plus complexe de réaliser ce type d'opérations en Fortran. Une fonction a été définie dans le fichier `cs_user_extra_operations.c`, réalisant cet appel au système. Cette fonction C est alors exécutée en tant que routine dans le fichier Fortran.

L'échange d'informations (nombre de Reynolds \leftrightarrow coefficients) passe par des opérations de lecture/écriture dans des fichiers textes.

A.4 Mise en données de la périodicité

La considération d'un seul motif, lors d'une répétition dans la direction de l'écoulement, impose d'utiliser une condition de périodicité selon \vec{e}_x , représentée par le trait discontinu vert sur la Figure A.3. L'hypothèse de périodicité est valable en régime permanent, après établissement des conditions d'entrées et pour des coefficients physiques (ρ , c_p) constants.

A.4.1 Champ de vitesse

Le champ de vitesse permanent est usuellement considéré périodique après cinq à huit motifs (Rau et al., 1998). Le pas séparant deux motifs est L . Cela revient à dire pour le vecteur vitesse \vec{u} :

$$\vec{u}(x, y) = \vec{u}(x + L, y) \quad (\text{A.64})$$

Les champs de pression et de température ne deviennent, eux, jamais périodiques.

A.4.2 Champ de pression

En considérant les travaux de Patankar et al. (1977), on décompose la pression P en une partie périodique \hat{P} et une partie qui décroît linéairement dans le sens de l'écoulement :

$$P(x, y) = -a_P x + \hat{P}(x, y) \quad (\text{A.65})$$

avec

$$\begin{aligned}\widehat{P}(x, y) &= \widehat{P}(x + L, y) \\ a_P &= \frac{P(x, y) - P(x + L, y)}{L}\end{aligned}$$

En insérant l'Eqn. (A.65) dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement Eqn. (A.2) (en régime permanent et sans flottabilité), un terme source apparaît (en rouge dans l'équation), permettant de résoudre le problème sur la variable \widehat{P} :

$$\vec{\text{div}}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -a_P \vec{e}_x - \vec{\nabla} \widehat{P} + \vec{\text{div}} \left(\vec{\tau} \right) \quad (\text{A.66})$$

A.4.3 Champ de température

La condition de **densité de flux constante imposée** permet de réaliser la même décomposition pour la température :

$$T(x, y) = a_T x + \widehat{T}(x, y) \quad (\text{A.67})$$

avec

$$\widehat{T}(x, y) = \widehat{T}(x + L, y)$$

L'expression du gradient de température après décomposition devient :

$$\vec{\nabla} T(x, y) = \vec{\nabla} \widehat{T}(x, y) + a_T \vec{e}_x \quad (\text{A.68})$$

En insérant l'Eqn. (A.67) dans l'équation de conservation de l'énergie Eqn. (A.3) (en régime permanent), un terme source S_T apparaît permettant la résolution du problème⁶ sur la variable \widehat{T} :

$$c_p \text{div} \left(\rho \widehat{T} \vec{u} \right) = -\text{div} \left(\vec{\varphi}_{\widehat{T}} \right) - c_p \underbrace{\text{div}(\rho \vec{u} a_T x)}_{S_T} \quad (\text{A.69})$$

L'hypothèse d'incompressibilité conduit à :

$$S_T = c_p a_T x \text{div}(\rho \vec{u}) + \vec{\nabla} a_T x \cdot \rho \vec{u} c_p \quad (\text{A.70})$$

$$= a_T \vec{e}_x \cdot \rho \vec{u} c_p \quad (\text{A.71})$$

$$= a_T \rho u_x c_p \quad (\text{A.72})$$

L'expression de a_T s'obtient via un bilan sur l'ensemble du domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \text{div} \left(\rho c_p \widehat{T} \vec{u} \right) dV = - \int_{\Omega} \text{div} \left(\vec{\varphi}_{\widehat{T}} \right) dV - \int_{\Omega} a_T \rho u_x c_p dV \quad (\text{A.73})$$

qui devient, grâce au théorème de Green-Ostrogradski :

$$\int_{\partial \Omega} \rho c_p \widehat{T} \vec{u} \cdot d\vec{S} = - \int_{\partial \Omega} \vec{\varphi}_{\widehat{T}} \cdot d\vec{S} - \int_{\Omega} a_T \rho u_x c_p dV \quad (\text{A.74})$$

6. Les dépendances en x et y ont été enlevées pour plus de clarté.

Le terme de gauche s'annule, à cause de la condition de périodicité. Le premier terme de droite vaut φS et le dernier terme de cette équation se calcule comme :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} a_T \rho u_x c_p dV &= a_T c_p \int_{\Omega} \rho u_x dV \\ &= a_T c_p \int_{x=0}^L \int_S \rho u_x dS dx \\ &= a_T c_p \dot{m} L \end{aligned}$$

Ainsi l'expression de a_T est :

$$a_T = \frac{\varphi S}{\dot{m} c_p L} \quad (\text{A.75})$$

A.4.4 Application dans *Code_Saturne*

La condition de périodicité appliquée aux faces latérales du domaine de calcul (voir Figure 4.1(b)), permet, par l'utilisation de cellules fantômes, d'assurer une continuité de transmission de l'information pour \vec{u} , \hat{P} et \hat{T} . L'implémentation des termes sources se fait dans le fichier utilisateur `cs_user_source_terms.f90`.

Le coefficient a_P , intervenant dans le terme source pour la pression, est calculé à l'itération courante n en utilisant les informations de l'itération précédente $n - 1$:

$$a_P^n = a_P^{n-1} + r \rho \frac{2(U_b^n - U_{ref}) - (U_b^{n-1} - U_{ref})}{\Delta t} \quad (\text{A.76})$$

avec U_b^n la vitesse moyenne (*bulk velocity*) de l'écoulement à l'itération courante, U_b^{n-1} la vitesse moyenne de l'écoulement à l'itération précédente, U_{ref} la vitesse moyenne cible (de référence), Δt le pas temps et r un coefficient de relaxation pris à 0.5. Le terme source (dans la direction \vec{e}_x) est alors implémenté, par chaque cellule `iel`, grâce à la commande :

$$\text{crvexp}(1, \text{iel}) = -\text{volume}(\text{iel}) * a_P$$

Le terme source de l'équation de conservation de l'énergie fait intervenir le calcul d'une divergence. Il est possible d'utiliser l'hypothèse de incompressibilité (forme non conservative) et d'implémenter directement l'équation Eqn. (A.72). Cependant, cela peut induire un biais numérique. Une fonction `divmas` permet de calculer cette divergence. Le terme source s'implémente via la commande :

$$\text{crvexp}(1, \text{iel}) = -\text{divmass}(\dot{m} c_p a_T x)$$

Cette variante à le mérite d'être conservative en temps et espace pour la température.

Sommaire

B.1	Formulation	218
B.1.1	Interpolation du champ de déplacement	218
B.1.2	Condition d'interpolation	219
B.1.3	Condition pour le traitement de plans de glissement	219
B.1.4	Calcul des poids	222
B.2	Procédure de déformation	222
B.3	Choix des fonctions	224
B.3.1	Fonctions à base radiale	224
B.3.2	Fonctions de distance	225
B.4	Algorithme glouton et amélioration des performances	225
B.4.1	Revue de la littérature	226
B.4.2	Proposition d'un algorithme amélioré	227
B.4.3	Restriction de l'espace déformé	230
B.5	Qualité de la déformation	231
B.6	Valorisation	233
B.7	Liste des symboles	233

Suite à leur introduction pour traiter les problèmes d'interactions fluides/structures (Jakobsson and Amoignon, 2007; Rendall and Allen, 2008), les fonctions à base radiale (*Radial Basis Functions* - RBF) sont devenues de plus en plus populaires dans le domaine de la déformation de maillage (*morphing*). La méthode interpole le déplacement de **points de contrôle** (*control points*) aux **nœuds** (*nodes*) du maillage en créant un champ de déplacement obtenu par la résolution d'un système linéaire.

Cette annexe présente la formulation générale de la méthode de déformation de maillage par RBF ainsi que les contributions apportées durant cette thèse qui sont :

- l'ajout de conditions permettant de traiter des plans de glissement, détaillé Section B.1.3. On définit un plan de glissement comme un plan sur lequel les nœuds du maillage doivent rester, tout en ayant la possibilité de s'y déplacer.

— l'amélioration des performances de la méthode, détaillée Section B.4.

Les différents symboles utilisés sont listés en fin d'annexe (page 233).

B.1 Formulation

B.1.1 Interpolation du champ de déplacement

La méthode de déformation par RBF est dite "nœuds à nœuds" car elle ne requiert aucune information à propos de la connectivité du maillage. Ainsi il s'agit d'une méthode polyvalente permettant de traiter de manière identique des maillages fluides (pour la CFD), solides (pour la mécanique des structures), structurés ou non-structurés. La méthode produit des déformations robustes (Gillebaart et al., 2016) et des maillages de bonne qualité (Mocanu et al., 2013; Gillebaart et al., 2016).

La méthode propage par interpolation le déplacement connu des points de contrôle aux nœuds du maillage. La fonction interpolée est le déplacement \vec{s} d'un nœud, définie comme la somme pondérée de fonctions à base radiale soit :

$$\vec{s}(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{N_c} \phi(d(\vec{x} - \vec{x}_{cj})) \vec{\gamma}_j \quad (\text{B.1})$$

avec \vec{x} la position initiale (*i.e.* avant déformation) des nœuds, N_c est le nombre de points de contrôle, ϕ est la fonction à base radiale choisie, d est une fonction mesurant la distance entre deux positions, \vec{x}_{cj} et $\vec{\gamma}_j$ sont la position initiale et le poids du $j^{\text{ème}}$ point de contrôle.

Dans l'équation précédente, seules les positions initiales apparaissent explicitement. Les informations concernant les déplacements connus des points de contrôle et les autres contraintes sont contenues dans les poids $\{\vec{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq N_c}$. Ainsi lorsque ceux-ci sont connus, le champ de déplacement \vec{s} l'est également.

Dans la suite, l'ensemble des points de contrôle est divisé en deux sous-ensembles et différentes conditions seront appliquées à chacun d'eux :

- une condition d'interpolation associée à des points mobiles (*moving points*),
- des conditions permettant de traiter les plans de glissement, associées à des points glissants (*sliding points*).

Soit $N_m \leq N_c$ le nombre de points mobiles dont le déplacement complet est connu. On considère que les points fixes (*fixed points*) sont des points mobiles à déplacement nul. Soit $N_s = N_c - N_m$ le nombre de points glissants dont le mouvement est contraint à rester sur un plan. L'ensemble des points de contrôle est supposé ordonné, démarrant par les points mobiles (de 1 à N_m), suivis des points glissants (de $N_m + 1$ à $N_m + N_s = N_c$). On définit également la base de l'espace Euclidien à trois dimensions ($\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$)

B.1.2 Condition d'interpolation

Le déplacement de chaque point mobile doit satisfaire une condition d'interpolation vectorielle, définie comme :

$$\forall i \in [1, N_m], \quad \vec{s}(\vec{x}_{mi}) = \vec{s}_{mi} \quad (\text{B.2})$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=1}^{N_c} \phi(d(\vec{x}_{mi} - \vec{x}_{cj})) \vec{\gamma}_j = \vec{s}_{mi} \quad (\text{B.3})$$

$$\Leftrightarrow_{\forall k \in [1,3]} \sum_{j=1}^{N_c} \phi(d(\vec{x}_{mi} - \vec{x}_{cj})) \vec{\gamma}_j \cdot \vec{e}_k = \vec{s}_{mi} \cdot \vec{e}_k \quad (\text{B.4})$$

avec \vec{s}_{mi} le déplacement connu du i^{eme} point mobile et dont la position initiale est \vec{x}_{mi} . L'Eqn. (B.4) peut être ré-écrite sous forme matricielle comme :

$$\forall k \in [1, 3], \quad \Phi^m \Gamma_k = S_k \quad (\text{B.5})$$

avec la matrice Φ^m et les vecteurs Γ_k et S_k définis comme :

$$\Phi^m = [\phi(d(\vec{x}_{mi} - \vec{x}_{cj}))]_{1 \leq i \leq N_m, 1 \leq j \leq N_c} \quad (\text{B.6})$$

$$= [\phi(d(\vec{x}_{ci} - \vec{x}_{cj}))]_{1 \leq i \leq N_m, 1 \leq j \leq N_c} \quad (\text{B.7})$$

$$\forall k \in [1, 3], \quad \Gamma_k = [\vec{\gamma}_i \cdot \vec{e}_k]_{1 \leq i \leq N_c} \quad (\text{B.8})$$

$$S_k = [\vec{s}_{mi} \cdot \vec{e}_k]_{1 \leq i \leq N_m} \quad (\text{B.9})$$

Lorsque $N_m = N_c$, Φ^m est une matrice carrée, les poids $\{\vec{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq N_c}$ sont solutions du système linéaire défini par l'Eqn. (B.5). Il s'agit alors de la formulation classique proposée dans la littérature lorsque les poids de chaque direction de l'espace Γ_k sont des vecteurs indépendants.

B.1.3 Condition pour le traitement de plans de glissement

On rappelle qu'un plan de glissement impose aux nœuds d'avoir un déplacement contenu dans celui-ci. Le déplacement des points glissants doit satisfaire trois conditions scalaires, associées aux directions normale et tangentes des plans de glissement. Sans perte de généralité, un seul plan est considéré pour la définition des conditions. Soient \vec{n} le vecteur normal unitaire au plan et \vec{t} un vecteur tangent unitaire tel que $\vec{t} \cdot \vec{n} = 0$. Le second vecteur tangent est défini comme $\vec{b} = \vec{n} \wedge \vec{t}$.

B.1.3.1 Annuler le déplacement normal

La première condition est la plus évidente. Elle contraint le déplacement de chaque point glissant dans la direction normale au plan à être nul :

$$\forall i \in [1, N_s], \quad \vec{s}(\vec{x}_{si}) \cdot \vec{n} = 0 \quad (\text{B.10})$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=1}^{N_c} \phi(d(\vec{x}_{si} - \vec{x}_{cj})) \vec{\gamma}_j \cdot \left\{ \sum_{k=1}^3 n_k \vec{e}_k \right\} = 0 \quad (\text{B.11})$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=1}^3 n_k \left\{ \sum_{j=1}^{N_c} \phi(d(\vec{x}_{si} - \vec{x}_{cj})) \vec{\gamma}_j \cdot \vec{e}_k \right\} = 0 \quad (\text{B.12})$$

avec \vec{x}_{si} la position initiale du i^{eme} point glissant et (n_1, n_2, n_3) sont les composantes du vecteur normal \vec{n} dans la base $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Elle peut être ré-écrite sous forme matricielle comme :

$$\sum_{k=1}^3 n_k \Phi^s \Gamma_k = 0_s \quad (\text{B.13})$$

avec 0_s le vecteur nul dans \mathbb{R}^{N_s} et la matrice Φ^s définie comme :

$$\Phi^s = [\phi(d(\vec{x}_{si} - \vec{x}_{cj}))]_{1 \leq i \leq N_s, 1 \leq j \leq N_c} \quad (\text{B.14})$$

$$= [\phi(d(\vec{x}_{c(N_m+i)} - \vec{x}_{cj}))]_{1 \leq i \leq N_s, 1 \leq j \leq N_c} \quad (\text{B.15})$$

B.1.3.2 Annuler la contribution tangentielle des points glissants

Afin que les nœuds du maillage puissent bouger librement sur le plan de glissement et que leur déplacement puisse être impacté par d'autres contraintes, il convient d'annuler la contribution des points glissants au déplacement dans les directions tangentielles au plan. Ainsi la seconde condition scalaire sur les points glissants s'écrit :

$$\forall i \in [N_m + 1, N_m + N_s], \quad \vec{\gamma}_i \cdot \vec{t} = 0 \quad (\text{B.16})$$

$$\Leftrightarrow \vec{\gamma}_i \cdot \left\{ \sum_{k=1}^3 t_k \vec{e}_k \right\} = 0 \quad (\text{B.17})$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=1}^3 t_k \vec{\gamma}_i \cdot \vec{e}_k = 0 \quad (\text{B.18})$$

avec (t_1, t_2, t_3) les composantes du vecteur \vec{t} dans la base $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Elle se ré-écrit :

$$\sum_{k=1}^3 t_k \Phi^t \Gamma_k = 0_s \quad (\text{B.19})$$

avec la matrice Φ^t définie comme :

$$\Phi^t = (0_{s \times m} \quad \mathbb{I}_{s \times s}) \in \mathbb{R}^{N_s \times N_c} \quad (\text{B.20})$$

$0_{s \times m}$ est une matrice nulle définie dans $\mathbb{R}^{N_s \times N_m}$ et $\mathbb{I}_{s \times s}$ est la matrice identité dans $\mathbb{R}^{N_s \times N_s}$.

La dernière condition répète la seconde dans la direction de l'autre vecteur tangent au plan :

$$\sum_{k=1}^3 b_k \Phi^t \Gamma_k = 0_s \quad (\text{B.21})$$

avec (b_1, b_2, b_3) les composantes du vecteur \vec{b} dans la base $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$.

B.1.3.3 Plans de glissement mobiles

Il est également possible de considérer un plan de glissement dont la position et/ou l'orientation auront changer après la déformation.

Soit un plan (A) dont l'état initial (avant déformation) est défini par un vecteur normal¹ \vec{n} et un centre de référence \vec{x}_I . Son état après déformation, noté $(A)^*$, est tel que

1. et les deux vecteurs tangentiels au plan \vec{t} et \vec{b} .

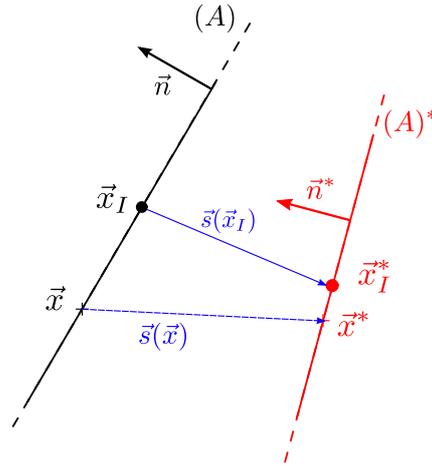


Figure B.1 – Illustration du plan de glissement mobile. L'état initial est en noir et l'état final en rouge

sa normale² devient \vec{n}^* et son centre de référence \vec{x}'_I . Ces informations sont résumées sur la Figure B.1. L'état du plan après la déformation est connu.

On cherche à déterminer la condition sur le déplacement à imposer à tous nœuds \vec{x} du plan (A) pour que leur état après la déformation \vec{x}^* soit contenu dans le plan (A)*. Cela revient à écrire :

$$(\vec{x}^* - \vec{x}'_I) \cdot \vec{n}^* = 0 \quad (\text{B.22})$$

La relation de Chasles permet d'écrire que :

$$(\vec{x}^* - \vec{x}'_I) = (\vec{x}^* - \vec{x}) + (\vec{x} - \vec{x}_I) + (\vec{x}_I - \vec{x}'_I) \quad (\text{B.23})$$

Or

$$\vec{s}(\vec{x}_I) = (\vec{x}'_I - \vec{x}_I) \quad (\text{B.24})$$

$$\vec{s}(\vec{x}) = (\vec{x}^* - \vec{x}) \quad (\text{B.25})$$

$$(\text{B.26})$$

Ainsi l'Eqn. (B.22) peut s'écrire :

$$(\vec{s}(\vec{x}) + (\vec{x} - \vec{x}_I) - \vec{s}(\vec{x}_I)) \cdot \vec{n}^* = 0 \quad (\text{B.27})$$

Finalement il vient que la condition à imposer aux nœuds du plan s'exprime en fonction de la nouvelle normale à celui ci comme :

$$\vec{s}(\vec{x}) \cdot \vec{n}^* = (\vec{x} - \vec{x}_I) \cdot \vec{n}^* - \vec{s}(\vec{x}_I) \cdot \vec{n}^* \quad (\text{B.28})$$

Si $\vec{s}(\vec{x}_I) = \vec{0}$, le second terme de droite de l'Eqn. (B.28) s'annule. Le mouvement du plan de glissement suit alors une rotation autour du centre de référence, dont l'angle est donné par le produit scalaire entre \vec{n}^* et \vec{n} . Si en plus la normale reste la même, l'Eqn. (B.28) dégénère en l'Eqn. (B.10).

Les conditions pour les directions tangentielles restent les mêmes, mais en utilisant les orientations finales \vec{t}^* et \vec{b}^* .

2. et les deux vecteurs tangentiels au plan deviennent \vec{t}^* et \vec{b}^* .

B.1.4 Calcul des poids

Ainsi, les poids $\{\vec{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq N_c}$ sont solutions d'un système linéaire de taille $(3N_c) \times (3N_c)$ assemblé à partir des équations (B.5), (B.13), (B.19) et (B.21) :

$$\begin{pmatrix} \Phi^m & 0_{m \times c} & 0_{m \times c} \\ 0_{m \times c} & \Phi^m & 0_{m \times c} \\ 0_{m \times c} & 0_{m \times c} & \Phi^m \\ n_1 \Phi^s & n_2 \Phi^s & n_3 \Phi^s \\ t_1 \Phi^t & t_2 \Phi^t & t_3 \Phi^t \\ b_1 \Phi^t & b_2 \Phi^t & b_3 \Phi^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ 0_s \\ 0_s \\ 0_s \end{pmatrix} \quad (\text{B.29})$$

avec $0_{m \times c}$ la matrice nulle définie dans $\mathbb{R}^{N_m \times N_c}$. Lorsque plusieurs plans de glissement sont considérés, les équations (B.13), (B.19) et (B.21) sont répétées en associant à chaque plan un triplet $(\vec{n}, \vec{t}, \vec{b})$ définissant son orientation. La matrice de gauche se nomme la **matrice d'interpolation** (*interpolation matrix*).

Contrairement à la formulation classique, lorsque des plans de glissement sont considérés, les vecteurs Γ_k sont couplés comme le montrent les trois dernières lignes de la matrice de gauche dans l'Eqn. (B.29). Cependant si seulement un plan de glissement est utilisé, une formulation non couplée est obtenue par le changement de base

$$(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3) = (\vec{n}, \vec{t}, \vec{b}) \quad (\text{B.30})$$

Les poids $\{\vec{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq N_c}$ sont alors solutions de trois systèmes linéaires de taille $N_c \times N_c$ définis par :

$$\begin{pmatrix} \Phi^m \\ \Phi^s \end{pmatrix} \Gamma_1 = \begin{pmatrix} S_1 \\ 0_s \end{pmatrix} \quad (\text{B.31})$$

$$\forall k \in [2, 3], \quad \begin{pmatrix} \Phi^m \\ 0_{s \times m} \mathbb{I}_{s \times s} \end{pmatrix} \Gamma_k = \begin{pmatrix} S_k \\ 0_s \end{pmatrix} \quad (\text{B.32})$$

L'Eqn. (B.31) peut être interprétée comme la formulation RBF classique projetée sur le vecteur normal du plan \vec{n} , en considérant les points glissants somme des points fixes. L'Eqn. (B.32) peut être considérée comme une formulation classique projetée sur \vec{t} (ou \vec{b}) et restreinte uniquement aux N_m points mobiles.

B.2 Procédure de déformation

L'Alg. 2 résume les différentes étapes permettant d'obtenir les positions finales des nœuds $\{\vec{x}_i^*\}_{1 \leq i \leq N}$ après la déformation à partir de leurs valeurs initiales $\{\vec{x}_i\}_{1 \leq i \leq N}$, de la position initiale des points de contrôles $\{\vec{x}_{ci}\}_{1 \leq i \leq N_c}$ du déplacement des points mobiles $\{\vec{s}_{mi}\}_{1 \leq i \leq N_m}$ et de l'orientation des plans de glissement $(\vec{n}, \vec{t}, \vec{b})$. La déformation d'un maillage par RBF est ainsi la conséquence de trois opérations. La première consiste à calculer les poids $\{\vec{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq N_c}$ en résolvant le système linéaire de l'Eqn. (B.29). Pour cela une factorisation LU (Press et al., 1992) est utilisée : dans un premier temps, la décomposition LU de la matrice d'interpolation est réalisée (*LU factor*) puis le système est résolu (*LU solve*). Les coûts numériques sont proportionnels à $\mathcal{O}\left(\frac{2}{3}(3N_c)^3 + \frac{1}{2}(3N_c)^2\right)$ pour la décomposition et à $\mathcal{O}(2(3N_c)^2)$ pour la résolution. La seconde opération est l'interpolation du déplacement des nœuds du maillage grâce à l'Eqn. (B.1) (ligne 5) dont

Algorithme 2 : Déformation du maillage - formulation CPU

-
- Input** : Position initiale des nœuds $\{\vec{x}_i\}_{1 \leq i \leq N}$
Input : Position initiale des points de contrôle $\{\vec{x}_{ci}\}_{1 \leq i \leq N_c}$
Input : Déplacement des points mobiles $\{\vec{s}_{mi}\}_{1 \leq i \leq N_m}$
Input : Orientation des plans de glissement des points glissants $\{(\vec{n}_i, \vec{t}_i, \vec{b}_i)\}_{1 \leq i \leq N_s}$
Output : Position finale des nœuds $\{\vec{x}_i^*\}_{1 \leq i \leq N}$
- 1 *Calcul des poids* $\{\vec{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq N_c}$:
 - 2 Assemblage de la matrice d'interpolation et du membre de droite de l'Eqn. (B.29)
 - 3 Résolution de l'Eqn. (B.29) afin d'obtenir les poids $(\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3)$
 - 4 *Interpolation du déplacement des nœuds* :
 - 5 $\forall i \in [1, N], \quad \vec{s}(\vec{x}_i) = \sum_{j=1}^{N_c} \phi(d(\vec{x}_i - \vec{x}_{cj})) \vec{\gamma}_j$
 - 6 *Mise à jour de la position des nœuds* :
 - 7 $\forall i \in [1, N], \quad \vec{x}_i^* = \vec{x}_i + \vec{s}(\vec{x}_i)$
-

le coût numérique est de l'ordre de $\mathcal{O}(6N \times N_c)$. Enfin la position des nœuds suite à leur déplacement est mise à jour (ligne 7). Le coût de cette opération est proportionnel à $\mathcal{O}(3N)$.

L'Alg. 2 présente la formulation dite "CPU" (Gillebaart et al., 2016) car les opérations des lignes 5 et 7 sont implémentées numériquement en bouclant sur tous les nœuds du maillage. La valeur des fonctions à base radiale est évaluée à chaque fois. Une autre formulation possible, dite "mémoire", est présentée par l'Alg. 3. La différence réside dans la réalisation de l'interpolation. Dans ce cas, la matrice de déplacement des nœuds S^N est obtenue en multipliant la matrice de dépendance entre les nœuds du maillage et les points de contrôle Φ avec la matrice des poids Γ^N . Ils sont définis comme :

$$S^N = [\vec{s}(\vec{x}_i) \cdot \vec{e}_k]_{1 \leq i \leq N, 1 \leq k \leq 3} \quad (\text{B.33})$$

$$\Phi = [\phi(d(\vec{x}_i - \vec{x}_{cj}))]_{1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq N_c} \quad (\text{B.34})$$

$$\Gamma^N = [\vec{\gamma}_i \cdot \vec{e}_k]_{1 \leq i \leq N_c, 1 \leq k \leq 3} \quad (\text{B.35})$$

Pour une unique déformation (*i.e.* une application de l'Alg. 2) les deux formulations précédentes ont un coût numérique³ équivalent, quoique légèrement inférieur pour l'approche mémoire (Gillebaart et al., 2016). Dans les cas où plusieurs applications d'une déformation sont réalisées (dans le cadre du simulation d'interactions fluide/structure par exemple) alors la formulation mémoire est clairement plus avantageuse. En effet, l'évaluation de la valeur des fonctions à base radiale n'est réalisée qu'au moment de l'assemblage de la matrice Φ et non plus pour chaque nœud.

Cependant pour des maillages importants, la taille de cette matrice augmente et son stockage numérique peut devenir problématique. Gillebaart et al. (2016) proposent une parallélisation de ce stockage afin de pallier cette difficulté.

3. exprimé en opérations flottantes par seconde.

Algorithme 3 : Déformation du maillage - formulation mémoire

-
- Input** : Position initiale des nœuds $\{\vec{x}_i\}_{1 \leq i \leq N}$
Input : Position initiale des points de contrôle $\{\vec{x}_{ci}\}_{1 \leq i \leq N_c}$
Input : Déplacement des points mobiles $\{\vec{s}_{mi}\}_{1 \leq i \leq N_m}$
Input : Orientation des plans de glissement des points glissants $\{(\vec{n}_i, \vec{t}_i, \vec{b}_i)\}_{1 \leq i \leq N_s}$
Output : Position finale des nœuds $\{\vec{x}_i^*\}_{1 \leq i \leq N}$
- 1 *Calcul des poids* $\{\tilde{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq N_c}$:
 - 2 Assemblage de la matrice d'interpolation et du membre de droite de l'Eqn. (B.29)
 - 3 Résolution de l'Eqn. (B.29) afin d'obtenir les poids $(\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3)$
 - 4 *Interpolation du déplacement des nœuds* :
 - 5 $S^N = \Phi \Gamma^N$
 - 6 *Mise à jour de la position des nœuds* :
 - 7 $X^* = X + S^N$
-

B.3 Choix des fonctions

Les résultats de la déformation sont grandement dépendants de la fonction à base radiale et de la fonction de distance. Cette section présente quelques informations sur ces fonctions.

B.3.1 Fonctions à base radiale

Une fonction à base radiale est une fonction $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ "radialisée" par l'utilisation d'une fonction distance d (Buhmann, 2000). Il existe plusieurs fonctions dans la littérature (Buhmann, 2000; Wendland, 1995) divisées en deux groupes : les fonctions à support global et les fonctions à support compact dont le Tableau B.1 présente quelques exemples. Les fonctions à support global ont été beaucoup utilisées pour la déformation de maillage dans des applications d'aéronautique externe (Jakobsson and Amoignon, 2007; Rendall and Allen, 2008; Biancolini et al., 2014). Cependant, pour des applications en milieux confinés (turbomachine, échangeurs de chaleur), des études ont montré que les fonctions à support compact sont mieux adaptées (Mocanu et al., 2013; Rozenberg et al., 2014). Elles se définissent comme :

$$\phi(d) = \begin{cases} \phi(d) & 0 \leq d \leq 1, \\ 0 & d > 1 \end{cases}. \quad (\text{B.36})$$

avec d une fonction distance normalisée. Ces fonctions décroissent de manière monotone depuis $d = 0$ et sont nulles lorsque la distance normalisée est supérieure à l'unité. Elles présentent donc l'avantage de confiner naturellement la déformation. Au contraire, les fonctions à support global impactent tout le domaine conduisant à des matrices d'interpolation mal conditionnées et des systèmes linéaires difficilement résolubles (de Boer et al., 2007).

Dans les présents travaux, la fonction Wendland C^2 est utilisée car elle est parmi les plus efficaces pour les applications CFD (Rozenberg et al., 2014) et conduit à des déformations stables numériquement (Mocanu et al., 2013; de Boer et al., 2007).

Fonctions à support global	
<i>Name</i>	$\phi(\ \vec{\delta}\)$
Thin plate spline	$x^2 \log(\ \vec{\delta}\)$
Bi-harmonique multiquadratique	$\sqrt{1 + \ \vec{\delta}\ ^2}$
Bi-harmonique quadratique	$1 + \ \vec{\delta}\ ^2$
Gaussienne	$e^{-\ \vec{\delta}\ ^2}$
Fonctions à support compact	
<i>Name</i>	$\phi(d), d = \ \vec{\delta}\ /r_0$
Wendland C^0	$(1 - d)^2$
Wendland C^2	$(1 - d)^4(4d + 1)$
Wendland C^4	$\frac{1}{3}(1 - d)^6(35d^2 + 18d + 3)$

Tableau B.1 – Exemples de fonctions à base radiale.

B.3.2 Fonctions de distance

La fonction distance d dans les applications de déformation de maillage est une fonction de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$. Usuellement la distance Euclidienne normalisée est utilisée. Soit $\vec{\delta} = \vec{x}_i - \vec{x}_j$, le vecteur distance entre deux positions, on a :

$$d(\vec{\delta}) = \frac{1}{r_0} \|\vec{\delta}\| \quad (\text{B.37})$$

avec r_0 le rayon d'action (*support radius*). L'influence de la déformation est alors isotrope.

Il est possible d'utiliser une fonction distance biaisée afin de privilégier une direction de déformation. Un exemple est proposé par Yang et al. (2016). En utilisant une matrice de rotation \mathbf{L} et une matrice d'échelle \mathbf{D} , la fonction distance est modifiée :

$$d(\vec{\delta}) = \sqrt{\vec{\delta}^T \mathbf{L}^T \mathbf{D}^2 \mathbf{L} \vec{\delta}} \quad (\text{B.38})$$

Il est alors possible d'obtenir des déformations dans des directions préférentielles.

Rozenberg et al. (2014) proposent également de périodiser la déformation en périodisant la fonction distance via la modification du vecteur $\vec{\delta}$. Pour une déformation dans la direction \vec{e}_2 par exemple, le vecteur $\vec{\delta}$ devient :

$$\vec{\delta} = \begin{pmatrix} \delta_1 \\ l/\pi \sin(\delta_2 \pi/l) \\ \delta_3 \end{pmatrix} \quad (\text{B.39})$$

avec l la longueur de la périodicité.

B.4 Algorithme glouton et amélioration des performances

Le nombre ainsi que la position des points de contrôle sont de première importance pour l'efficacité, la précision et le coût de la méthode. De nombreux points de contrôles amélioreraient vraisemblablement la précision, mais l'application de la méthode serait plus coûteuse. Il faut également considérer que des points de contrôle trop proches les

Algorithme 4 : Algorithme glouton standard adapté de Rendall and Allen (2009)

Input : Position initiale des points de contrôle $\{\vec{x}_{ci}\}_{1 \leq i \leq N_c}$
Input : Déplacement des points mobiles $\{\vec{s}_{mi}\}_{1 \leq i \leq N_m}$
Input : Orientation des plans de glissement des points glissants $\{(\vec{n}_i, \vec{t}_i, \vec{b}_i)\}_{1 \leq i \leq N_s}$
Output : Sous-ensemble de points de contrôle

- 1 Initialisation du sous-ensemble
- 2 **repeat**
- 3 En utilisant l’Alg. 2, déplacer les points de contrôle considérés comme des *noeuds* et en utilisant les points du sous-ensemble en tant que *points de contrôle*
- 4 *Calcul des erreurs* :
 - 5 $\forall i \in [1, N_m]$, évaluer $\|(\vec{x}_{mi}^* - \vec{x}_{mi}) - \vec{s}_{mi}\|$
 - 6 $\forall i \in [1, N_s]$, évaluer $|(\vec{x}_{si}^* - \vec{x}_{si}) \cdot \vec{n}|$
- 7 Trouver le point avec l’*erreur* maximale
- 8 **if** *erreur* > *tolerance* **then**
- 9 Ajouter le point au sous-ensemble
- 10 **end**
- 11 **until** *erreur* \leq *tolerance*;

uns des autres peuvent conduire à un mauvais conditionnement des matrices Φ^m et Φ^s , les valeurs données par la fonction distance d étant trop faibles (Rendall and Allen, 2010; Rozenberg et al., 2014).

B.4.1 Revue de la littérature

Il y a donc tout intérêt à réduire le nombre de points de contrôle utilisés par la méthode. Jakobsson and Amoignon (2007) ont été les premiers à proposer de réduire ce nombre en considérant un ensemble de points bien répartis sur la surface à déformer (un profil d’aile). Cette distribution était suffisante pour décrire les déplacements.

Rendall and Allen (2009) ont proposé une méthode de sélection par algorithme glouton (*greedy algorithm*) afin de construire un sous-ensemble optimal de points de contrôle. L’algorithme, détaillé Alg. 4 ajoute de manière itérative le point ayant l’erreur d’interpolation maximale. L’idée principale est de calculer les poids puis le champs de déplacement en utilisant le sous-ensemble actuel, et de déplacer les autres points de contrôle. Le déplacement des points du sous-ensemble est exactement interpolé⁴ et un point de contrôle non sélectionné possède une erreur d’interpolation maximale. Si l’erreur est supérieure à une tolérance, alors il est ajouté au sous-ensemble puis on répète la procédure. La convergence de cette méthode a été prouvée mathématiquement par Schaback and Wendland (2000). Cet algorithme a ensuite été repris par plusieurs auteurs (Rendall and Allen, 2010; Michler, 2011; Sheng and Allen, 2012; Wang et al., 2015).

En l’absence de conditions de glissement, les poids sont découplés dans chaque direction spatiale tout comme la résolution de Eqn. (B.29). Michler (2011) propose ainsi un algorithme glouton uni-variant. Pour chaque direction, un ensemble optimal de points de contrôle est obtenu grâce à l’algorithme glouton de Rendall and Allen (2009). Le calcul des

4. comme le définit l’Eqn. (B.2)

poids ainsi que les opérations d'interpolation et de mise à jour sont réalisées de manière indépendante dans chacune de ces directions. Il démontre alors que le nombre de points de contrôle est significativement réduit par rapport à la méthode initiale.

Wang et al. (2015) proposent d'ajouter plusieurs points de contrôle à chaque itération de l'algorithme glouton. Ainsi le processus de sélection est accéléré. Cependant, cela se traduit généralement par une augmentation du nombre de points sélectionnés et donc par une augmentation du coût numérique pour la réalisation des opérations d'interpolation et de mise à jour. C'est également ce que remarquent Sheng and Allen (2012).

B.4.2 Proposition d'un algorithme amélioré

Comme l'ont souligné Gillebaart et al. (2016), la sélection d'un sous-ensemble optimal de points de contrôle est une étape qui reste limitante pour l'efficacité de la méthode de déformation. En effet, toutes les autres opérations sont parallélisables. Les présents travaux proposent donc l'algorithme 5, tirant partie de l'ajout itératif des points de contrôle au sous-ensemble pour accélérer la construction.

B.4.2.1 Formulation mémoire

Une première amélioration consiste à ne pas évaluer les fonctions à base radiale à chaque itération grâce à une formulation mémoire. Pour cela, avant la boucle de l'algorithme glouton (Alg. 5-line 8), la matrice des évaluations des fonctions à base radiale Φ^c est construite :

$$\Phi^c = [\phi(d(\vec{x}_{ci} - \vec{x}_{cj}))]_{1 \leq i \leq N_c, 1 \leq j \leq N_c} \quad (\text{B.40})$$

Lors des phases de déplacement des points de contrôle (Alg. 5-lignes 4 et 19), la matrice d'interpolation⁵ utilisée est construite en ré-indexant les valeur de Φ^c en fonction des points dans le sous-ensemble. Ainsi, le nombre d'évaluations des fonctions à base radiale reste N_c^2 quelque soit le nombre d'itérations de l'algorithme. Cela permet de réduire le coût numérique, le coût de ré-indexage étant très inférieur au coût d'une évaluation. Le coût de stockage de cette matrice n'est pas problématique ici car le nombre de points de contrôle est rarement supérieur à quelques milliers. Gillebaart et al. (2016) l'estiment à 300 *mo*.

B.4.2.2 Résolution itérative

Lors de l'exécution de l'algorithme glouton, la matrice d'interpolation et le membre de droite de l'Eqn. (B.29) croissent itérativement. Avec l'algorithme standard (Alg. 4), le système linéaire est construit et résolu entièrement à chaque itération. Lorsque le nombre de points de contrôle dans le sous-ensemble est important, cette étape devient coûteuse numériquement. L'algorithme 5 propose d'utiliser cet ajout itératif pour réduire le coût de résolution du système linéaire.

A chaque itération de l'algorithme glouton, le système linéaire Eqn. (B.29), qui peut se ré-écrire :

$$\Phi^\bullet (\Gamma^g)' = S^g \quad (\text{B.41})$$

est résolu pour obtenir les poids $(\Gamma^g)'$ du sous-ensemble de points de contrôle de taille N_g . Comme l'algorithme ajoute un point de contrôle à la fois au cours des itérations, une ligne et une colonne sont ajoutées à la matrice Φ^\bullet et au membre de droite S^g . L'idée principale

5. voir Eqn. (B.29)

Algorithme 5 : Algorithme glouton amélioré

Input : Position initiale des points de contrôle $\{\vec{x}_{ci}\}_{1 \leq i \leq N_c}$
Input : Déplacement des points mobiles $\{\vec{s}_{mi}\}_{1 \leq i \leq N_m}$
Input : Orientation des plans de glissement des points glissants $\{(\vec{n}_i, \vec{t}_i, \vec{b}_i)\}_{1 \leq i \leq N_s}$
Input : Nombre de points de contrôle dans le sous-ensemble avant *restart* : N_{res}
Output : Sous-ensemble de points de contrôle de taille N_g

- 1 Initialisation du sous-ensemble de points de contrôle de taille N_g
- 2 Initialisation de l'ensemble de boîtes englobantes
- 3 Construction de la matrice Φ^c définie Eqn. (B.40)
- 4 En utilisant l'Alg. 3 déplacer les points de contrôles et stocker la factorisation LU de la matrice d'interpolation et les poids comme $(\Gamma^g)'$
- 5 $\forall i \in [1, N_m]$, évaluer $\|(\vec{x}_{mi}^* - \vec{x}_{mi}) - \vec{s}_{mi}\|$
- 6 $\forall i \in [1, N_s]$, évaluer $|(\vec{x}_{si}^* - \vec{x}_{si}) \cdot \vec{n}|$
- 7 Trouver le point de contrôle maximisant l'*erreur*
- 8 **repeat** /* Greedy loop */
- 9 $N_a = 0$
- 10 **repeat** /* Résolution itérative */
- 11 **if** *erreur* > *tolerance* **then**
- 12 Ajouter le point au sous-ensemble
- 13 $N_a = N_a + 1$
- 14 Mise à jour de l'ensemble des boîtes via l'Alg. 6
- 15 **end**
- 16 *Construction des matrices de l'Eqn. (B.48) :*
- 17 Assembler Φ° , Φ^∇ et Φ^Δ à partir de Φ^c
- 18 Assembler S^a
- 19 Résoudre Eqn. (B.53) et (B.54) pour obtenir Γ^a et Γ^g
- 20 *Trouver le point de contrôle maximisant l'erreur*
- 21 Déplacer tous les points de contrôle en utilisant Alg. 3 avec Φ^c , Γ^g et Γ^a en entrée
- 22 $\forall i \in [1, N_m]$, évaluer $\|(\vec{x}_{mi}^* - \vec{x}_{mi}) - \vec{s}_{mi}\|$
- 23 $\forall i \in [1, N_s]$, évaluer $|(\vec{x}_{si}^* - \vec{x}_{si}) \cdot \vec{n}|$
- 24 Trouver le point de contrôle maximisant l'*erreur*
- 25 **until** ($N_a \geq N_{res}$) or (*erreurr* \leq *tolerance*);
- 26 $N_g = N_g + N_a$
- 27 *Étape de redémarrage restart step :*
- 28 Réassembler Φ^\bullet à partir des blocks de l'Eqn. (B.48)
- 29 Appliquer la décomposition LU de Φ^\bullet pour la suite des calculs
- 30 Réassembler $(\Gamma^g)'$ à partir des vecteurs Γ^g et Γ^a
- 31 **until** *erreur* \leq *tolerance*;

de la résolution itérative est de bénéficier de la décomposition LU⁶ et de la solution de l'Eqn. (B.41) pour résoudre la prochaine itération.

Lorsque N_a nouveaux points de contrôle $\{\vec{x}_{ca}\}_{1 \leq a \leq N_a}$ sont ajoutés au sous-ensemble, de nouvelles conditions pour le calcul des poids sont ajoutées et les anciennes sont mises

6. voir Section B.2

à jour. Les nouvelles conditions sont :

$$\begin{aligned} \forall a \in [1, N_a], \quad & \sum_{j=1}^{N_g} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{ma} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\nabla} \vec{\gamma}_j \\ & + \sum_{j=1}^{N_g} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{ma} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\circ} \vec{\gamma}_j = \vec{s}_{ma} \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

pour les points mobiles et

$$\forall a \in [1, N_a], \quad \sum_{j=1}^{N_g} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{sa} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\nabla} \vec{\gamma}_j \cdot \left\{ \sum_{k=1}^3 n_k \vec{e}_k \right\} + \sum_{j=1}^{N_g} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{sa} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\circ} \vec{\gamma}_j \cdot \left\{ \sum_{k=1}^3 n_k \vec{e}_k \right\} = 0 \quad (\text{B.43})$$

$$\vec{\gamma}_a \cdot \vec{t} = 0 \quad (\text{B.44})$$

$$\vec{\gamma}_a \cdot \vec{b} = 0 \quad (\text{B.45})$$

pour les points glissants. Les conditions mises à jour sont :

$$\begin{aligned} \forall g \in [1, N_g], \quad & \sum_{j=1}^{N_a} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{mg} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\bullet} \vec{\gamma}_j \\ & + \sum_{j=1}^{N_a} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{mg} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\Delta} \vec{\gamma}_j = \vec{s}_{mg} \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

pour les points mobiles et :

$$\begin{aligned} \forall g \in [1, N_g], \quad & \sum_{j=1}^{N_a} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{sg} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\bullet} \vec{\gamma}_j \cdot \left\{ \sum_{k=1}^3 n_k \vec{e}_k \right\} \\ & + \sum_{j=1}^{N_a} \underbrace{\phi(d(\vec{x}_{sg} - \vec{x}_{cj}))}_{\Phi^\Delta} \vec{\gamma}_j \cdot \left\{ \sum_{k=1}^3 n_k \vec{e}_k \right\} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

pour les points glissants.

Ainsi de nouvelles lignes et colonnes sont ajoutées à la matrice d'interpolation, au vecteur des poids et au membre de droite du système linéaire de l'Eqn. (B.41). Les composantes du vecteur $\{\vec{\gamma}_i\}_{1 \leq i \leq (N_g + N_a)}$ sont solutions du système linéaire en bloc définis comme :

$$\begin{pmatrix} \Phi^\bullet & \Phi^\Delta \\ \Phi^\nabla & \Phi^\circ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma^g \\ \Gamma^a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S^g \\ S^a \end{pmatrix} \quad (\text{B.48})$$

avec S^a le membre de droite associé aux points de contrôle $\{\vec{x}_{ca}\}_{1 \leq a \leq N_a}$ issu des équations (B.42) à (B.45), Φ° la matrice des interactions des points de contrôle $\{\vec{x}_{ca}\}_{1 \leq a \leq N_a}$ entre eux issue des équations (B.42) et (B.43), Φ^∇ et Φ^Δ les conditions d'interactions entre $\{\vec{x}_{ca}\}_{1 \leq a \leq N_a}$ et les points de contrôle du sous-ensemble $\{\vec{x}_{cg}\}_{1 \leq g \leq N_g}$ comme indiqué par les équations (B.42) et (B.43), et les équations (B.46) et (B.47) respectivement. Γ^a est le vecteur des poids associé aux points de contrôle $\{\vec{x}_{ca}\}_{1 \leq a \leq N_a}$ et Γ^g est celui associé à $\{\vec{x}_{cg}\}_{1 \leq g \leq N_g}$ qui sera modifié à cause de l'ajout des nouveaux points.

Le système linéaire de l'Eqn. (B.48) est ré-écrit sous la forme :

$$\Phi^\bullet \Gamma^g + \Phi^\Delta \Gamma^a = S^g \quad (\text{B.49})$$

$$\Phi^\nabla \Gamma^g + \Phi^\circ \Gamma^a = S^a \quad (\text{B.50})$$

En introduisant le **complément de Schur** de taille $(3N_a \times 3N_a)$ Cottle (1974) comme :

$$Sch = \Phi^\circ - \Phi^\nabla M \quad (\text{B.51})$$

avec M solution du système

$$M = \Phi^\Delta \quad (\text{B.52})$$

deux étapes sont nécessaires pour calculer les poids. Dans un premier temps, la résolution du système :

$$Sch \Gamma^a = S^a - \Phi^\nabla (\Gamma^g)' \quad (\text{B.53})$$

permet d'obtenir les poids Γ^a . Ensuite, les poids modifiés Γ^g sont calculés en résolvant le système linéaire :

$$\Phi^\bullet \Gamma^g = S^g - \Phi^\Delta \Gamma^a \quad (\text{B.54})$$

Comme des factorisations LU sont utilisées pour résoudre tous les systèmes linéaires précédents, les matrices inverses ne sont jamais calculées. La résolution itérative utilise la factorisation LU de Φ^\bullet de l'étape précédente pour calculer M et pour résoudre le système de l'Eqn. (B.54). L'avantage d'utiliser le complément de Schur pour résoudre le système Eqn. (B.53) est que les étapes de décomposition LU (*-LU factor*) et de résolution (*LU solve*) ne sont réalisées que sur des matrices de petite taille $(3N_a \times 3N_a)$.

Afin de maximiser le bénéfice d'une telle méthode, plusieurs points N_a sont ajoutés, puis les matrices Φ° , Φ^∇ et Φ^Δ sont reconstruites et les systèmes Eqn. (B.53) et (B.54) sont résolus. C'est le but de la boucle itérative de l'Alg. 5 à la ligne 10. Quand N_a est supérieur à un nombre de points de contrôle N_{res} prescrit, une étape de redémarrage (*restart step*) est réalisée. Une nouvelle matrice Φ^\bullet est assemblée suivie d'une factorisation LU (Alg. 5-lignes 25-27).

Les performances de l'Alg. 5 sont liées au nombre de points de contrôle avant le *restart*. Si N_{res} est trop petit, de nombreux ré-assemblages et factorisations LU sont réalisés. Au contraire, s'il est trop grand, à chaque itération la taille du complément de Schur augmente et sa factorisation LU devient de plus en plus coûteuse. Dans les deux cas, les performances sont similaires à un algorithme sans résolution itérative. Ainsi, la valeur optimale de N_{res} est le compromis entre le nombre de factorisations LU réalisé et le coût de cette opération. Intuitivement, on peut dire qu'une valeur constante pour N_{res} n'est pas le meilleur choix car en fonction des problèmes traités, le nombre final de points de contrôle varie. N_{res} est donc défini comme une fraction de la taille de la matrice Φ^\bullet afin d'être indépendant des problèmes traités. Des travaux publiés (Mastrippolito et al., 2018a) ont mis en évidence que le nombre optimal de points de contrôle avant *restart* est compris entre 10% et 20% de la taille de la matrice Φ^\bullet .

B.4.3 Restriction de l'espace déformé

Lorsque les fonctions à base radiale sont à support compact, la déformation est naturellement contenue dans une sphère⁷ de rayon r_0 . Ainsi, durant l'opération d'interpolation du déplacement (Alg. 3 ligne 5) les nœuds du maillage qui ne sont pas dans la zone d'influence ont une valeur de ϕ égale à zéro et leur déplacement est nul. Cependant numériquement, le produit matrice-matrice nul est tout de même réalisé avec un coût numérique associé. Afin d'éviter ces opérations inutiles, des **boîtes englobantes** (*bouding boxes*) reposant sur la propriété de compacité des fonctions sont une solution envisageable pour réduire le

7. ou une ellipse

Algorithme 6 : Mise à jour des boîtes englobantes

Input : Nouveau point de contrôle : \vec{x}_{ci}
Input : Ensemble des boîtes englobantes
Output : Ensemble des boîtes englobantes mis à jour

- 1 Trouver la boîte la plus proche de \vec{x}_{ci}
- 2 **if** *Sphère d'influence de \vec{x}_{ci} collisionne la boîte* **then**
- 3 | Ajouter le point au nuage de points de la boîte
- 4 | Mise à jour des propriétés de la boîte
- 5 **else**
- 6 | Construire la boîte autour du point
- 7 | Ajouter la boîte à l'ensemble des boîtes
- 8 **end**

coût d'application de la déformation. Une boîte englobante cherche à entourer un nuage de points tout en minimisant le volume de la boîte. En construisant une telle boîte autour des points de contrôles (en prenant en compte la sphère d'influence), il est possible de délimiter la zone du maillage réellement impactée par la déformation. Ainsi lors de l'étape d'interpolation, seuls les nœuds présents dans cette zone sont déplacés afin d'éviter des opérations mathématiques inutiles.

La méthode de construction la plus simple consiste à utiliser une boîte alignée sur les axes du référentiel (*axis-aligned bounding box* - AABB) (Gottschalk et al., 1996). Elle est construite à partir des coordonnées minimales et maximales des points dans chacune des directions de la base ($\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$). Les propriétés de la boîte (longueur, largeur, hauteur et position du centre) sont obtenues à partir de ces valeurs. Gottschalk et al. (1996) proposent un algorithme permettant de déterminer un ensemble de boîtes entourant un nuage de points par découpage successif des boîtes les plus importantes. Il est également possible de construire itérativement l'ensemble de boîtes lors de l'exécution de l'algorithme glouton, comme le résume Alg. 6. A chaque itération, on vérifie si la sphère d'influence autour du point de contrôle ajouté collisionne une boîte existante. Si c'est effectivement le cas, alors on ajoute le point au nuage de points associé à la boîte et on la reconstruit. Sinon, on crée une nouvelle boîte et on l'ajoute à l'ensemble des boîtes.

Il est également possible d'utiliser des boîtes orientées sur les axes principaux du nuage de points (Gottschalk et al., 1996) ou d'utiliser des algorithmes de partitionnement de boîte plus complexe (Huebner et al., 2008) afin de minimiser le volume total de l'ensemble des boîtes.

B.5 Qualité de la déformation

La qualité du champ de déplacement \vec{s} est classiquement évaluée à travers la qualité du maillage déformé (de Boer et al., 2007; Michler, 2011; Mocanu et al., 2013). Elle repose alors sur des critères utilisant la Jacobienne de la cellule tel que présenté par Knupp (2003). Ils mesurent ainsi une différence entre la cellule réelle et une cellule idéale (hexaédrique par exemple). Les "mauvaises" cellules sont identifiées sur la base d'informations géométriques comme des rapports d'aspect ou des distorsions trop importants. Cependant, ces critères sont dépendants du maillage.

Cependant \vec{s} est continu dans l'espace, dérivable, et présente l'avantage d'être indépendant

du maillage initial utilisé. Dans l'optique de préserver cet avantage, des critères sont développés dans les présents travaux. Ils reposent sur le tenseur des déformation $\vec{\varepsilon}$ défini comme :

$$\vec{\varepsilon}(\vec{x}) = \frac{1}{2} \left\{ \vec{\nabla} \vec{s}(\vec{x}) + \vec{\nabla} \vec{s}(\vec{x})^T \right\} \quad (\text{B.55})$$

avec le gradient du déplacement défini à partir de l'Eqn. (B.1) comme :

$$\vec{\nabla} \vec{s}(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{N_c} \phi'(d(\vec{x} - \vec{x}_{c_j})) \vec{\gamma}_j \otimes \vec{\nabla} d(\vec{x} - \vec{x}_{c_j}) \quad (\text{B.56})$$

En exprimant le tenseur en fonctions des directions de déformation principales, c'est-à-dire en calculant les vecteurs propres $\vec{\varepsilon}$, le tenseur devient :

$$\vec{\varepsilon}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_I & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{II} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{III} \end{pmatrix} \quad (\text{B.57})$$

et $\varepsilon_I \leq \varepsilon_{II} \leq \varepsilon_{III}$ sont les valeurs propres ordonnées croissantes de $\vec{\varepsilon}$. L'analogie avec les cercles de Mohr's pour les déformations (Parry, 2004; Beer et al., 2004) permet d'introduire trois métriques :

- La déformation volumétrique (*volumetric strain*), définie comme

$$\frac{1}{3}(\varepsilon_I + \varepsilon_{II} + \varepsilon_{III}) \quad (\text{B.58})$$

quantifie la variation de volume autour de la position \vec{x} . La valeur est positive pour une dilatation et négative pour une compression. Sous l'hypothèse des petites déformations, cette métrique approxime la variation relative du volume. Une valeur inférieure à -1 identifie l'apparition d'un volume négatif.

- le cisaillement maximal (*maximum shear strain*) est défini comme

$$(\varepsilon_{III} - \varepsilon_I) \quad (\text{B.59})$$

Il quantifie le changement d'orthogonalité autour d'une position \vec{x} . Sous l'hypothèse des petites déformations, cette métrique approxime la plus grande variation angulaire entre deux plans initialement orthogonaux dont l'intersection est \vec{x} .

- l'angle de cisaillement (*shear strain angle*), défini comme

$$\tan^{-1} \left(\frac{\varepsilon_I}{\varepsilon_{III}} \right) \quad (\text{B.60})$$

indique la direction par rapport au référentiel principal et autour de \vec{x} susceptible d'être cisailée.

Des champs de déplacement conduisant à des faibles valeurs de *volumetric strain* et de *shear strain* sont susceptibles de produire des maillages déformés dont la qualité est proche du maillage initial. Une application de ces critères a été publiée durant la thèse (Aubert et al., 2017).

B.6 Valorisation

La déformation par fonctions à base radiale est utilisée dans les présents travaux :

- au Chapitre 5, où elle est comparée à une méthode de remaillage quant aux résultats de l'optimisation
- au Chapitre 6, pour la déformation du diffuseur de la configuration ECH-3D, et pour la prise en compte de l'accroissement du dépôt dans le cas de l'encrassement.

Les apports (complément de Schur, restriction de l'espace et critères de qualité) ont donné lieu à trois publications : Aubert, S., Matrippolito, F., Rendu, Q., Buisson, M., and Ducros, F. (2017). Planar Slip Condition For Mesh Morphing Using Radial Basis Functions. *Procedia Engineering*, 203, 349-361.

Matrippolito F., Aubert, S., Ducros, F., and Buisson, M. (2018). On the use of Schur complement to improve the efficiency of RBF-based mesh deformation applied on internal cooling. *53 rd 3AF International Conference on Applied Aerodynamics*, 26-28 Mars 2018, Salon-de-Provence, France

Matrippolito, F., Aubert, S., Ducros, F. and Buisson, M. (2019). RBF-based mesh morphing improvement using Schur complement applied o rib shape optimization (**Soumis**) *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*

B.7 Liste des symboles

\vec{b}	second vecteur tangent unitaire, $\sum_{i=1}^3 b_i \vec{e}_i$	$\in \mathbb{R}^3$
D	matrice d'échelle	$\in \mathbb{R}^{3 \times 3}$
d	fonction de mesure de la distance	$\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^+$
\vec{e}_i	i-ème vecteur du référentiel	$\in \mathbb{R}^3$
L	matrice de rotation	$\in \mathbb{R}^3$
\vec{n}	vecteur normal unitaire $\sum_{i=1}^3 n_i \vec{e}_i$	$\in \mathbb{R}^3$
N	nombre de nœud du maillage	$\in \mathbb{N}$
N_a	nombre de points de contrôle dans le sous-ensemble de Schur	$\in \mathbb{N}$
N_c	nombre de points de contrôle	$\in \mathbb{N}$
N_g	nb. de points de contrôle dans le sous-ensemble de l'alg. glouton	$\in \mathbb{N}$
N_m	nombre de points mobiles	$\in \mathbb{N}$
N_s	Nombre de points glissants	$\in \mathbb{N}$
N_{res}	Nombre de points de contrôle avant redémarrage	$\in \mathbb{N}$
r_0	rayon d'action	$\in \mathbb{R}$
\vec{s}	fonction de déplacement	$\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$
s_{max}	déplacement maximal	$\in \mathbb{R}$
\vec{s}_{mi}	déplacement du i-ème point mobile	$\in \mathbb{R}^3$
S_{\square}	vecteur	$\in \mathbb{R}^{N_m}$
S^N	matrice	$\in \mathbb{R}^{N \times 3}$
S^{\square}	vecteur	$\in \mathbb{R}^{3N_{\square}}$
Sch	matrice du complément de Schur	$\in \mathbb{R}^{3N_a \times 3N_a}$
\vec{t}	premier vecteur tangent unitaire, $\sum_{i=1}^3 t_i \vec{e}_i$	$\in \mathbb{R}^3$
\vec{x}	vecteur position	$\in \mathbb{R}^3$

\vec{x}_{ci}	vecteur position du i-ème point de contrôle	$\in \mathbb{R}^3$
\vec{x}_{mi}	vecteur position du i-ème point mobile	$\in \mathbb{R}^3$
\vec{x}_{si}	vecteur position du i-ème point glissant	$\in \mathbb{R}^3$
X	matrice	$\in \mathbb{R}^{N \times 3}$
$\vec{\varepsilon}$	tenseur des déformation	$\in \mathbb{R}^{3 \times 3}$
$\vec{\delta}$	vecteur différence de position $\vec{x}_i - \vec{x}_j$	$\in \mathbb{R}^3$
$\vec{\gamma}_i$	vecteur des poids associé au i-ème point de contrôle	$\in \mathbb{R}^3$
Γ_{\square}	vecteur	$\in \mathbb{R}^{N_c}$
Γ^N	matrice	$\in \mathbb{R}^{N_c \times 3}$
Γ^{\square}	vecteur	$\in \mathbb{R}^{3N_{\square}}$
ϕ	fonction à base radiale	$\mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$
Φ	matrice	$\in \mathbb{R}^{N \times N_c}$
Φ^c	matrice	$\in \mathbb{R}^{N_c \times N_c}$
Φ^m	matrice	$\in \mathbb{R}^{N_m \times N_c}$
Φ^s	matrice	$\in \mathbb{R}^{N_s \times N_c}$
Φ^t	matrice	$\in \mathbb{R}^{N_s \times N_c}$
Φ^{\bullet}	matrice	$\in \mathbb{R}^{3N_g \times 3N_g}$
Φ°	matrice	$\in \mathbb{R}^{3N_a \times 3N_a}$
Φ^{Δ}	matrice	$\in \mathbb{R}^{3N_g \times 3N_a}$
Φ^{∇}	matrice	$\in \mathbb{R}^{3N_a \times 3N_g}$
0_s	vecteur nul	$\in \mathbb{R}^{N_s}$
$0_{s \times m}$	matrice nulle	$\in \mathbb{R}^{N_s \times N_m}$
$0_{m \times c}$	matrice nulle	$\in \mathbb{R}^{N_m \times N_c}$
$\mathbb{I}_{s \times s}$	matrice identité	$\in \mathbb{R}^{N_s \times N_s}$
\square^*	état après déformation	
$(\square)'$	itération précédente de l'algorithme glouton	
$\vec{u} \cdot \vec{v}$	produit scalaire, $\sum_{i=1}^3 u_i v_i$	$(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathbb{R}$
$\vec{u} \otimes \vec{v}$	produit tensoriel, $[u_i v_j]_{i,j}$	$(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathbb{R}^{3 \times 3}$
$\ \vec{u}\ $	norme euclidienne, $\sqrt{\vec{u} \cdot \vec{u}}$	$\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$
$\vec{\nabla} \vec{u}$	opérateur gradient $[\partial u / \partial x_i]_i$	$\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$

Performances des échangeurs de chaleur et des transferts thermiques

Sommaire

C.1	Approches thermodynamiques	235
C.1.1	Production d'entropie d'un échangeur	236
C.1.2	Irréversibilités des transferts thermiques	237
C.1.3	Irréversibilités des frottements	239
C.1.4	Distinction des contributions - approche multiobjectif	239
C.1.5	Conclusions	239
C.1.6	Ouverture vers la notion d'irréversibilités locales en CFD	239
C.2	Synergie	240

Outre les indicateurs de performances bien connus des ingénieurs (comme l'efficacité ou la perte de charge), d'autres façons de considérer les performances des échangeurs ont été introduites telles que les approches thermodynamiques ou le concept de synergie. On se limite ici à la présentation rapide de ces concepts et à l'évaluation de leur pertinence dans une démarche d'optimisation.

C.1 Approches thermodynamiques

L'analyse thermodynamique (*second law analysis*) repose sur le second principe de la thermodynamique. Elle vise à déterminer les irréversibilités d'un système ou d'un composant, en les exprimant comme une production d'entropie.

Bejan (1977) a été l'un des premiers à appliquer ce type d'approche au dimensionnement d'un échangeur de chaleur, l'idée étant de déterminer celui conduisant à la production d'entropie minimale, maximisant ainsi le travail (thermique) disponible. L'approche présentée ici se base essentiellement sur ces travaux. Pour une revue de la littérature plus exhaustive, on pourra se référer aux travaux de Awad and Muzychka (2012).

C.1.1 Production d'entropie d'un échangeur

On considère dans la suite qu'un échangeur est un système thermodynamique ouvert composé de deux fluides (1 et 2), stationnaire et n'échangeant pas avec l'extérieur. La production d'entropie \dot{S}_{gen} de celui-ci s'écrit :

$$\dot{S}_{gen} = \dot{m}_1(s_{1o} - s_{1i}) + \dot{m}_2(s_{2o} - s_{2i}) \quad (\text{C.1})$$

avec \dot{m} le débit masse, s l'entropie et i et o les indices identifiant l'entrée et la sortie du système. Afin de déterminer cette production d'entropie, il faut pouvoir calculer la variation d'entropie entre l'entrée et la sortie du système.

En considérant que :

$$dh = Tds + \frac{1}{\rho}dP \quad (\text{C.2})$$

$$dh = c_p dT \quad (\text{C.3})$$

avec h l'enthalpie, T la température, P la pression statique, ρ la masse volumique, et c_p la capacité thermique massique à pression constante, il vient que :

$$ds = c_p \frac{dT}{T} - \frac{1}{\rho T} dP \quad (\text{C.4})$$

L'intégration entre l'entrée et la sortie du système donne :

$$\int_i^o ds = \int_i^o c_p \frac{dT}{T} - \int_i^o \frac{1}{\rho T} dP \quad (\text{C.5})$$

$$(s_o - s_i) = c_p \ln \left(\frac{T_o}{T_i} \right) - \int_i^o \frac{1}{\rho T} dP \quad (\text{C.6})$$

L'intégration du terme de pression est fonction des hypothèses concernant le fluide. S'il s'agit d'un gaz parfait, alors l'équation d'état donne :

$$P = \rho T r \quad (\text{C.7})$$

avec $r = \frac{\mathcal{R}}{M}$ la constante spécifique du gaz, qui dépend de la constante universelle des gaz parfaits \mathcal{R} et de la masse molaire de l'espèce M . Il vient alors que :

$$\int_i^o \frac{1}{\rho T} dP = \int_i^o r \frac{dP}{P} \quad (\text{C.8})$$

$$= r \ln \left(\frac{P_o}{P_i} \right) \quad (\text{C.9})$$

S'il s'agit d'un fluide incompressible, il vient (Shah and Sekulic, 2003, pp. 762) :

$$\int_i^o \frac{1}{\rho T} dP = \frac{P_o - P_i}{\rho} \frac{\ln \left(\frac{T_o}{T_i} \right)}{T_o - T_i} \quad (\text{C.10})$$

En considérant un échangeur dont le fluide 1 serait de l'air et le fluide 2 de l'eau, on peut écrire la production d'entropie comme :

$$\dot{S}_{gen} = \dot{m}_1 \left(c_{p1} \ln \left(\frac{T_{1o}}{T_{1i}} \right) - r_1 \ln \left(\frac{P_{1o}}{P_{1i}} \right) \right) + \dot{m}_2 \left(c_{p2} \ln \left(\frac{T_{2o}}{T_{2i}} \right) - \frac{P_{2o} - P_{2i}}{\rho_2} \frac{\ln \left(\frac{T_{2o}}{T_{2i}} \right)}{T_{2o} - T_{2i}} \right) \quad (\text{C.11})$$

La production d'entropie peut être exprimée comme la somme d'une production issue des irréversibilités des transferts thermiques $\dot{S}_{gen,\Delta T}$ et d'une production issue des irréversibilités de frottement du fluide $\dot{S}_{gen,\Delta P}$:

$$\dot{S}_{gen} = \dot{S}_{gen,\Delta T} + \dot{S}_{gen,\Delta P} \quad (\text{C.12})$$

avec

$$\dot{S}_{gen,\Delta T} = \dot{m}_1 c_{p1} \ln \left(\frac{T_{1o}}{T_{1i}} \right) + \dot{m}_2 c_{p2} \ln \left(\frac{T_{2o}}{T_{2i}} \right) \quad (\text{C.13})$$

$$\dot{S}_{gen,\Delta P} = -\dot{m}_1 r_1 \ln \left(\frac{P_{1o}}{P_{1i}} \right) - \dot{m}_2 \frac{P_{2o} - P_{2i}}{\rho_2} \frac{\ln \left(\frac{T_{2o}}{T_{2i}} \right)}{T_{2o} - T_{2i}} \quad (\text{C.14})$$

Afin d'obtenir une grandeur normalisée, Bejan (1977) introduit le nombre de production d'entropie N_S comme :

$$N_S = \frac{\dot{S}_{gen}}{\max(\dot{m}_1 c_{p1}, \dot{m}_2 c_{p2})} \quad (\text{C.15})$$

Comme pour la production d'entropie, il est possible de scinder ce nombre en tenant compte des contributions thermiques et visqueuses :

$$N_S = N_{S,\Delta T} + N_{S,\Delta P} \quad (\text{C.16})$$

$$= \frac{\dot{S}_{gen,\Delta T}}{\max(\dot{m}_1 c_{p1}, \dot{m}_2 c_{p2})} + \frac{\dot{S}_{gen,\Delta P}}{\max(\dot{m}_1 c_{p1}, \dot{m}_2 c_{p2})} \quad (\text{C.17})$$

C.1.2 Irréversibilités des transferts thermiques

Dans la suite, $\dot{S}_{gen,\Delta P}$ est nul ou constant, et seules les contributions thermiques sont considérées :

$$\dot{S}_{gen} \equiv \dot{S}_{gen,\Delta T} \quad (\text{C.18})$$

Sachant que l'efficacité est fonction des températures entrée/sortie des deux fluides, le nombre de production d'entropie peut s'exprimer en fonction de l'efficacité de l'échangeur. La Figure C.1(a) montre cette évolution dans le cas d'un échangeur contre-courant air/air tel que $\dot{m}_1 c_{p1} = \dot{m}_2 c_{p2}$ et sans prise en compte des pertes de charge. On remarque que l'évolution du nombre de production d'entropie n'est pas monotone en fonction de l'évolution de l'efficacité et qu'elle atteint un maximum pour une efficacité égale à 0.5. Un comportement similaire est observable dans de nombreuses configurations d'échangeur (Hesselgreaves, 2000). Bejan a considéré ce phénomène comme un paradoxe (*entropy generation paradox*) s'attendant à ce que la dépendance entre les deux grandeurs soit monotone, avec une production d'entropie maximale lorsque l'efficacité est nulle.

Une explication avancée par plusieurs auteurs (Hesselgreaves, 2000; Shah and Skiepko, 2004) est que une efficacité nulle correspond à un nombre d'unité de transfert (NUT) également nul. Or dans la pratique il est (quasiment) impossible que ce soit le cas. Au moins deux façons de considérer ce phénomène ont alors été proposées.

La première consiste à déterminer une nouvelle normalisation de la production d'entropie afin qu'elle devienne monotone avec l'efficacité (Xu et al., 1996; Hesselgreaves, 2000). L'une des plus utilisées est celle proposée par Hesselgreaves (2000) :

$$N_{S1} = \frac{\dot{S}_{gen} T_{1i}}{\Phi} \quad (\text{C.19})$$

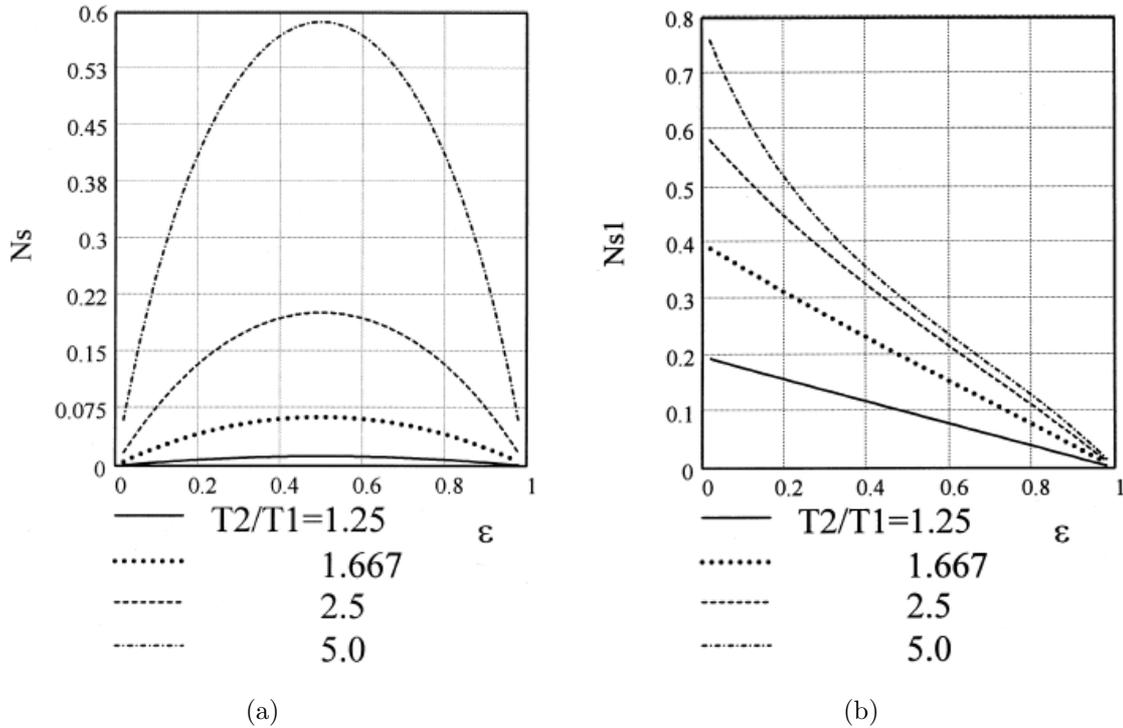


Figure C.1 – Illustration de l'évolution du nombre de production d'entropie (N_S) en fonction de l'efficacité (ε) pour différents rapports de température fluide 1/fluide 2. (a) N_S et le paradoxe de Bejan - (b) nombre proposé par Hesselgreaves. (extraites de (Hesselgreaves, 2000))

avec T_{1i} la température d'entrée du fluide 1 et Φ la puissance échangée au sein de l'échangeur. Comme le montre la Figure C.1(b), son évolution est monotonement décroissante avec l'augmentation de l'efficacité.

Shah and Skiepko (2004) expliquent que le paradoxe est "normal" car lorsque l'efficacité est nulle, aucune puissance n'est mise en jeu et les irréversibilités dues aux transferts thermiques sont nulles. De plus, ils lient l'apparition du maximum d'entropie au moment où l'efficacité induit un rapport des températures de sortie (T_{1o}/T_{2o}) égal à l'unité. Passé ce point de fonctionnement, la valeur de la production d'entropie \dot{S}_{gen} décroît monotonement avec l'efficacité. Il convient de supposer que les cas pour lesquels $T_{1o}/T_{2o} < 1$ sont représentatifs d'un mauvais dimensionnement de l'échangeur et sont évités en pratique.

Les deux manières d'appréhender l'évolution de la production d'entropie due aux transferts thermiques en fonction de la variation de l'efficacité conduisent à une conclusion similaire. Dans la pratique, cette quantité décroît donc de manière monotone quand l'efficacité augmente. D'un point de vue purement mathématique, maximiser l'efficacité revient donc à minimiser la production d'entropie (ou sa normalisation). Dans un processus d'optimisation qui considère un échangeur en tant que composant isolé d'un système, choisir l'une ou l'autre de ces quantités en tant que fonction objectif revient strictement au même.

C.1.3 Irréversibilités des frottements

Si l'on ne considère que les irréversibilités dues frottements du fluide, l'analyse de l'Eqn. (C.14) montre qu'elles augmentent lorsque les pertes de charge dans le système augmentent. Ainsi, les minimiser revient à minimiser la production d'entropie (ou sa normalisation). D'un point de vue mathématique, elles se comportent donc de manière similaire.

C.1.4 Distinction des contributions - approche multiobjectif

La production d'entropie reste toutefois un moyen élégant de considérer conjointement les phénomènes thermiques et hydrodynamiques. En effet, dans le cadre d'une optimisation mono-objectif, il permet d'agrèger deux quantités qui exprimées différemment (efficacité et perte de charge) ne sont pas "physiquement" sommables.

Toutefois, cette approche reste limitée. En effet, dans la majorité des cas pratiques (Guo et al., 2010), il y a plusieurs ordres de grandeurs entre les contributions thermiques et de frottements. Cela conduit donc à considérer préférentiellement les configurations d'échangeur minimisant la contribution de $\dot{S}_{gen,\Delta P}$, lors du processus d'optimisation.

De plus, une approche multiobjectif cherchant à minimiser $\dot{S}_{gen,\Delta P}$ et $\dot{S}_{gen,\Delta T}$ sans les sommer, semble conduire aux mêmes résultats que minimiser la perte de charge et maximiser l'efficacité de l'échangeur (Guo et al., 2010).

C.1.5 Conclusions

Bien que considérer les analyses thermodynamiques puisse présenter certains avantages, elles n'ont pas été utilisées dans les présents travaux car conduisant mathématiquement aux mêmes résultats que des notions comme l'efficacité de l'échangeur et sa perte de charge.

C.1.6 Ouverture vers la notion d'irréversibilités locales en CFD

La mécanique des fluides numérique, permet d'accéder aux champs de pression, vitesse et température d'un écoulement. Il est donc possible d'introduire la notion de champ d'entropie spécifique (Sciubba, 1996) et la production d'entropie locale peut être déterminée comme (Herwig and Kock, 2007) :

$$\dot{S}_{gen} = \lambda \frac{\vec{\nabla}T \cdot \vec{\nabla}T}{T^2} - \frac{1}{T} \boldsymbol{\sigma}_v : \vec{\nabla}\vec{u} \quad (\text{C.20})$$

avec les opérateurs (\cdot) et $(:)$ définissant le produit scalaire et le double produit contracté. Pour les écoulements turbulents, il convient de considérer des termes additionnels dont une formulation est proposée par Herwig and Kock (2007).

Des applications ayant considéré cette production locale pour analyser les zones de fortes irréversibilités dans un écoulement (Sciubba, 1996; Herpe et al., 2009; Habchi et al., 2011; Tala et al., 2012) existent. Cependant, comme le soulignent Sciacovelli et al. (2015), on trouve très peu d'études d'optimisation utilisant ce concept.

C.2 Synergie

Initialement proposé par Guo et al. (1998), le concept de synergie (*synergy*) vise à unifier les phénomènes d'intensification des transferts thermiques, à savoir :

- réduire l'épaisseur de la couche limite thermique ;
- augmenter les perturbations du fluide pour homogénéiser la température de l'écoulement ;
- augmenter la vitesse de l'écoulement.

Ils considèrent alors l'interaction entre le vecteur vitesse et le gradient de température au sein du fluide, par l'intermédiaire de l'angle que forment ces deux vecteurs, nommé **angle de synergie**. Une diminution de cet angle induit une augmentation des transferts thermiques. Cette interaction est mise en évidence dans le cadre d'un écoulement laminaire de Poiseuille. Tao et al. (2002b; 2002a) étendent cette formulation à des écoulements plus complexes (mais toujours laminares) et vérifient numériquement (CFD) la validité du concept. Ils démontrent que la variation de l'angle de synergie moyen¹ est corrélée à celle du nombre de Nusselt. He et al. (2005) tirent les mêmes conclusions en comparant différentes formes d'ailettes deltas. Les formes conduisant à un meilleur transfert thermique sont celles dont l'angle de synergie moyen est le plus faible. Ils remarquent également, qu'avec l'augmentation du nombre de Reynolds, le nombre de Nusselt augmente, mais avec une tendance de moins en moins prononcée. Ils corrélient ce phénomène avec une augmentation de l'angle de synergie.

Plus récemment, des études ont été menées sur des écoulements turbulents (Habchi et al., 2011; Zhu and Zhao, 2016). Habchi et al. (2011) montrent que la notion d'angle n'est pas suffisante pour considérer l'amélioration des performances localement. De plus, ils concluent que la valeur moyenne de cet angle sur le domaine de calcul n'est pas un critère suffisamment quantitatif pour l'évaluation des performances thermiques. Les travaux de Zhu and Zhao (2016) ont cherché à valider le concept d'angle de synergie dans le cas des écoulements turbulents. Ils concluent que, pour un écoulement laminaire, la variation de l'angle de synergie en proche paroi ou intégrée sur l'ensemble du domaine est corrélée à celle du nombre de Nusselt. Toutefois, pour un écoulement turbulent, cela n'est vrai que dans la sous-couche visqueuse. Ils préconisent donc de limiter l'application de ce concept dans cette zone.

En conclusion, le concept de synergie semble un outil utile pour l'analyse des champs afin de comprendre quelles sont les zones les moins efficaces pour le transfert thermique. Toutefois, intégrer la valeur de l'angle de synergie sur tout le domaine dans le but de créer un critère d'optimisation semble ne pas conduire à un résultat suffisamment discriminant. C'est pour cela qu'il n'a pas été considéré dans les présents travaux.

1. Sur l'ensemble des cellules du maillage

Sommaire

D.1	Moteurs d'optimisation	241
D.1.1	Méthodes classiques.	242
D.1.2	Méthodes méta-heuristiques.	243
D.1.3	Méthodes hybrides.	244
D.1.4	Quelques algorithmes génétiques	244
D.1.5	Opérateurs génétiques du NSGA-II	245
D.2	Conditionneurs	248
D.2.1	Méthodes d'agrégation.	248
D.2.2	Méthodes basées sur les normales.	248
D.2.3	Autres conditionneurs.	249
D.3	Formulation du krigeage	249
D.3.1	Définitions et rappels de statistique	249
D.3.2	Expression des termes du krigeage	253
D.3.3	Critères d'enrichissement	253

Cette annexe regroupe certains détails concernant les outils d'optimisation présentés dans le Chapitre 3.

D.1 Moteurs d'optimisation

Le moteur est la composante principale de la méthode d'optimisation. Deux groupes sont à distinguer : les méthodes **classiques** par essence mono-objectif, reposant sur les propriétés mathématiques des fonctions ; et les méthodes **méta-heuristiques**, moins formelles mathématiquement et souvent issues d'analogies avec la biologie, la physique ou l'éthologie, et qui permettent de traiter des problèmes mono-objectifs et également multi-objectifs directement.

	Monoparamétrique	Multiparamétrique
Directes	Intervalles (Deb, 1995)	Powell (Powell, 1964)
	Section dorée (Culioli, 2012)	Simplex (Nelder and Mead, 1965)
Avec gradients	Newton-Raphson (Deb, 1995)	Descente de Cauchy (Culioli, 2012)
	Sécante (Culioli, 2012)	Newton (Culioli, 2012)
		Gradient conjugué Deb (1995)

Tableau D.1 – Récapitulatif des méthodes d'optimisation classiques.

D.1.1 Méthodes classiques.

Les méthodes classiques permettent essentiellement de minimiser une seule fonction objectif. Elles peuvent être divisées en deux groupes en fonction de la dimension du vecteur de paramètres. Lorsqu'elle est égale à un, la fonction est dite monoparamétrique, sinon multiparamétrique.

Il est également possible de les distinguer via les informations qu'elles utilisent pour résoudre le problème. Les méthodes directes recherchent le minimum en utilisant uniquement les valeurs de la fonction. Les méthodes avec gradient utilisent également la dérivée de la fonction par rapport au(x) paramètre(s). Elle recherchent donc plus efficacement le minimum car la pente est prise en compte, mais nécessitent le respect de certaines propriétés mathématiques pour que la convergence soit assurée (Culioli, 2012). Pour des problèmes d'ingénierie, l'obtention des dérivées peut être complexe et coûteuse. C'est le cas notamment lorsque l'on évalue la fonction via une simulation numérique. En cela, les méthodes directes peuvent être plus avantageuses. Cependant, elles sont plus longues à converger, nécessitent plus d'évaluations de la fonction et sont donc plus coûteuses numériquement (Deb, 1995). Par la suite, les méthodes les plus utilisées sont présentées et le Tableau D.1 résume à quelles catégories elles appartiennent. Deb (1995) fournit une liste plus détaillée ainsi que des algorithmes pour chaque méthode.

Parmi les méthodes classiques, on trouve :

- les méthodes d'intervalles (*bracketing method*), qui permettent de déterminer un intervalle contenant le minimum, à partir d'un point de départ et d'un incrément.
- la méthode de la section dorée, qui détermine un intervalle contenant le minimum en comparant les bornes d'un intervalle de départ et en le subdivisant itérativement par le nombre d'or $\frac{\sqrt{5}-1}{2}$.
- la méthode de Newton-Raphson, qui recherche le minimum de la fonction via l'expression de son développement de Taylor à l'ordre 1. La dérivée première de la fonction pilote la recherche du minimum et sert de critère d'arrêt. Lorsque la dérivée n'est pas disponible, elle peut être approchée par différences finies.
- la méthode de la sécante, qui utilise le même principe que la méthode précédente mais dans ce cas, la dérivée est uniquement estimée par différences finies en utilisant l'itération précédente. Elle est donc moins coûteuse.
- la méthode du Simplex, qui utilise un *simplexe*¹ de taille $N_d + 1$ pour localiser le vecteur de paramètres (de taille N_d) minimisant une fonction donnée. A chaque itération, le sommet du simplexe le moins bon est remplacé par un autre vecteur

1. Généralisation d'un triangle pour un nombre de dimensions quelconque.

grâce à trois mécanismes : expansion, réflexion et contraction. Si ces opérations ne conduisent pas à trouver un meilleur vecteur, alors le simplexe se contracte. La recherche s'arrête lorsque le volume du simplexe est inférieur à une tolérance.

- la méthode de Powell, qui construit un ensemble de N_d directions de recherche conjuguées. Ensuite, une recherche monoparamétrique est réalisée dans chaque direction. A chaque itération, le vecteur de paramètres optimal courant est utilisé pour construire la nouvelle direction de recherche.
- la méthode de Cauchy, qui utilise la dérivée de la fonction comme direction de descente. A chaque itération, le minimum de la fonction dans cette direction est déterminé. La recherche s'arrête lorsque la dérivée est plus petite qu'une tolérance.
- la méthode de Newton, qui est une généralisation à plusieurs dimensions de la méthode de Newton-Raphson. Elle va itérativement minimiser le développement de Taylor à l'ordre 2 de la fonction. Cela nécessite le calcul de la matrice Hessienne.
- la méthode de quasi-Newton, est similaire à la méthode précédente, mais remplace le calcul, parfois coûteux, de la matrice Hessienne par une matrice plus simple à calculer numériquement.
- la méthode du gradient conjugué, qui est similaire à la méthode de Powell. Cependant, cette méthode utilise le gradient de la fonction objectif pour déterminer la nouvelle direction de recherche conjuguée aux précédentes.

Un inconvénient majeur de ces méthodes, outre les propriétés mathématiques qu'elles supposent, est qu'elles n'assurent pas la convergence vers un optimum global. En effet les mécanismes de recherche qu'elles utilisent se cantonnent à explorer un voisinage et peuvent conduire à rester piégé dans un minimum local.

D.1.2 Méthodes méta-heuristiques.

Les méthodes méta-heuristiques ont été développées pour s'affranchir du respect de certaines propriétés mathématiques concernant les fonctions objectif, qui limitent le champ d'application des méthodes précédentes, tout en permettant de résoudre des problèmes qualifiés de difficiles. Ces méthodes utilisent une exploration stochastique de l'espace des paramètres et ne nécessitent généralement pas d'informations sur les dérivées. Elles sont plus à même d'éviter le piège des minima locaux et donc de trouver un optimum global. Les premières méthodes permettaient de minimiser des problèmes à un seul objectif. Par la suite, certaines ont été étendues à l'optimisation multiobjectif, notamment les algorithmes évolutionnaires (Dréo et al., 2006; Deb, 2001).

Au vu de la diversité des méthodes, il est complexe d'en définir une classification précise. Communément, les méthodes de **voisinage**, qui font évoluer une seule solution au cours des itérations, sont différenciées des méthodes distribuées qui font évoluer **une population constituée d'individus**. Par la suite, les méthodes les plus utilisées sont brièvement présentées. On pourra se référer au livre de Dréo et al. (2006) pour plus d'informations.

Parmi les méthodes de voisinage, les plus utilisées sont :

- le recuit simulé (*simulated annealing*) (Kirkpatrick et al., 1983), qui utilise une analogie thermodynamique. En métallurgie, le recuit est une opération qui permet d'obtenir une structure cristalline ordonnée et minimisant l'énergie interne. Pour cela le métal est d'abord soumis à une forte température puis refroidi lentement. La

méthode utilise ce principe, en considérant la fonction objectif comme l'énergie du système et en introduisant une température fictive et une loi de décroissance.

- la recherche tabou (*tabu search*) (Glover, 1989), qui est inspirée de la mémoire humaine. Cette méthode cherche dans le voisinage d'un vecteur de paramètres le minimum de la fonction objectif. Afin d'éviter de se retrouver piégé dans un minimum local, la notion de mémoire empêche de visiter à nouveau les zones déjà explorées.

Parmi les méthodes distribuées, on trouve :

- les algorithmes évolutionnaires (*evolutionary algorithms*) (Deb, 2001), qui sont inspirés des théories de l'évolution. Parmi ces méthodes, les algorithmes génétiques, inspirés par la théorie d'évolution des espèces de Darwin (reproduction, mutation, sélection) sont les plus connus. Les algorithmes évolutionnaires présentent l'avantage d'être simples à mettre en œuvre et d'être plus robustes que les méthodes classiques.
- les algorithmes de colonies de fourmis (*ant colony algorithms*) (Dréo et al., 2006), qui sont inspirés par le comportement des fourmis et notamment sur leur système de phéromones, utilisé pour communiquer. Initialement conçus pour résoudre des problèmes d'optimisation combinatoires, ils ont été également étendus aux problèmes continus.
- l'optimisation par essaim particulaire (*particle swarm optimization*) (Kennedy, 2011), qui est inspirée par l'analogie avec le comportement collectif des déplacements d'animaux (banc de poissons, oiseaux, ..). Pour chaque individu, on tient compte de sa position et de sa vitesse ainsi que de celles de ses voisins.

Grâce à leur formulation et au traitement d'une population, les méthodes méta-heuristiques distribuées sont bien adaptées à la notion de front de Pareto. De plus, l'évaluation des individus est facilement parallélisable. Ainsi, elles ont été étendues à l'optimisation multiobjectif avec notamment les algorithmes génétiques.

D.1.3 Méthodes hybrides.

Certaines méthodes, dites hybrides, utilisent des méta-heuristiques combinées à des méthodes classiques. C'est par exemple le cas de l'algorithme *Genetic Optimization Using Derivatives* (Mebane Jr et al., 2011) qui combine la recherche globale d'un algorithme génétique à la recherche locale d'une méthode quasi-Newton. Cette association permet de converger rapidement vers le minimum lorsque l'on se trouve dans son voisinage, tout en évitant de converger uniquement vers un minimum local.

D.1.4 Quelques algorithmes génétiques

Cette section présente brièvement certains algorithmes génétiques parmi les plus connus de la littérature (Ghosh and Dehuri, 2004). Elle s'inspire en grande partie du livre de Deb (2001), auquel on pourra se reporter pour plus de détails. Quatre algorithmes sont présentés, afin d'illustrer l'évolution de l'état de l'art dans ce domaine.

Vector Evaluated Genetic Algorithm. L'algorithme VEGA, proposé par Schaffer (1985) est le premier algorithme génétique réellement multiobjectif car il considère directement le vecteur des objectifs. Pour cela, la population d'une génération est divisée en

N_{obj} sous-populations. Pour chacun de ces sous-groupes, l'adaptation est définie en fonction d'un seul objectif. Les meilleurs individus de chaque sous-groupe sont sélectionnés pour faire partie du groupe reproducteur.

Cet algorithme se distingue par sa capacité à gérer plusieurs objectifs via une implémentation simple reposant sur les algorithmes mono-objectifs déjà existants. Cependant, son opérateur de la sélection tend à regrouper les individus autour des minima de chaque fonction et le front de Pareto s'en trouve mal décrit.

Multiple Objective Genetic Algorithm. L'algorithme MOGA, proposé par Fonseca and Fleming (1993), utilise la notion de front et de rang de Fonseca et Fleming (voir Section 3.1.2) pour assigner la valeur de l'adaptation permettant la sélection. Il assure également une bonne répartition des individus le long du front via l'utilisation d'un opérateur de diversité qui va déterminer les **niches** de population² (*sharing*) afin d'en pénaliser les individus.

Cet algorithme assure une bonne représentation du front de Pareto grâce à l'opérateur de diversité. Cependant, le paramétrage de cet opérateur peut introduire un biais dans la recherche de solution optimale car certains individus de rang inférieur peuvent se retrouver avec une meilleure adaptation à cause de la pénalité.

Non-dominated Sorting Genetic Algorithm. Le NSGA, proposé par Srinivas and Deb (1994) utilise également la notion de front mais c'est le rang de Goldberg qui détermine l'adaptation. Afin d'éviter le biais introduit par l'opérateur de diversité du MOGA, cet algorithme applique le *sharing* à chaque front en veillant à ce que le moins bon individu du front de rang i ait une meilleure adaptation que le meilleur du rang $i + 1$.

Ainsi, cet algorithme présente de très bons résultats en terme de représentation du front. Toutefois, l'opérateur de diversité reste difficile à paramétrer.

Elitist Non-dominated Sorting Genetic Algorithm. Afin de palier à la dégradation possible des solutions engendrée par les algorithmes non-élitistes, Deb et al. (2000) proposent l'algorithme NSGA-II, qui ajoute au NSGA une étape d'élitisme. L'opérateur de diversité est également remplacé par une approche ne nécessitant aucun paramétrage de la part de l'utilisateur. Ces modifications font de cet algorithme l'un des plus performants et des plus utilisés actuellement pour les problèmes d'ingénierie (Sanaye and Hajabdollahi, 2010b; Hajabdollahi et al., 2011; Soulat et al., 2013; Buisson et al., 2013). Il est en effet très robuste et capable de décrire l'ensemble du front de Pareto. Cependant, les résultats montrent qu'il converge rapidement durant les premières générations et que cette convergence devient ensuite plus laborieuse à cause de l'opérateur de diversité (Deb, 2001). La littérature a également montré les limites du NSGA-II lorsque le nombre d'objectifs est supérieur à 4. Cela a conduit au développement du NSGA-III (Deb and Jain, 2014).

D.1.5 Opérateurs génétiques du NSGA-II

Comme l'illustre brièvement la section précédente, la littérature fait état de nombreux algorithmes génétiques. La différence majeure entre eux réside dans les opérateurs génétiques utilisés pour réaliser les diverses étapes (reproduction, mutation, sélection,

2. Zone de l'espace des objectifs qui regroupe beaucoup d'individus. La taille de la zone et la signification de "beaucoup" sont définies par l'utilisateur.

élitisme). Les performances de l'algorithme (rapidité et précision par exemple) dépendent également de ces opérateurs. Les opérateurs intervenant dans l'algorithme NSGA-II sont présentés. On pourra se reporter au livre de Deb (2001) pour d'autres exemples.

D.1.5.1 Sélection par tournois

Ce principe de sélection repose sur la compétition de n individus entre eux, n définissant la taille du tournoi. Dans un premier temps, n individus parmi les N_{pop} de la génération G sont choisis aléatoirement. Ensuite un classement est effectué sur la base de l'adaptation de chaque individu. Le meilleur individu intègre le groupe reproducteur. Ces deux opérations sont répétées autant de fois que nécessaire afin de constituer le groupe reproducteur.

Étant donné que le choix initial des individus est aléatoire, un même individu peut se retrouver plusieurs fois dans le groupe reproducteur. Le choix du nombre d'individus n est donc important pour le fonctionnement de l'algorithme génétique. Si $n \simeq N_{pop}$, alors la probabilité de choisir le même individu à chaque tournoi est très élevée. Cela nuit à la diversité du groupe reproducteur et, de fait, à l'évolution de la population. Dans le cas du NSGA-II, le tournoi est de taille $n = 2$ afin de permettre une grande diversité des individus du groupe reproducteur, favorisant l'exploration de l'espace des paramètres.

D.1.5.2 Croisement par *Simulated Binary Crossover*

Initialement, afin de respecter l'analogie avec la biologie, les gènes des individus étaient codés suivant une approche binaire (succession de 0 et de 1). Cependant, cette approche générerait des algorithmes peu robustes et présentant des problèmes de convergence. De plus, dans les cas pratiques d'ingénierie, les paramètres sont le plus souvent définis sur un espace continu, difficilement représentable avec un codage binaire. Le NSGA-II utilise un codage réel des gènes, beaucoup plus souple.

L'opérateur de croisement du NSGA-II est continu, ce qui veut dire qu'il permet la naissance d'individus dans une zone de l'espace des paramètres au voisinage des parents. La procédure de croisement débute par la sélection aléatoire de deux individus du groupe reproducteur :

$$\mathbf{p}^{(1)} = \left[p_i^{(1)} \right]_{1 \leq i \leq N_d} \quad (\text{D.1})$$

$$\mathbf{p}^{(2)} = \left[p_i^{(2)} \right]_{1 \leq i \leq N_d} \quad (\text{D.2})$$

On suppose que $p_i^{(1)} \leq p_i^{(2)}$. Ensuite, le croisement a une probabilité p_{c1} de se réaliser. S'il a effectivement lieu, les parents sont croisés paramètre par paramètre. Ce croisement est réalisé par le *Simulated Binary Crossover* via une distribution de probabilité polynomiale basée sur la distance entre les parents. Les deux enfants sont donnés par :

$$p_i^{(1*)} = 0.5 \left(p_i^{(1)} + p_i^{(2)} - \beta_i^* |p_i^{(1)} + p_i^{(2)}| \right), \quad \forall i \in [1, N_d] \quad (\text{D.3})$$

$$p_i^{(2*)} = 0.5 \left(p_i^{(1)} + p_i^{(2)} + \beta_i^* |p_i^{(1)} + p_i^{(2)}| \right), \quad \forall i \in [1, N_d] \quad (\text{D.4})$$

où β_i^* , le coefficient de croisement est défini par :

$$\beta_i^* = \begin{cases} (\alpha u_i)^{\frac{1}{\eta_c+1}} & \text{si } u_i \leq \frac{1}{\alpha} \\ \left(\frac{1}{2 - \alpha u_i}\right)^{\frac{1}{\eta_c+1}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{D.5})$$

avec u_i un nombre aléatoire entre 0 et 1, η_c un paramètre numérique constant,

$$\alpha = 2 - \gamma^{-\eta_c-1} \quad (\text{D.6})$$

et

$$\gamma = 1 + 2 \frac{\min [p_i^{(1)} - p_i^{(L)}, p_i^{(2)} - p_i^{(U)}]}{p_i^{(2)} - p_i^{(1)}} \quad (\text{D.7})$$

avec $p_i^{(L)}$ et $p_i^{(U)}$ les bornes inférieure et supérieure de l'intervalle de variation du paramètre p_i . Généralement, $p_{c1} = 0.9$ et $\eta_c = 10$.

D.1.5.3 Mutation polynomiale

La mutation est une étape qui va conduire à modifier spontanément les gènes d'un individu. Le NSGA-II utilise une mutation basée, comme pour le croisement, sur une distribution de probabilité polynomiale. La procédure débute avec le choix aléatoire d'un individu $\mathbf{p}^{(1)}$ dans le groupe reproducteur. Si la mutation, qui a une probabilité p_{mut} de se réaliser, a lieu, chaque paramètre de l'enfant ainsi créé est défini par :

$$p_i^{(1*)} = p_i^{(1)} + \delta_i^* (p_i^{(U)} - p_i^{(L)}) \quad (\text{D.8})$$

où δ_i^* , le coefficient de mutation polynomiale est défini par :

$$\delta_i^* = \begin{cases} (2u_i + (1 - 2u_i)(1 - \gamma)^{\eta_m+1})^{\frac{1}{\eta_m+1}} - 1 & \text{si } u_i \leq 0.5 \\ 1 - (2(1 - u_i) + 2(u_i - 0.5)(1 - \gamma)^{\eta_m+1})^{\frac{1}{\eta_m+1}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{D.9})$$

avec u_i un nombre aléatoire entre 0 et 1, η_m un paramètre numérique constant et

$$\gamma = \frac{\min [p_i^{(1)} - p_i^{(L)}, p_i^{(U)} - p_i^{(1)}]}{p_i^{(U)} - p_i^{(L)}} \quad (\text{D.10})$$

Généralement, $p_{mut} = 0.1$ et $\eta_m = 20$.

D.1.5.4 Évaluation de la diversité par *Crowding distance*

L'introduction de cet opérateur de diversité dans le NSGA-II a permis de s'affranchir de l'utilisation d'un paramètre de réglage pour la diversité. La *crowding distance* est une mesure de diversité, définie dans l'espace des objectifs. Elle repose sur la distance euclidienne entre les individus dans \mathcal{F} . Afin de la déterminer, il convient de trouver (par un algorithme de tri) les deux individus $\mathbf{p}^{(i+1)}$ et $\mathbf{p}^{(i-1)}$ les plus proches de $\mathbf{p}^{(i)}$ dans l'espace des objectifs. La *crowding distance* se calcule alors comme :

$$d_{crow}^{(i)} = \sum_{j=1}^{N_{obj}} \frac{y_j(\mathbf{p}^{(i+1)}) - y_j(\mathbf{p}^{(i-1)})}{y_j(\mathbf{p}^{(U)}) - y_j(\mathbf{p}^{(L)})} \quad (\text{D.11})$$

Le calcul de la distance est normalisé par l'intervalle de variation de chaque fonction objectif (Deb et al., 2002).

D.2 Conditionneurs

Les conditionneurs sont des outils permettant de transformer le vecteur des objectifs initial en un vecteur mieux adapté au moteur utilisé. C'est un outil optionnel, dont le choix est influencé par le moteur d'optimisation

D.2.1 Méthodes d'agrégation.

Ces méthodes vont chercher à combiner les différents objectifs en une fonction objectif globale y_G (*global objective function*) via l'utilisation de divers paramètres. L'optimisation conduit donc à un seul optimum, et il correspond à l'intersection entre le front de Pareto et la fonction globale dans l'espace des objectifs. Ainsi, l'utilisation successive de plusieurs paramètres permet de décrire le front de Pareto.

L'approche la plus commune consiste à effectuer une somme pondérée (*weighted sum*) (Marler and Arora, 2004) :

$$y_G(\mathbf{p}, \mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N_{obj}} w_i \cdot y_i(\mathbf{p}) \quad (\text{D.14})$$

avec $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{N_{obj}}$. Cependant, le choix des poids *a priori* est complexe lorsque l'on cherche un seul optimum. De plus, cette agrégation définit un hyperplan dans \mathcal{F} , et ne permet donc pas de capter les parties non-convexes du front de Pareto (Das and Dennis, 1997; Messac et al., 2000). Aussi, pour certains poids, l'optimum de la fonction globale pourrait ne pas être optimal au sens de Pareto. Enfin, lorsque l'on cherche à décrire le front de Pareto, une distribution uniforme des poids ne conduit pas nécessairement à une répartition uniforme des vecteurs des objectifs sur le front (Das and Dennis, 1998; Messac and Mattson, 2002).

Afin de résoudre certaines de ces difficultés, des variantes ont été développées. Le critère pondéré global (*weighted global criterion*) tel que $y_G(\mathbf{p}, \mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N_{obj}} (w_i \cdot y_i(\mathbf{p}))^g$ avec $g \in \mathbb{N}^+$, permet de décrire les parties non-convexes du front de Pareto car il possède des conditions nécessaires et suffisantes à l'optimalité au sens de Pareto (Athanasopoulos and Papalambros, 1996; Messac et al., 2000). Les méthodes des normes ou *compromise programming* (Koski and Silvennoinen, 1987; Chen et al., 1999) utilisent la norme de la différence pondérée des fonctions objectif avec le point utopique. Cela permet de décrire toutes les parties du front de Pareto, mais la détermination du point utopique est complexe. D'autres méthodes comme les sommes pondérées exponentielles (Athanasopoulos and Papalambros, 1996) et les sommes partielles (Koski and Silvennoinen, 1987) ont également été développées.

Le choix d'une fonction d'agrégation pertinente reste complexe et nécessite la normalisation et l'adimensionnalisation des fonctions objectif pour conserver un sens physique³. Bien que des solutions existent pour capter les zones non-convexes, la description uniforme n'est assurée par aucune des méthodes précédentes.

D.2.2 Méthodes basées sur les normales.

Les *normal based methods* peuvent être vues comme un changement de repère pour la recherche du minimum dans l'espace des objectifs (Das and Dennis, 1996, 1998; Messac et al., 2003).

Dans un cas à deux objectifs, une ligne reliant les points d'ancrage est définie. Quelle que soit la droite de direction quasi-normale partant de cette ligne et intersectant les

3. Bien que ceci ne soit pas souvent discuté dans la littérature.

frontières de \mathcal{F} , cette intersection fait partie du front de Pareto. Das and Dennis (1996) nomment cette "ligne" le *convex hull of individual minima* (CHIM) dans le cadre de leur méthode *Normal Boundary Intersection* (NBI). Afin de déterminer l'intersection entre une droite partant du CHIM et les frontières de \mathcal{F} , une optimisation mono-objectif sous contrainte est réalisée. En répétant cette opération le long de la ligne, on décrit entièrement le front de Pareto. Dans ce cas, une répartition uniforme des points de départ sur le CHIM conduit à une distribution uniforme des points sur le front. Cependant, cette méthode ne garantit pas une condition suffisante à l'optimalité au sens de Pareto. Messac et al. (2003) proposent l'utilisation d'un filtre pour éliminer les points qui sont non optimaux. Un autre inconvénient de la méthode est qu'elle nécessite la connaissance du point utopique et des points d'ancrage pour déterminer le CHIM.

D.2.3 Autres conditionneurs.

D'autres conditionneurs existent dans la littérature et Collette and Siarry (2013) en détaillent certains. On pourra citer, par exemple, l'ordonnancement lexicographique qui consiste à traiter chaque fonction objectif les unes après les autres en résolvant un problème mono-objectif avec contraintes. La méthode du compromis (*ϵ -constraint*) utilise la même approche mais diffère dans le choix des contraintes. La méthode du but programmé (*goal programming*) consiste à minimiser la distance entre un vecteur des objectifs choisi (souvent le point utopique) et un vecteur de \mathcal{F} dans une direction de recherche donnée. Elle se rapproche beaucoup des méthodes d'agrégation. Un cas très particulier de conditionneur est l'opérateur identité, n'entraînant aucune modification du vecteur des objectifs.

D.3 Formulation du krigage

D.3.1 Définitions et rappels de statistique

Le but de cette section n'est pas de fournir un cours complet sur les variables et les processus aléatoires, mais plutôt de se doter des notions nécessaires à la compréhension de la théorie du krigage. Pour une approche plus complète, on pourra se reporter au cours de Le Gall (2006).

Définition D.1 (Variable aléatoire). Soit un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$, avec Ω est l'inventaire des possibles, \mathcal{A} l'ensemble des énoncés et \mathbb{P} la loi de probabilité (*probability distribution*). Soit un espace mesurable (E, \mathcal{E}) . On appelle *variable aléatoire* (*v.a.*) toute application mesurable

$$Y : (\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) \rightarrow (E, \mathcal{E})$$

Si (E, \mathcal{E}) est \mathbb{R} muni de sa tribu borélienne $\mathcal{B}(\mathbb{R})$, alors on parle de variable aléatoire réelle (v.a.r.). Si $(E, \mathcal{E}) = (\mathbb{R}^{N_d}, \mathcal{B}(\mathbb{R}^{N_d}))$, on parle de Vecteur aléatoire réel (V.a.r.) constitué de plusieurs v.a.r. comme composantes.

On définit la fonction de répartition $F_Y(\cdot)$ et la densité de probabilité $f_Y(\cdot)$ de la v.a.r. Y comme

$$F_Y(x) = \mathbb{P}[Y \leq x] = \int_{-\infty}^x f_Y(u) du \quad (\text{D.15})$$

Dans le cas d'un V.a.r., la densité de probabilité contient les informations sur les lois de probabilités des composantes mais aussi sur les dépendances entre celles-ci.

On définit l'espérance d'une v.a.r. Y notée $\mathbb{E}[Y]$ comme l'intégrale de Y par rapport à la loi de probabilité en fonction des événements :

$$\mathbb{E}[Y] = \int_{\Omega} Y(\omega) d\mathbb{P}[\omega] = \int_{-\infty}^{+\infty} u f_Y(u) du \quad (\text{D.16})$$

L'espace des v.a.r. Y telles que $\mathbb{E}[|Y|^p] < +\infty$, $p \in (\mathbb{N} \setminus \{0\})$ est noté $\mathcal{L}^p(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ ou plus simplement \mathcal{L}^p . Les nombres $\mathbb{E}[|Y|^p]$ sont appelés moments d'ordre p de la v.a.r.. Dans la suite, on supposera que les composantes d'un V.a.r sont des v.a.r. de \mathcal{L}^2 et donc un V.a.r. est défini sur $\mathcal{L}_{N_d}^2$.

La covariance entre deux composantes d'un V.a.r. $Y_1, Y_2 \in \mathcal{L}^2$, notée $Cov[Y_1, Y_2]$, est l'écart conjoint des deux v.a.r. par rapport à leurs espérances respectives. Elle est définie comme :

$$Cov[Y_1, Y_2] = \mathbb{E}[(Y_1 - \mathbb{E}[Y_1])(Y_2 - \mathbb{E}[Y_2])] \quad (\text{D.17})$$

Définition D.2 (Variable aléatoire réelle gaussienne). On dit d'une v.a.r. qu'elle est *gaussienne standard* ou de loi $\mathcal{N}(0, 1)$ si sa densité de probabilité est

$$f_{\mathcal{N}(0,1)}(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp -\frac{u^2}{2} \quad (\text{D.18})$$

Une v.a.r Y est dite *gaussienne*, et notée $Y \sim \mathcal{N}(m, \sigma)$, si

$$\exists m \in \mathbb{R}, \sigma \in [0, +\infty[\text{ et } N \sim \mathcal{N}(0, 1) \mid Y = m + \sigma N \quad (\text{D.19})$$

La v.a.r. est $Y \in \mathcal{L}^2$ avec $\mathbb{E}[Y] = m$ et $Var[Y] = \sigma^2$, les moments d'ordre 1 et 2. Le moment d'ordre 2 est appelé *variance*.

Un V.a.r. $Y \in \mathcal{L}_{N_d}^2$ est dit *gaussien* si toutes ses composantes sont des v.a.r. gaussiennes. Une propriété de ces vecteurs gaussiens est que la loi conditionnelle⁴ d'un vecteur par rapport à un autre est toujours gaussienne.

Définition D.3 (Processus aléatoire). Soit un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ et un espace mesurable $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$. Un *processus aléatoire*, noté $\{Y(\mathbf{p})\}_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}}$, est une famille de v.a.r. définies sur le même espace $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$, et telles que pour toute partie finie de l'espace \mathcal{D} , la loi de probabilité du processus est connue.

Une *réalisation d'un processus aléatoire* est une fonction $Y(., \omega) : \mathbf{p} \in \mathcal{D} \rightarrow Y(\mathbf{p}, \omega) \in \mathbb{R}$ associée à un certain événement⁵ $\omega \in \Omega$.

Définition D.4 (Processus aléatoire gaussien). Soit un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$, un espace mesurable $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ et $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^{N_d}$. $\{Y(\mathbf{p})\}_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}}$ est un *processus aléatoire*

4. $\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)}$

5. Si on prend l'exemple d'un jeu de dés, un événement correspond à un tirage des dés.

gaussien si toutes ses lois sont gaussiennes :

$\forall n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \forall \mathbf{p}^{(1)}, \dots, \mathbf{p}^{(n)} \in \mathcal{D}$ le V.a.r. $(Y(\mathbf{p}^{(1)}), \dots, Y(\mathbf{p}^{(n)}))$ est gaussien

Remarques D.5. Le conditionnement d'un processus aléatoire gaussien $\{Y(\mathbf{p})\}_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}}$ par rapport à un événement $A \in \mathcal{A}$, noté $\{Y(\mathbf{p}) | A\}_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}}$ est un processus aléatoire conditionnel gaussien.

Par définition, un processus gaussien admet des moments d'ordre 1 et 2 finis et est pleinement défini par sa fonction de **moyenne** $m(\cdot)$ et son **noyau de covariance** $K(\cdot, \cdot)$. Formellement, cela se note (Rasmussen and Williams, 2006) :

$$\{Y(\mathbf{p})\}_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \sim \mathcal{PG}(m(\mathbf{p}), K(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)})) \quad (\text{D.20})$$

$$\text{avec } \begin{cases} m(\mathbf{p}) = \mathbb{E}[Y(\mathbf{p})] \\ K(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}) = \text{Cov}[Y(\mathbf{p}^{(1)}), Y(\mathbf{p}^{(2)})] \end{cases} \quad (\text{D.21})$$

$$(\text{D.22})$$

avec $\mathbf{p}^{(1)}$ et $\mathbf{p}^{(2)}$ sont deux vecteurs de \mathcal{D} .

Définition D.6 (Stationnarité à l'ordre 2). Un processus gaussien est stationnaire à l'ordre 2 si :

- sa moyenne est constante : $\forall \mathbf{p} \in \mathcal{D}, m(\mathbf{p}) = cte$
- son noyau de covariance $K(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)})$ est stationnaire : il ne dépend que de la différence entre $\mathbf{p}^{(1)}$ et $\mathbf{p}^{(2)}$ (vecteur de translation). Si cette différence est évaluée grâce la norme euclidienne ^a, alors le noyau est isotrope.

a. $\|\mathbf{p}^{(1)} - \mathbf{p}^{(2)}\|$

Lorsque le processus gaussien est stationnaire à l'ordre 2, son noyau de covariance peut s'écrire (Roustant et al., 2012) :

$$K(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}) = \sigma^2 R(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{D.23})$$

avec σ la variance du processus gaussien, R la fonction de corrélation et $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{N_d}$ le vecteur des paramètres de portée (*characteristic length-scales*). Les paramètres de portée ont la même unité que les composantes de \mathbf{p} leur correspondant.

Classiquement, afin d'obtenir un noyau de covariance stationnaire pour un espace de dimension N_d , la fonction de corrélation est construite comme le produit tensoriel de fonctions mono-dimensionnelles stationnaires $\tilde{R}(\cdot)$:

$$R(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^{N_d} \tilde{R}(p_k^{(1)}, p_k^{(2)}, \theta_k) \quad (\text{D.24})$$

avec $p_k^{(\cdot)}$ et θ_k , les k -ièmes composantes du vecteur de paramètres et du vecteur des paramètres de portée. Il existe dans la littérature de nombreuses fonctions $\tilde{R}(\cdot)$ éligibles (Rasmussen and Williams, 2006), et certaines parmi les plus utilisées sont présentées Tableau D.2.

Nom	$\tilde{R}(p^{(1)}, p^{(2)}, \theta)$
Gaussienne	$\exp\left(-\frac{(p^{(1)}-p^{(2)})^2}{2\theta^2}\right)$
Matérn $\nu = 5/2$	$\left(1 + \frac{\sqrt{5} p^{(1)}-p^{(2)} }{\theta} + \frac{5(p^{(1)}-p^{(2)})^2}{3\theta^2}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{5} p^{(1)}-p^{(2)} }{\theta}\right)$
Matérn $\nu = 3/2$	$\left(1 + \frac{\sqrt{3} p^{(1)}-p^{(2)} }{\theta}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{3} p^{(1)}-p^{(2)} }{\theta}\right)$
Exponentielle généralisée	$\exp\left(\left(-\frac{ p^{(1)}-p^{(2)} }{\theta}\right)^x\right)$ avec $0 < x \leq 2$

Tableau D.2 – Fonctions mono-dimensionnelles stationnaires et isotropes les plus couramment utilisées pour construire les fonctions de corrélations.

Krigeage	$m_K(\mathbf{p})$	$s_K^2(\mathbf{p})$
Simple	$v(\mathbf{p}) + \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - v(\mathbf{P}))$	$\hat{\sigma}^2 \left(1 - \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}(\mathbf{p})\right)$
Ordinaire	$\hat{\beta} + \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \hat{\beta} \mathbf{1}_{N_o})$	$\hat{\sigma}^2 \left(1 - \mathbf{r}(\mathbf{p})^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}(\mathbf{p}) + \frac{(1 - \mathbf{1}_{N_o}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}(\mathbf{p}))^2}{\mathbf{1}_{N_o}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{1}_{N_o}}\right)$

Tableau D.3 – Expression de la moyenne et de la variance de krigeage dans le cas du krigeage simple et ordinaire. Pour le krigeage simple, la tendance $v(\mathbf{p})$ est connue. Dans le cas du krigeage ordinaire la tendance est une constante inconnue β et $\mathbf{1}_{N_o} = [1]_{1 \leq i \leq N_o}$ est le vecteur unité de taille N_o .

Krigeage	$\hat{\beta}$	$\hat{\sigma}$
Simple	-	$\frac{1}{N_o} (\mathbf{y} - v(\mathbf{P}))^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - v(\mathbf{P}))$
Ordinaire	$(\mathbf{1}_{N_o}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{1}_{N_o})^{-1} \mathbf{1}_{N_o}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y}$	$\frac{1}{N_o} (\mathbf{y} - \hat{\beta} \mathbf{1}_{N_o})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \hat{\beta} \mathbf{1}_{N_o})$

Tableau D.4 – Expression des estimateurs dans le cas du krigeage simple et ordinaire. Pour le krigeage simple, la tendance $v(\mathbf{p})$ est connue et l'estimation de β n'est pas nécessaire.

D.3.2 Expression des termes du krigeage

Les expressions de la moyenne et de la variance de krigeage pour les types de krigeage simple et ordinaire sont résumées Tableau D.3. Les expressions des estimateurs sont présentées Tableau D.4.

D.3.3 Critères d'enrichissement

Cette section présente les critères d'enrichissement les plus utilisés dans la littérature. On distingue trois type de critères : ceux permettant d'ajouter une observations par fonction objectif approchée, ceux permettant d'en ajouter plusieurs par fonction, et ceux traitant les problèmes multiobjectifs via une seule observation.

D.3.3.1 Critères mono-observations mono-objectifs

Minimiser la moyenne de krigeage. Lorsque le métamodèle est utilisé comme carburant à l'optimisation, on ne recherche plus le minimum de y mais celui de son approximation m_K . Intuitivement, on peut penser qu'enrichir le métamodèle proche de son minimum courant permette de capter plus précisément le minimum de y (Ginsbourger et al., 2010). Le nouveau vecteur de paramètres \mathbf{p}' ajouté à \mathbf{P} est donc défini comme (Laurent, 2013) :

$$\mathbf{p}' = \arg \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} m_K(\mathbf{p}) \quad (\text{D.25})$$

Ce critère est clairement un critère d'exploitation. Cependant, il ne permet pas de s'affranchir des deux biais présentés car rien n'assure que le minimum courant ne soit pas un minimum local (Liu et al., 2017b) ou seulement un artefact du métamodèle (Ginsbourger et al., 2010). Il est très peu utilisé en pratique ou alors couplé avec d'autres critères (Liu et al., 2012).

Réduire l'incertitude de krigeage. Un des avantages des métamodèles probabilistes comme le krigeage, est qu'ils fournissent une estimation de l'incertitude de la prédiction. Pour le krigeage il s'agit de la variance s_K^2 . Ainsi, il est aisé d'enrichir le métamodèle dans les régions de l'espace des paramètres les plus incertaines en ajoutant le vecteur de paramètres qui maximise la variance de prédiction (ou MSE) (Ginsbourger et al., 2010). Ce critère, souvent nommé *maximum mean squared error* ou MMSE (Picheny et al., 2010), est formulé :

$$\mathbf{p}' = \arg \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} s_K^2(\mathbf{p}) \quad (\text{D.26})$$

Ce critère d'exploration va ainsi remplir itérativement l'espace des paramètres avec des observations réduisant l'incertitude maximale. C'est un des critères qui va fournir la meilleure prédiction au sens de la RMSE (Sasena et al., 2002). Cependant, comme $s_K^2(\mathbf{p}) = 0, \forall \mathbf{p} \in \mathcal{D}$, la MSE est une fonction fortement multimodale coûteuse à maximiser, comme le montre la Figure D.1(b). Par ailleurs, ce critère est très local et tend à ajouter de nombreuses observations aux frontières de l'espace des paramètres car c'est là que se situent beaucoup de zones incertaines⁶. Enfin, même si l'ajout d'observations via ce critère conduit à obtenir précisément le minimum de y , la convergence est longue et il est donc jugé inefficace en terme d'exploitation du métamodèle (Ginsbourger et al., 2010; Sasena

6. En effet, le krigeage est par définition une méthode d'interpolation.

et al., 2002; Liu et al., 2017b). Toutefois, l'estimation du maximum de variance a l'avantage de fournir une quantification de l'incertitude maximale du métamodèle, qui peut être utilisée comme critère d'arrêt de l'algorithme EGO.

Compromis moyenne/variance. Les deux critères précédents présentent bien l'antagonisme entre exploitation et exploration du métamodèle. De plus, la nécessité d'utiliser un critère étant un compromis des deux semble pertinente afin de pallier les inconvénients de chacun. Ce compromis peut être formulé de manière générale en posant un problème d'optimisation biobjectif :

$$\begin{cases} \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} m_K(\mathbf{p}) & \text{(D.27)} \\ \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} s_K^2(\mathbf{p}) & \text{(D.28)} \end{cases}$$

La solution de ce problème d'optimisation est l'ensemble des vecteurs de paramètres de l'ensemble de Pareto. L'inconvénient majeur de cette formulation reste le choix du nouveau vecteur \mathbf{p}' parmi ceux de l'ensemble (Ginsbourger, 2009). Ce critère, bien que prometteur reste donc particulièrement difficile à mettre en œuvre.

Minimiser la fonction de LCB. Une autre approche possible pour résoudre le problème d'optimisation précédent est de réaliser une agrégation des deux critères. La fonction de *lower confidence bound* (LCB) en $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ propose une agrégation comme (Forrester and Keane, 2009; Liu et al., 2017b) :

$$\text{LCB}(\mathbf{p}) = m_K(\mathbf{p}) - b s_K(\mathbf{p}) \quad \text{(D.29)}$$

avec $s_K(\mathbf{p}) = \sqrt{s_K^2(\mathbf{p})}$, l'écart-type de la prédiction (*standard deviation*). Le coefficient multiplicatif b est à définir par l'utilisateur. Comme le montrent les Figures D.1(c) et D.1(d), les grandes valeurs de b conduisent à privilégier l'exploration, tandis que les petites favorisent l'exploitation autour du minimum courant. Le critère d'enrichissement est donc :

$$\mathbf{p}' = \arg \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \text{LCB}(\mathbf{p}) \quad \text{(D.30)}$$

La mise en œuvre de ce critère est plus simple que précédemment mais le réglage de b s'avère compliqué. Pour leurs applications aéronautiques, Liu et al. (2017b) préconisent $b = 4$.

Maximiser la probabilité d'amélioration. La probabilité d'amélioration (*probability of improvement* - PI) est l'un des critères présentés par Jones et al. (1998) ayant pour but l'exploitation du métamodèle. En tirant profit de la formulation probabiliste du krigeage⁷, on va chercher à maximiser la probabilité que la prédiction en $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ soit plus petite qu'une valeur cible $T \in \mathbb{R}$. Cette probabilité est définie par :

$$\text{PI}(\mathbf{p}, T) = \mathbb{P}[Y(\mathbf{p}) \leq T | Y(\mathbf{P}) = \mathbf{y}] \quad \text{(D.31)}$$

$$= F_{\mathcal{N}(0,1)}\left(\frac{T - m_K(\mathbf{p})}{s_K(\mathbf{p})}\right) \quad \text{(D.32)}$$

7. $Y(\mathbf{p})$ est une réalisation du processus conditionnel $(Y(\mathbf{p}) | \mathbf{y}) \sim \mathcal{PG}(m_K(\cdot), s_K^2(\cdot))$

avec $F_{\mathcal{N}(0,1)}(\cdot)$ la fonction de répartition de la loi normale centrée réduite et $Y(\mathbf{p})$ une réalisation du processus conditionnel. Le critère permettant de trouver le nouveau vecteur de paramètres est donc :

$$\mathbf{p}' = \arg \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \text{PI}(\mathbf{p}, T) \quad (\text{D.33})$$

Ce critère représente un compromis entre une recherche locale et globale. Usuellement, on choisit comme valeur cible le minimum de la réponse parmi les observations : $T = \min(\mathbf{y})$. Cependant, comme le montre la Figure D.1(e), ce choix conduit à une recherche très locale qui ne deviendra globale que lorsque le voisinage de $\min(\mathbf{y})$ aura été bien échantillonné. Au contraire si l'on fixe une grande valeur cible ($T = \max(\mathbf{y})$), la recherche sera très globale et aura tendance à se comporter de manière similaire à la maximisation de la variance. Ainsi le choix de la valeur de T est complexe. Jones et al. (1998) proposent de réaliser plusieurs maximisations avec plusieurs valeurs de T afin d'obtenir plusieurs vecteurs et forcer ainsi l'exploration.

Maximiser l'amélioration espérée. Afin de résoudre les problèmes liés au choix d'une valeur cible du critère précédent, l'amélioration espérée (*expected improvement* - EI) a été proposée (Jones et al., 1998). Celle-ci profite également des propriétés du processus gaussien. La valeur de l'amélioration attendue au vecteur $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ quantifie l'amélioration que l'on pourrait attendre si la réponse est évaluée en ce point de l'espace des paramètres. L'amélioration en $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ est définie comme :

$$\mathcal{I}(\mathbf{p}) = \max(\min(\mathbf{y}) - Y(\mathbf{p}), 0) \quad (\text{D.34})$$

et l'amélioration espérée comme :

$$\text{EI}(\mathbf{p}) = \mathbb{E}[\mathcal{I}(\mathbf{p}) | Y(\mathbf{P}) = \mathbf{y}] \quad (\text{D.35})$$

$$\begin{aligned} &= (\min(\mathbf{y}) - m_K(\mathbf{p})) F_{\mathcal{N}(0,1)}\left(\frac{\min(\mathbf{y}) - m_K(\mathbf{p})}{s_K(\mathbf{p})}\right) \\ &+ s_K(\mathbf{p}) f_{\mathcal{N}(0,1)}\left(\frac{\min(\mathbf{y}) - m_K(\mathbf{p})}{s_K(\mathbf{p})}\right) \end{aligned} \quad (\text{D.36})$$

avec $F_{\mathcal{N}(0,1)}(\cdot)$ et $f_{\mathcal{N}(0,1)}(\cdot)$ la fonction de répartition et la densité de probabilité de la loi normale centrée réduite. Cette expression peut être vue comme une agrégation particulière du problème bi-objectif (Eqns. (D.27) et (D.28)) et fait clairement apparaître le compromis entre exploitation (premier terme) et exploration (second terme). L'EI a l'avantage d'être nul aux observations du plan d'expériences et d'être strictement positif ailleurs avec une amplitude qui augmente avec $s_K(\cdot)$ et qui diminue avec $m_K(\cdot)$, comme le montre la Figure D.1(f).

Le nouveau vecteur de paramètres fourni par ce critère est défini comme :

$$\mathbf{p}' = \arg \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \text{EI}(\mathbf{p}) \quad (\text{D.37})$$

C'est ce critère qui est principalement utilisé dans l'algorithme EGO (Jones et al., 1998) et dans de nombreuses études (Sasena et al., 2002; Ginsbourger, 2009; Binois, 2015; Mohammedi, 2016; Liu et al., 2017b). En effet, il présente l'avantage de fournir une quantification de l'amélioration attendue ce qui permet de définir un critère d'arrêt de l'algorithme EGO (Jones et al., 1998; Huang et al., 2006).

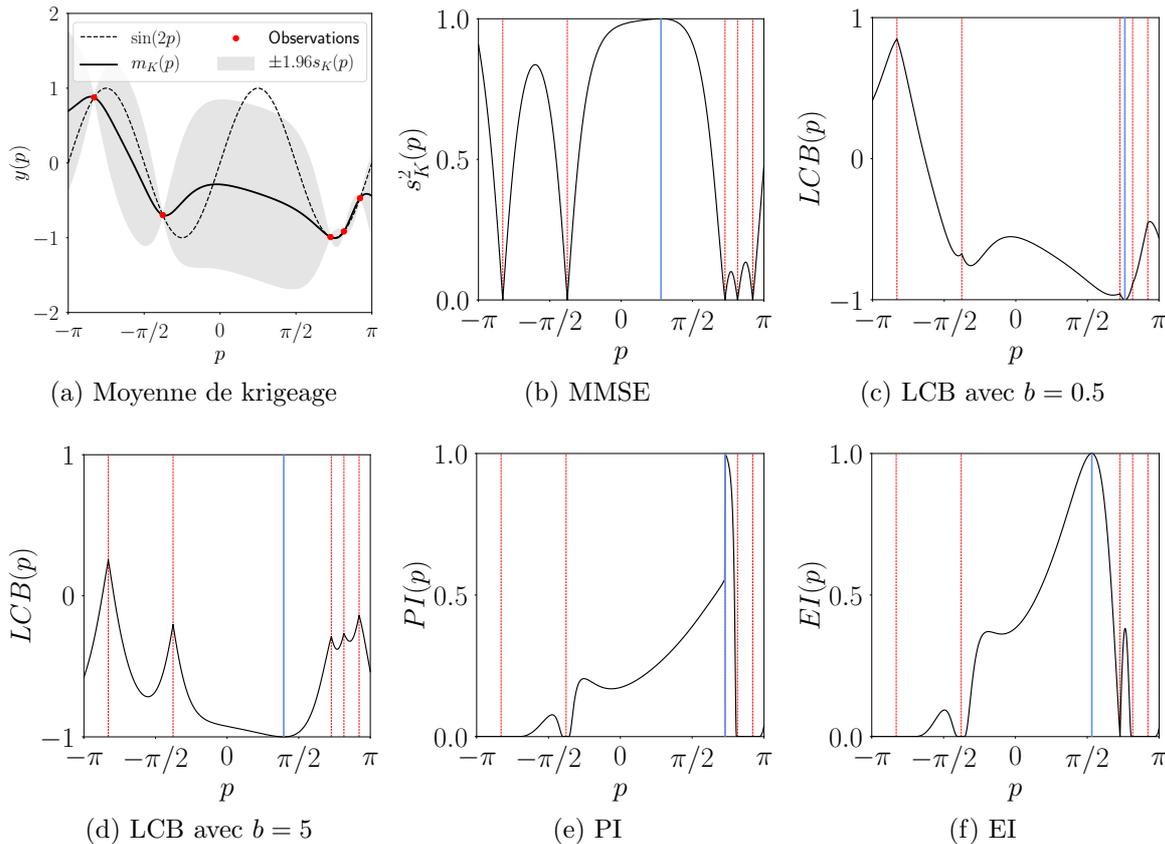


Figure D.1 – Comparaison des différents critères d'enrichissement (normalisés) pour l'approximation de la fonction $\cos(2p)$ avec 5 observations. - (a) La "vrai" réponse est en pointillée et l'approximation en trait plein. Les zones grises donnent les intervalles de confiances à 95%. - (b-f) La position des observations est marquée en pointillé rouge et la position de \mathbf{p}' en bleu.

Il a également donné lieu à de nombreuses variantes. Huang et al. (2006) proposent une version de l'EI dans le cas où l'on considère des observations bruitées.

Sóbester et al. (2005) utilisent une amélioration espérée pondérée (*weighted expected improvement*) afin de pouvoir régler la part de recherche globale et locale en pondérant plus ou moins le premier et le second terme de l'Eqn. (3.50).

L'amélioration espérée généralisée (*generalized expected improvement*) a également été proposée pour forcer une recherche plus globale. la fonction d'amélioration devient $\mathcal{I}^g(\mathbf{p}) = \max((\min(\mathbf{y}) - Y(\mathbf{p}))^g, 0)$ avec $g \in \mathbb{N}^+$ un paramètre de réglage : lorsqu'il est très grand la recherche est globale ; au contraire pour des valeurs petites, la recherche est locale⁸. Cette expression a notamment été utilisée par Sasena et al. (2002) avec des valeurs de g prédéfinies diminuant avec le nombre d'itérations de l'algorithme EGO. Ponweiser et al. (2008b) proposent de trouver plusieurs vecteurs de paramètres avec différentes valeurs de g et de réaliser ensuite un *clustering* pour trouver le meilleur (ou les meilleurs) à ajouter au plan d'expériences. Le choix d'une valeur pertinente de g reste compliqué et dépend du cas traité.

8. Lorsque $g = 0$, on retrouve l'expression de la probabilité d'amélioration et lorsque $g = 1$ on retrouve l'expression de l'EI.

Minimiser l'incertitude intégrée. Afin de bénéficier des avantages de la MMSE en terme d'exploration tout en compensant l'aspect trop local du critère, l'incertitude intégrée (*integrated mean squared error*) ou IMSE peut être considérée (Sacks et al., 1989; Picheny et al., 2010). Elle se calcule comme :

$$\text{IMSE} = \int_{\mathcal{D}} s_K^2(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (\text{D.38})$$

L'IMSE correspond donc à une mesure de l'incertitude moyenne du métamodèle alors que la MMSE mesure le risque d'erreur maximale de la prédiction (Picheny et al., 2010). Le vecteur de paramètres \mathbf{p}' enrichissant le plan d'expériences \mathbf{P} est celui qui, une fois ajouté, va minimiser l'IMSE :

$$\mathbf{p}' = \arg \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \int_{\mathcal{D}} s_K^2(\mathbf{p} | \{\mathbf{P}, \mathbf{p}'\}) d\mathbf{p} \quad (\text{D.39})$$

où $s_K^2(\mathbf{p} | \{\mathbf{P}, \mathbf{p}'\})$ est la MSE du métamodèle de krigage construit à partir de \mathbf{P} et du nouveau vecteur \mathbf{p}' . Ainsi, ce critère anticipe la valeur que prendra l'incertitude moyenne une fois la nouvelle observation ajoutée. De plus, comme présenté Section 3.3.3.1, $s_K^2(\cdot)$ ne dépend pas directement des observations, et donc la réponse $y(\mathbf{p}')$ n'est pas nécessaire au calcul de $s_K^2(\mathbf{p} | \{\mathbf{P}, \mathbf{p}'\})$. Cependant l'intégration numérique de la MSE peut être coûteuse d'autant plus qu'elle est incluse dans un processus de minimisation. Ce problème et de possibles solutions sont présentés dans les travaux de Picheny et al. (2010) et Chevalier et al. (2014).

Une variante de ce critère est proposée par Picheny et al. (2010), pour laquelle le métamodèle est enrichi autour d'une valeur de la réponse prédéfinie, $T \in \mathbb{R}$ (*target*), en considérant une IMSE pondérée. Ce critère est utilisé pour enrichir les métamodèles dans le cadre d'optimisation sous contraintes ou dans des problèmes dits d'inversion (Chevalier et al., 2014), pour lesquels on désire mesurer certaines propriétés de y dépendantes de T , typiquement la probabilité d'échec (*probability of failure*).

Réduire l'incertitude de localisation du minimum. La plupart des critères précédents cherchent à localiser la position la plus probable du minimum de y pour y ajouter une observation. Villemonteix et al. (2009) formulent ce problème autrement : quelles observations sont les plus pertinentes afin d'améliorer la connaissances de ce minimum ?

Ils ont donc proposé un critère qui mesure l'incertitude de localisation du minimum via l'entropie de Shannon, une valeur faible indiquant que le minimum est bien localisé. Le nouveau vecteur \mathbf{p}' sera celui qui minimisera l'entropie une fois ajouté au plan d'expériences⁹. Dans la même idée, Gramacy and Lee (2011) proposent l'intégration d'une amélioration espérée conditionnelle donnant des informations plus globales que l'EI. Scott et al. (2011) proposent un critère similaire pour des observations bruitées.

Picheny (2015) propose un critère basé sur la probabilité d'amélioration. Il définit le volume espéré d'une *excursion* qui serait inférieure au minimum courant comme :

$$ev(\mathbf{p}) = \int_{\mathcal{D}} \text{PI}(\mathbf{p}, \min(\mathbf{y})) d\mathbf{p} \quad (\text{D.40})$$

9. Le critère IMSE se rapproche de cette stratégie car il considère un gain postérieur.

avec $\text{PI}(\mathbf{p}, \min(\mathbf{y}))$ tel que défini Eqn. (D.32). Comme pour l'entropie de Shannon, un faible volume indique que le minimum est bien identifié. Le volume futur, après l'ajout d'une nouvelle observation \mathbf{p}' est défini comme :

$$EEV(\mathbf{p}') = \int_{\mathcal{D}} \mathbb{P}[Y(\mathbf{p}) \leq \min(\mathbf{y}, Y(\mathbf{p}')) \mid Y(\mathbf{P}) = \mathbf{y}] d\mathbf{p} \quad (\text{D.41})$$

Une formulation fermée de la probabilité existe et la démonstration en est faite par Picheny (2015). Le nouveau vecteur de paramètres sera celui qui, une fois ajouté, minimisera le volume :

$$\mathbf{p}' = \arg \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} EEV(\mathbf{p}) \quad (\text{D.42})$$

Cette minimisation poursuit deux objectifs : réduire l'incertitude locale et trouver le minimum de la réponse. Cependant, contrairement à l'EI, elle ne se focalise pas sur un gain immédiat mais plutôt différé en favorisant une exploration (Ginsbourger, 2009). Ainsi, ce critère a tendance à donner de meilleurs résultats que l'EI (Binois, 2015) mais le coût numérique est élevé car, comme l'IMSE, il nécessite l'intégration sur l'espace des paramètres (Picheny, 2015).

Synthèse et ouverture. Il existe donc énormément de critères d'enrichissement, chacun avec leurs avantages et inconvénients. Un consensus existe sur l'EI, jugé comme étant le plus performant lorsque l'on souhaite enrichir le métamodèle à des fins d'exploitation. Pour les autres critères, le choix dépend essentiellement du problème et des attentes. Pour des éléments de comparaison, on pourra se référer aux travaux de Sasena et al. (2002) ou à ceux de Liu et al. (2012).

Les travaux de Liu et al. (2017b) présentent la prise en compte de contraintes (géométriques ou autres) lors de la recherche du nouveau vecteur de paramètres pour la plupart des critères précédents.

D.3.3.2 Critères mono-objectifs multiobservations

Les critères présentés précédemment sont basiquement séquentiels. Cela veut dire qu'ils ne permettent de déterminer qu'une seule nouvelle observation à ajouter au plan d'expériences. Lorsque le simulateur est un solveur CFD, cela est désavantageux car les temps de calculs sont importants (jusqu'à plusieurs dizaines d'heures). Il serait donc intéressant de pouvoir réaliser plusieurs calculs en parallèle (Ginsbourger et al., 2010). Des critères multiobservations (*batch infill criteria*) ou des combinaisons de plusieurs critères mono-observations ont donc été proposés dans la littérature. L'objectif est de déterminer un ensemble de $q \geq 2$ vecteurs de paramètres $\mathbf{P}'_q \in \mathcal{D}^q$ tel que :

$$\mathbf{P}'_q = [\mathbf{p}'^{(i)}]_{1 \leq i \leq q} \quad (\text{D.43})$$

L'amélioration espérée multipoints. Le critère le plus utilisé pour répondre à ces attentes est sans conteste l'amélioration espérée multipoints (*multi-points expected improvement* - q-EI) proposée par Ginsbourger et al. (2010). Soit $\mathbf{P}_q = [\mathbf{p}^{(i)}]_{1 \leq i \leq q}$ un ensemble de q vecteurs, et $Y(\mathbf{P}_q)$ leurs réalisations. L'amélioration jointe¹⁰ en ces vecteurs s'exprime comme :

$$\mathcal{I}(\mathbf{P}_q) = \max(\min(\mathbf{y}) - \min(Y(\mathbf{P}_q)), 0) \quad (\text{D.44})$$

10. au sens probabiliste

Algorithme 7 : Stratégie heuristique proposée par Ginsbourger et al. (2010) pour la résolution du problème d'optimisation défini Eqn. (D.46).

Input : Nombre d'observations : q
Input : Plan d'expériences : \mathbf{P}
Input : Vecteur des réponses : \mathbf{y}
Input : Valeur du mensonge : L
Output : Matrice des vecteurs de paramètres : \mathbf{P}'_q

- 1 Initialiser la matrice des vecteurs : $\mathbf{P}'_q = \{\emptyset\}$
- 2 **for** ($i \leq q, i++$) **do**
- 3 Trouver le vecteur maximisant l'EI : $\mathbf{p}'^{(i)} = \arg \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \text{EI}(\mathbf{p})$
- 4 Ajouter ce vecteur au plan d'expériences : $\mathbf{P} = \mathbf{P} \cup \{\mathbf{p}'^{(i)}\}$
- 5 Ajouter le mensonge au vecteur des réponses $\mathbf{y} = \mathbf{y} \cup \{L\}$
- 6 Mettre à jour le métamodèle ($Y(\mathbf{p}) | \mathbf{y}$) (Section 3.3.3.1)
- 7 Mettre à jour la matrice : $\mathbf{P}'_q = \mathbf{P}'_q \cup \{\mathbf{p}'^{(i)}\}$
- 8 **end**

Cette généralisation de l'amélioration est jugée élitiste car la qualité de l'ensemble des q vecteurs dépend uniquement du plus performant. Le q-EI peut ainsi être vu comme l'application de l'EI à la variable aléatoire $\min(Y(\mathbf{P}_q))$ et s'exprime comme :

$$\text{q-EI}(\mathbf{P}_q) = \mathbb{E}[\mathcal{I}(\mathbf{P}_q) | Y(\mathbf{P}) = \mathbf{y}] \quad (\text{D.45})$$

Ainsi, la matrice \mathbf{P}'_q des q vecteurs de paramètres maximisant ce critère est ajoutée au plan d'expériences. Formellement cela s'écrit :

$$\mathbf{P}'_q = \arg \max_{\mathbf{P}_q \in \mathcal{D}^q} \text{q-EI}(\mathbf{P}_q) \quad (\text{D.46})$$

Ce critère, comme la réduction d'incertitude proposée par Villemonteix et al. (2009) et l'EEV, ne se focalise pas uniquement sur un gain de précision immédiat mais également sur une exploration plus globale.

Le q-EI n'a d'expression analytique que dans le cas où $q = 2$ comme le démontre Ginsbourger et al. (2010). Dans les cas où $q > 2$, ils l'évaluent via une simulation de Monte-Carlo. Cependant, dans le cadre du problème d'optimisation formulé Eqn. (D.46), le critère est évalué de nombreuses fois et cela devient coûteux numériquement.

Ils ont donc proposé une approximation via une stratégie heuristique présentée Alg. 7. Plutôt que de résoudre directement le problème d'optimisation de taille $N_o \times q$ afin de déterminer \mathbf{P}'_q , l'idée est de résoudre successivement q problèmes de taille N_o maximisant l'EI. A chaque fois, un seul vecteur $\mathbf{p}'^{(i)}$ est trouvé et ajouté de manière fictive au plan d'expériences. En effet, plutôt que d'interroger le simulateur, un mensonge L (*liar*) est ajouté au vecteur des réponses. Le métamodèle est ensuite mis à jour avec ces nouvelles informations et le prochain vecteur maximisant l'EI est ajouté. Ces étapes sont répétées tant que les q vecteurs n'ont pas été ajoutés. Une fois le nombre voulu atteint, la matrice \mathbf{P}'_q est obtenue et le simulateur peut être interrogé en parallèle.

Le choix du mensonge est important et Ginsbourger et al. (2010) en ont proposé plusieurs. Dans la méthode dite du *Kriging Believer* (KB), la moyenne de krigage évaluée au nouveau vecteur des paramètres est utilisée comme mensonge :

$$L = m_K(\mathbf{p}'^{(i)}) \quad (\text{D.47})$$

Le mensonge varie donc au cours des itérations. Cependant, il entraîne une concentration des q vecteurs autour du premier exploré par la stratégie et est donc peu efficace. Dans la méthode du *Constant Liar*, le mensonge est constant pour chaque itération. Trois valeurs possibles du mensonge ont été proposées :

$$\begin{cases} L = \min(\mathbf{y}) & \text{(D.48)} \\ L = \max(\mathbf{y}) & \text{(D.49)} \\ L = \text{mean}(\mathbf{y}) & \text{(D.50)} \end{cases}$$

avec \mathbf{y} le vecteur des réponses avant l'exécution de l'Alg. 7. Des grandes valeurs de L (Eqns. (D.49) et (D.50)) forcent l'exploration. Le mensonge définit Eqn. (D.48) donne les meilleurs résultats en terme d'exploitation (Ginsbourger et al., 2010).

Un des inconvénients de cette stratégie heuristique est que le métamodèle doit être mis à jour et ses paramètres ré-estimés (Alg. 7 - ligne 6). Pour des problèmes de grandes dimensions, cela peut être coûteux numériquement. Pour répondre à cette problématique, Zhan et al. (2017) proposent un *pseudo expected improvement*. Ils définissent une fonction d'influence des vecteurs de paramètres basée sur la fonction de corrélation. Au cours de la stratégie heuristique, le métamodèle est fixe et l'EI est multiplié par la fonction d'influence entre tous les vecteurs $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$ et le nouveau vecteur $\mathbf{p}^{(i)}$. Les résultats tendent à montrer des performances comparables en terme d'exploration et plus intéressantes pour le temps de calcul.

Incertitude intégrée à plusieurs observations. De par sa formulation, l'IMSE se prête bien à une généralisation pour une utilisation en *batch* (Chevalier et al., 2014). L'ensemble des q vecteurs de paramètres \mathbf{P}'_q est donc défini comme celui minimisant l'IMSE une fois ajouté au plan d'expériences initial :

$$\mathbf{P}'_q = \arg \min_{\mathbf{P}'_q \in \mathcal{D}^q} \int_{\mathcal{D}} s_K^2(\mathbf{p} | \{\mathbf{P}, \mathbf{P}'_q\}) d\mathbf{p} \quad \text{(D.51)}$$

Comme pour le q-EI, résoudre directement le problème d'optimisation de taille $N_o \times q$ ainsi formulé peut s'avérer coûteux quand le nombre de dimensions est grand. Une stratégie heuristique similaire au *Constant Liar* est préférée, bien que celle-ci semble sous-optimale en théorie (Chevalier et al., 2014).

Combinaison de critères mono-observations. Une autre méthode pour obtenir plusieurs nouveaux vecteurs de paramètres est de réaliser une combinaison de plusieurs critères présentés dans la section précédente. Quelques exemples sont résumés ici.

Liu et al. (2012) proposent une approche à $q = 2$ en associant de l'EI défini Eqn. (D.36) avec le critère basé sur le minimum de la moyenne de krigeage défini Eqn. (D.25). La finalité est l'exploitation du métamodèle. L'accroissement des performances d'une telle approche n'est pas significative par rapport à l'EI uniquement mais elle présente l'avantage de permettre des évaluations parallèles.

Feng et al. (2015) considèrent les deux termes de l'EI définis Eqn. (D.36) comme les deux objectifs d'un problème d'optimisation. Ils vont donc chercher à trouver un nombre fini de vecteurs $q \geq 2$ parmi l'ensemble des vecteurs de paramètres maximisant les deux termes. Une fois le front de Pareto obtenu, les deux point d'ancrage sont

sélectionnés comme nouvelles observations et les $q - 2$ vecteurs restants sont déterminés via une méthode de *clustering* (voir Section 3.4.2.1).

Liu et al. (2017b) considèrent une approche à $q = 4$ en associant l'EI (Eqn. (D.36)), le critère de minimum de la moyenne de krigage (Eqn. (D.25)), la LCB (Eqn. (D.29)) et la PI (Eqn. (D.32)). La méthode est testée avec quatre fonctions différentes et l'objectif est d'en localiser précisément le minimum. Les résultats tendent à montrer que cette association est plus efficace que le q-EI avec *Kriging Believer* dans chaque cas. Curieusement, la méthode est plus efficace lorsque le nombre d'observations du plan d'expérience initial est de l'ordre de la dimension de l'espace des paramètres ($N_o \simeq N_d$).

D.3.3.3 Critères multiobjectifs

Les critères d'exploitation présentés précédemment se concentrent sur une seule fonction. Ceci fait sens dans le cadre de l'optimisation mono-objectif. Dans le cas multiobjectif, un métamodèle par objectif est construit et ils sont utilisés en tant que carburant à l'optimisation. La solution de ce type de problèmes est :

- le front de Pareto dans l'espace des objectifs (le meilleur compromis entre les différents objectifs),
- le set de Pareto dans l'espace des paramètres (les antécédents des individus du front de Pareto).

Ainsi, il apparaît évident qu'enrichir chaque métamodèle dans la zone du minimum de leur réponse respective n'est pas très efficace ici¹¹. Intuitivement, construire une approximation précise de chaque réponse pour l'ensemble de l'espace des paramètres semble être la méthode la plus fiable pour réaliser l'optimisation. Cependant une telle approche peut se révéler coûteuse numériquement, surtout quand le nombre de paramètres et d'objectifs augmentent (Binois, 2015).

Ainsi, des critères d'enrichissement mieux adaptés aux problèmes multiobjectifs ont été proposés. Pour la plupart, ces critères sont séquentiels et ne fournissent qu'une seule nouvelle observation à réaliser. En effet, la littérature fait état d'un manque de critères multiobjectifs et multiobservations (Martínez-Frutos and Herrero-Pérez, 2016).

On définit pour la suite pour $\mathbf{p} \in \mathcal{D}$,

- le vecteur des fonctions de réponse du problème à N_{obj} objectifs,

$$\mathbf{y}(\mathbf{p}) = [y_i(\mathbf{p})]_{1 \leq i \leq N_{obj}} \quad (\text{D.52})$$

- la matrice des réponses associées au plan d'expériences $\mathbf{P} = [\mathbf{p}^{(i)}]_{1 \leq i \leq N_o}$,

$$\mathbf{Y} = \mathbf{y}(\mathbf{P}) = [y_j(\mathbf{p}^{(i)})]_{1 \leq i \leq N_o, 1 \leq j \leq N_{obj}} \subset \mathbb{R}^{N_o \times N_{obj}} \quad (\text{D.53})$$

- le vecteur des processus aléatoires approchant $\mathbf{y}(\mathbf{p})$,

$$\mathbb{Y}(\mathbf{p}) = [Y_i(\mathbf{p})]_{1 \leq i \leq N_{obj}} \quad (\text{D.54})$$

avec $Y_i(\mathbf{p})$ le processus aléatoire associé à la i -ième réponse,

11. Particulièrement lorsque les fonctions objectifs sont très antagonistes comme c'est le cas pour le nombre de Nusselt et le coefficient de perte de charge en thermique.

— le vecteur des prédictions par moyenne de krigeage des réponses $\mathbf{y}(\mathbf{p})$,

$$\mathbf{m}_{\mathbf{K}}(\mathbf{p}) = \left[m_K^{(i)}(\mathbf{p}) \right]_{1 \leq i \leq N_{obj}} \quad (\text{D.55})$$

avec $m_K^{(i)}(\cdot)$ la moyenne de krigeage de la i -ième réponse,

— le vecteur des variances de krigeage,

$$\mathbf{s}_{\mathbf{K}}^2(\mathbf{p}) = \left[s_K^{2(i)}(\mathbf{p}) \right]_{1 \leq i \leq N_{obj}} \quad (\text{D.56})$$

avec $s_K^{2(i)}(\cdot)$ la variance associée à la prédiction de la i -ième réponse,

— $\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}$, l'ensemble des réponses de \mathbf{Y} non-dominées et $\mathcal{P}_{\mathbf{P}}$ les antécédents correspondants (existants dans \mathbf{P}).

Critères du front de Pareto Comme dans le cas mono-objectif, une façon intuitive d'enrichir les métamodèles est d'ajouter les vecteurs du set de Pareto \mathbf{P}^* solution du problème :

$$\mathbf{P}^* = \arg \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \mathbf{m}_{\mathbf{K}}(\mathbf{p}) \quad (\text{D.57})$$

Cette approche est proposée par Shimoyama et al. (2012). Une difficulté repose sur le choix des nouvelles observations parmi \mathbf{P}^* . Dans leurs travaux, les auteurs utilisent une méthode de *clustering* pour définir un barycentre et choisissent de réaliser la nouvelle observation au vecteur des paramètres le plus proche de ce barycentre.

Afin de simplifier le choix de la nouvelle observation, Passos and Luersen (2017) proposent d'utiliser les informations données par la variance de krigeage. Le vecteur de paramètres maximisant le produit des variances des N_{obj} métamodèles est choisi comme nouvelle observation. Les auteurs affichent des résultats plus performants que des critères communément utilisés comme l'*expected hypervolume improvement* (présenté ci-après).

Cependant, tout comme sa version mono-objectif, cette méthode risque de concentrer les observations vers un optimum sans garantir qu'il s'agisse bien d'un optimum global (Shimoyama et al., 2012). On notera que cette approche permet de sélectionner plusieurs nouvelles observations.

Amélioration espérée multiobjectif. Au vu des résultats probants de l'amélioration espérée dans le cas mono-objectif, une vision multiobjectif en a été proposée (Svenson, 2011; Binois, 2015). La difficulté réside dans le remplacement du minimum des observations par une grandeur faisant sens dans le cas multiobjectif. Pour cela, différentes expressions de la fonction d'amélioration \mathcal{I} ont été proposées sur la base des observations non-dominées courantes $\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}$.

Le second chapitre de la thèse de Svenson (2011) présente la formulation mathématique et l'implémentation numérique de la plupart des fonctions d'amélioration connues de la littérature. Une comparaison approfondie de ces fonctions n'a pas mis en évidence la supériorité claire de l'une d'entre-elles. Pour la suite de ces travaux, nous retiendrons l'amélioration de l'hypervolume (*Hypervolume Improvement*) et l'amélioration maximin (*Maximin Improvement*).

Expected Hypervolume Improvement

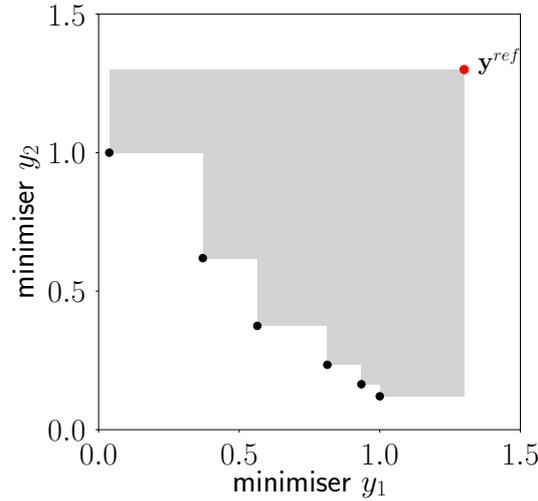


Figure D.2 – Mesure d'hypervolume pour un cas bi-objectif. L'aire grise représente la mesure de Lebesgue entre les observations non-dominées (en noir) et le point de référence (en rouge).

L'amélioration de l'hypervolume espérée est basée sur la fonction d'amélioration de l'hypervolume définie comme (Emmerich et al., 2006, 2011) :

$$\mathcal{I}_{\mathcal{H}}(\mathbf{p}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathcal{P}_{\mathbf{Y}} \preceq \mathbb{Y}(\mathbf{p}) \text{ ou } \mathbf{y}^{ref} \preceq \mathbb{Y}(\mathbf{p}) \\ \mathcal{H}(\mathbb{Y}(\mathbf{p}) \cup \mathcal{P}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{y}^{ref}) - \mathcal{H}(\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{y}^{ref}) & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{D.58})$$

où $\mathcal{H}(\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{y}^{ref})$ est la mesure de l'hypervolume donnée par la mesure de Lebesgue¹² entre l'ensemble $\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}$ et un point de référence \mathbf{y}^{ref} (Emmerich et al., 2006). L'amélioration est donc calculée dans l'espace des objectifs. La mesure d'hypervolume pour un cas bi-objectif est visible sur la Figure D.2. La Figure D.3(a) illustre la valeur de cette fonction d'amélioration Eqn. (D.58) dans un cas bi-objectif.

L'amélioration espérée de l'hypervolume (*Expected Hypervolume Improvement* - EHI), est définie comme :

$$\text{EHI}(\mathbf{p}) = \mathbb{E}[\mathcal{I}_{\mathcal{H}}(\mathbf{p}) | \mathbb{Y}(\mathbf{P}) = \mathbf{Y}] \quad (\text{D.59})$$

et le nouveau vecteur des paramètres \mathbf{p}' est celui qui maximise cette amélioration espérée :

$$\mathbf{p}' = \arg \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \text{EHI}(\mathbf{p}) \quad (\text{D.60})$$

Une discussion concernant le calcul de EHI est disponible dans la thèse de Svenson (2011) et dans Emmerich et al. (2011). Si le nombre de fonctions objectif $N_{obj} = 2$, alors une expression analytique existe (Binois and Picheny, 2016). Pour un nombre d'objectifs plus grand, Svenson (2011) propose d'utiliser l'algorithme *Sample Average Approximation* permettant d'obtenir une approximation de l'EHI mais au prix d'un effort numérique important.

Emmerich et al. (2006) soulignent qu'une plus grande valeur de $\mathcal{I}_{\mathcal{H}}(\mathbf{p})$ conduit à une meilleure solution du point de vue du front de Pareto si l'espace des objectifs est normalisé. S'il ne l'est pas, ce qui est souvent le cas en pratique, la mesure de l'amélioration

12. Cette mesure permet de généraliser la notion de volume à des espaces de dimensions supérieures à trois.

peut être biaisée par un des objectifs et une attention particulière doit être apportée à l'interprétation de la valeur.

Wagner et al. (2010) et Svenson (2011) ont comparé plusieurs critères sur la base de propriétés souhaitables pour les fonctions d'amélioration et de leurs espérances. Ces comparaisons ont mis en évidence le bon comportement et la robustesse de l'EHl dans différents cas. Shimoyama et al. (2012) montrent également qu'il se comporte mieux que le critère basé sur le front de Pareto de la prédiction.

Maximin Improvement

Svenson (2011) propose une fonction d'amélioration qui peut être vue comme la mesure de la distance entre un vecteur des objectifs $\mathbf{y}(\mathbf{p})$ et le front de Pareto courant $\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}$. Elle utilise la notion d' ϵ -indicateur binaire tel que défini par Zitzler et al. (2003) et s'exprime comme (Svenson and Santner, 2016) :

$$\mathcal{I}_{\mathcal{M}}(\mathbf{p}) = - \max_{\mathbf{p}^{(i)} \in \mathcal{P}_{\mathbf{P}}} \min_{j \in [1, N_{obj}]} (y_j(\mathbf{p}) - y_j(\mathbf{p}^{(i)})) \times 1_{\left[- \max_{\mathbf{p}^{(i)} \in \mathcal{P}_{\mathbf{P}}} \min_{j \in [1, N_{obj}]} (y_j(\mathbf{p}) - y_j(\mathbf{p}^{(i)})) > 0 \right]} \quad (\text{D.61})$$

avec $1_{[E]}$ une fonction qui vaut 0 si le test E est faux et 1 sinon. La Figure D.3(b) illustre la valeur de cette fonction d'amélioration dans un cas bi-objectif. Comme pour l'amélioration de l'hypervolume, cette fonction est sensible à la normalisation des fonctions objectifs. L'amélioration espérée maximin (*Expected Maximin Improvement* - EMI) s'exprime :

$$\text{EMI}(\mathbf{p}) = \mathbb{E} [\mathcal{I}_{\mathcal{M}}(\mathbf{p}) | \mathbb{Y}(\mathbf{P}) = \mathbf{Y}] \quad (\text{D.62})$$

et le nouveau vecteur des paramètres \mathbf{p}' est celui qui maximise cette amélioration espérée :

$$\mathbf{p}' = \arg \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} \text{EMI}(\mathbf{p}) \quad (\text{D.63})$$

Les performances de ce critère en terme d'approximation du front de Pareto et du set Pareto sont similaires à l'EHl (Binois, 2015; Svenson and Santner, 2016). De plus, il a l'avantage d'être plus simple à calculer numériquement et ne nécessite pas de paramètres extérieurs tel que \mathbf{y}^{ref} pour l'EHl.

Critère basé sur la mesure \mathcal{S} . Cette mesure a été introduite par Emmerich et al. (2006) comme une alternative à la *crowding distance* lors de la sélection des individus dans le cadre d'un algorithme évolutionnaire. Elle a été étendue en tant que critère d'enrichissement par Ponweiser et al. (2008a) et Wagner et al. (2010) sous le nom de *\mathcal{S} -Metric Selection* (SMS).

La mesure \mathcal{S} représente la contribution de l'intervalle de confiance inférieur LCB(Eqn. (D.29)) de la prédiction à la mesure d'hypervolume du front de Pareto courant $\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}$ et s'écrit :

$$\mathcal{S}(\mathbf{p}) = \mathcal{H}(\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{y}^{ref}) - \mathcal{H}([\mathbf{m}_{\mathbf{K}}(\mathbf{p}) - b \mathbf{s}_{\mathbf{K}}(\mathbf{p})] \cup \mathcal{P}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{y}^{ref}) \quad (\text{D.64})$$

avec $\mathbf{s}_{\mathbf{K}}(\mathbf{p}) = \left[\sqrt{s_K^{2(i)}(\mathbf{p})} \right]_{1 \leq i \leq N_{obj}}$ et le coefficient $b = -\Phi_{\mathcal{N}(0,1)}^{-1}(0, 5p^{N_{obj}})$ où $p = 0.5$ (Wagner et al., 2010).

L'utilisation de l'intervalle de confiance inférieur peut conduire à une prédiction dans l'espace des objectifs légèrement trop optimiste. Afin de prendre en compte cette possibilité, l' ϵ -dominance du front est considérée avec ϵ qui varie selon un schéma adaptatif dépendant de l'amplitude du front de Pareto $\mathcal{P}_{\mathbf{Y}}$ (Ponweiser et al., 2008a).

L' ϵ -dominance est définie comme (Jacquenot, 2010) :

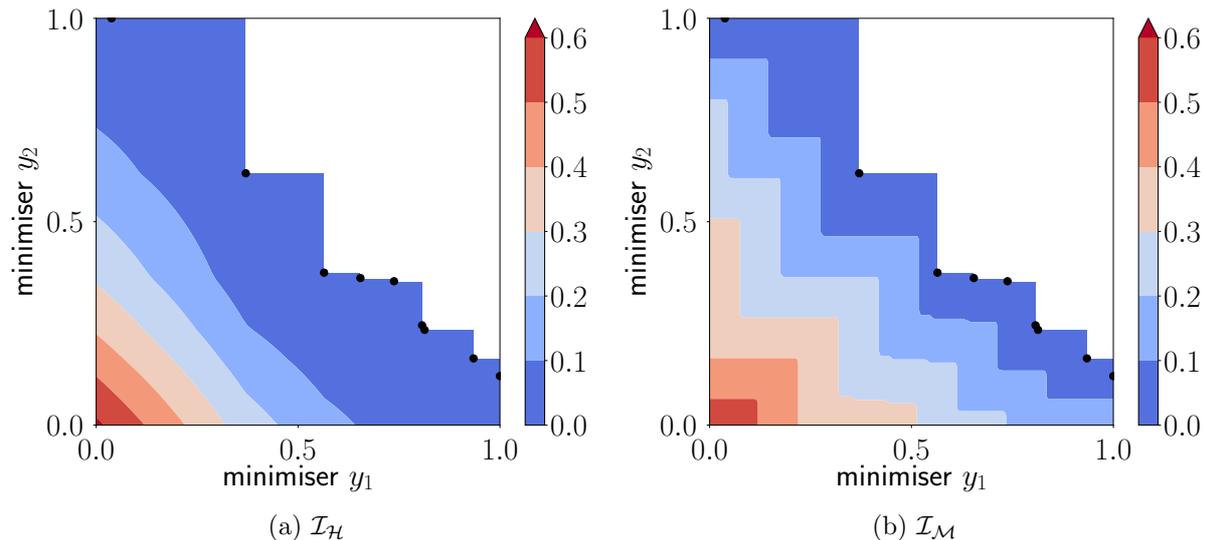


Figure D.3 – Contour de la valeur des deux fonctions d'amélioration dans l'espace des objectifs pour un cas biobjectif (normalisé). Les observations non-dominées \mathcal{P}_Y apparaissent en noir. Pour l'amélioration de l'hypervolume, le point de référence \mathbf{y}^{ref} vaut $\{2, 2\}$ et n'apparaît pas ici.

Définition D.7 (ϵ -dominance). Soient deux vecteurs de paramètres $\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)} \in \mathcal{D}$. On dit que $\mathbf{p}^{(1)}$ ϵ -domine $\mathbf{p}^{(2)}$, si :

$$\begin{aligned} \forall i \in [1, N_{obj}], \quad & y_i(\mathbf{p}^{(1)}) \leq y_i(\mathbf{p}^{(2)}) \\ \exists i \in [1, N_{obj}], \quad & y_i(\mathbf{p}^{(1)}) < y_i(\mathbf{p}^{(2)}) - \epsilon_i \end{aligned}$$

Cette relation est notée $\mathbf{p}^{(1)} \preceq_{\epsilon} \mathbf{p}^{(2)}$.

La Figure D.4(b) illustre cette dominance pour un cas à deux objectifs. On remarque graphiquement une zone non-dominée autour du vecteur des objectifs $\mathbf{y}(\mathbf{p}^{(A)})$. Les valeurs de ϵ_i peuvent être différentes pour chaque objectif et sont à définir en fonction des cas.

Deux cas de figure sont considérés pour le calcul de $\mathcal{S}(\mathbf{p})$ comme l'illustre la Figure D.4(a). Dans le cas où l'intervalle inférieur est non- ϵ -dominé, alors on mesure l'augmentation de l'hypervolume selon Eqn. (D.64). Si $\mathbf{m}_K(\mathbf{p}) - b \mathbf{s}_K(\mathbf{p})$ est dominée par certaines observations du front de Pareto courant alors la valeur de la métrique est remplacée par une pénalité (Wagner et al., 2010).

Le nouveau vecteur de paramètres à ajouter au plan d'expériences est alors :

$$\mathbf{p}' = \arg \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} (-\mathcal{S}(\mathbf{p})) \quad (\text{D.65})$$

Une expression analytique de ce critère existe quelque soit le nombre d'objectifs (Binois and Picheny, 2016). Comme l'EHI, le critère SMS utilise la notion d'hypervolume et nécessite donc un point de référence. Il reste cependant moins coûteux numériquement car il utilise directement la moyenne de krigage et ne fait pas intervenir le processus aléatoire (Binois and Picheny, 2016).

Volume espéré d'excursion - EEV. Les critères précédents reposent essentiellement sur une approche heuristique de l'enrichissement car ils sont très complexes à mettre en

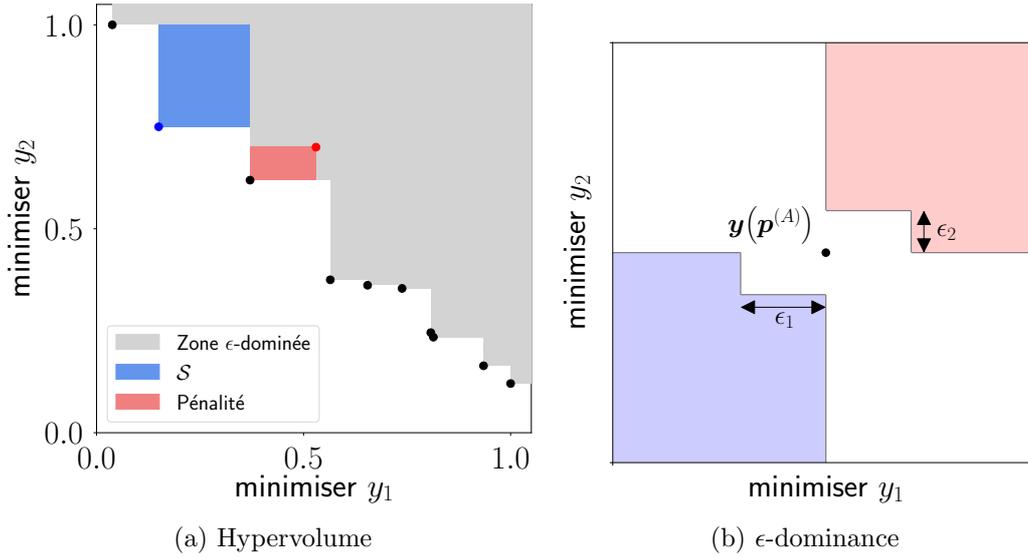


Figure D.4 – Mesure de l'hypervolume ajouté par l'intervalle inférieur de la prédiction par moyenne de krigeage \mathcal{S} (a) et illustration de l' ϵ -dominance (b). Les observations non-dominées \mathcal{P}_Y apparaissent en noir. Si $\mathbf{m}_K(\mathbf{p}) - b \mathbf{s}_K(\mathbf{p})$ est non- ϵ -dominé (en bleu) alors on ajoute \mathcal{S} . S'il est dominée (en rouge), on pénalise.

œuvre. Picheny (2015) propose d'étendre la formulation du volume espéré d'excursion (EEV) aux cas multiobjectifs.

Le volume d'excursion est ainsi donné par l'intégrale de la probabilité que le vecteur des réponses $\mathbf{y}(\mathbf{p})$ soit non-dominé par les vecteurs du front de Pareto des observations \mathcal{P}_Y . Formellement cela s'écrit :

$$ev(\mathbf{p}) = \int_{\mathcal{D}} \mathbb{P}[\mathbf{y}(\mathbf{p}) \not\leq \mathcal{P}_Y \mid \mathbb{Y}(\mathbf{P}) = \mathbf{Y}] d\mathbf{p} \quad (\text{D.66})$$

L'incertitude est donc mesurée par le volume dans l'espace des paramètres de l'ensemble d'excursion tel que son image dans l'espace des objectifs domine le front de Pareto courant (Binois, 2015). Quand $ev(\mathbf{p})$ est grand, la région de l'espace des paramètres est probablement meilleure que \mathcal{P}_P . Inversement, si le front de Pareto courant se rapproche du "réel"¹³, alors le volume devient petit.

A partir de cette mesure, un critère d'enrichissement est défini, basé sur le gain qu'apportera le nouveau vecteur des paramètres en terme de réduction de volume :

$$EEV(\mathbf{p}') = \mathbb{E} \left[\int_{\mathcal{D}} \mathbb{P}[\mathbf{y}(\mathbf{p}) \not\leq \{\mathcal{P}_Y \cup \mathbb{Y}(\mathbf{p}')\}] \mid \{\mathbb{Y}(\mathbf{P}) = \mathbf{Y}, \mathbb{Y}(\mathbf{p}') = \mathbf{Y}_{n+1}\}] d\mathbf{p} \right] \quad (\text{D.67})$$

avec $\mathbf{Y}_{n+1} \sim \mathcal{PG}(\mathbf{m}_K(\mathbf{p}'), \mathbf{s}_K^2(\mathbf{p}'))$, la réalisation des processus gaussiens. Le détail de cette expression est disponible dans les travaux de Picheny (2015). Ainsi le nouveau vecteur de paramètres est défini comme :

$$\mathbf{p}' = \arg \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{D}} EEV(\mathbf{p}) \quad (\text{D.68})$$

Une comparaison de ce critère et du SMS donne des résultats équivalents sur des indicateurs du front de Pareto (Picheny, 2015). De part la nécessité d'intégrer la probabilité sur l'espace des paramètres, le coût numérique de ce critère est élevé. Il a cependant

13. au sens du simulateur

l'avantage de ne pas être sensible à la différence d'échelle entre les objectifs (contrairement aux trois précédents) et ne nécessite pas de paramètres extérieurs.

Synthèse. Comme dans le cas mono-objectif, il n'existe pas un critère fondamentalement meilleur que les autres pour ce qui est des résultats. Le choix sera dépendant du cas, à la lumière des avantages et inconvénients de chaque critère. On notera que les critères multiobjectifs ont tous pour but l'exploitation des métamodèles, *i.e.* l'amélioration du front de Pareto.

Bibliographie

- Abarham, M., Chafekar, T., Hoard, J. W., Salvi, A., Styles, D. J., Sluder, C. S., and Assanis, D. (2013). In-situ visualization of exhaust soot particle deposition and removal in channel flows. *Chemical engineering science*, 87 :359–370.
- Abarham, M., Hoard, J., Assanis, D. N., Styles, D., Curtis, E. W., and Ramesh, N. (2010). Review of soot deposition and removal mechanisms in EGR coolers. *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, 3(2010-01-1211) :690–704.
- Abd-Elhady, M. and Malayeri, M. (2013). Asymptotic characteristics of particulate deposit formation in exhaust gas recirculation (EGR) coolers. *Applied Thermal Engineering*, 60(1) :96–104.
- Abd-Elhady, M., Zornek, T., Malayeri, M., Balestrino, S., Szymkowicz, P., and Müller-Steinhagen, H. (2011). Influence of gas velocity on particulate fouling of exhaust gas recirculation coolers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(4) :838 – 846.
- Abdelaziz, O. A. A. (2009). *Development of multi-scale, multi-physics, analysis capability and its application to novel heat exchangers design and optimization*. PhD thesis, University of Maryland, College Park.
- Ahmadi, P., Hajabdollahi, H., and Dincer, I. (2011). Cost and entropy generation minimization of a cross-flow plate fin heat exchanger using multi-objective genetic algorithm. *Journal of Heat Transfer*, 133 :021801.
- Allaire, G. (2007). *Conception optimale de structures*, volume 58. Springer.
- ANSYS (2017). Fluent, release 18.0, help system.
- Athan, T. W. and Papalambros, P. Y. (1996). On note on weighted criteria methods for compromise solutions in multi-objective optimization. *Engineering Optimization*, 27(2) :155–176.
- Aubert, S., Mastrippolito, F., Rendu, Q., Buisson, M., and Ducros, F. (2017). Planar slip condition for mesh morphing using radial basis functions. *Procedia Engineering*, 203 :349 – 361. 26th International Meshing Roundtable, IMR26, 18-21 September 2017, Barcelona, Spain.

- Awad, M. and Muzychka, Y. (2012). *Heat Exchanger - Basics Design Applications*, chapter 1 - Thermodynamic Optimization, pages 3–52. InTech.
- Ayachit, U. (2015). *The Paraview guide : a parallel visualization application*. Kitware, Inc.
- Batina, J. T. (1990). Unsteady euler airfoil solutions using unstructured dynamic meshes. *AIAA journal*, 28(8) :1381–1388.
- Baudin, M., Dutfoy, A., Iooss, B., and Popelin, A.-L. (2015). Openturns : An industrial software for uncertainty quantification in simulation.
- Bect, J., Ginsbourger, D., Li, L., Picheny, V., and Vazquez, E. (2012). Sequential design of computer experiments for the estimation of a probability of failure. *Statistics and Computing*, 22(3) :773–793.
- Beer, F. P., Johnston, E. R., and DeWolf, J. T. (2004). *Mechanics of materials*, pages 470–477. Tata McGraw-Hill.
- Bejan, A. (1977). The concept of irreversibility in heat exchanger design : counterflow heat exchangers for gas-to-gas applications. *ASME J. Heat Transfer*, 99(3) :374–380.
- Bejan, A. (2006). *Advanced Engineering Thermodynamics*. Jo, 3rd edition.
- Bell, C. (2016). ht : Heat transfer component of chemical engineering design library (chedl). <https://github.com/CalebBell/ht>.
- Bell, I. H., Wronski, J., Quoilin, S., and Lemort, V. (2014). Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library coolprop. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(6) :2498–2508.
- Bergman, T. L., Lavine, A. S., Incropera, F. P., and Dewitt, D. P. (2011). *Fundamentals of heat and mass transfer - 7th Edition*. John Wiley & Sons New York.
- Bhuiyan, A. A. and Islam, A. S. (2016). Thermal and hydraulic performance of finned-tube heat exchangers under different flow ranges : A review on modeling and experiment. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 101 :38 – 59.
- Bhutta, M. M. A., Hayat, N., Bashir, M. H., Khan, A. R., Ahmad, K. N., and Khan, S. (2012). Cfd applications in various heat exchangers design : A review. *Applied Thermal Engineering*, 32 :1–12.
- Biancolini, M., Viola, I., and Riotte, M. (2014). Sails trim optimisation using cfd and rbf mesh morphing. *Computers & Fluids*, 93 :46–60.
- Billard, F. and Laurence, D. (2012). A robust $k - \varepsilon - \overline{v^2}/k$ elliptic blending turbulence model applied to near-wall, separated and buoyant flows. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 33(1) :45–58.
- Binois, M. (2015). *Uncertainty quantification on pareto fronts and high-dimensional strategies in bayesian optimization, with applications in multi-objective automotive design*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne.

- Binois, M. and Picheny, V. (2016). Gpareto : An r package for gaussian-process based multi-objective optimization and analysis.
- Bishop, C. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer New York. 423–450.
- Brochu, E., Cora, V. M., and de Freitas, N. (2010). A tutorial on bayesian optimization of expensive cost functions, with application to active user modeling and hierarchical reinforcement learning. Technical report, Department of Computer Science, University of British Columbia.
- Buhmann, M. D. (2000). Radial basis functions. *Acta Numerica 2000*, 9 :1–38.
- Buisson, M. (2008). Couplage d’algorithmes génétiques avec le logiciel de paramétrisation cfd turb’opty. Master’s thesis, Université Claude Bernard Lyon 1.
- Buisson, M., Ferrand, P., Soulat, L., Aubert, S., Moreau, S., Rambeau, C., and Henner, M. (2013). Optimal design of an automotive fan using the turb’opty meta-model. *Computers & Fluids*, 80 :207–213.
- Casarsa, L., Cakan, M., and Arts, T. (2002). Characterization of the velocity and heat transfer fields in an internal cooling channel with high blockage ratio. In *ASME Turbo Expo 2002 : Power for Land, Sea, and Air*, pages 451–458. American Society of Mechanical Engineers.
- Cavazzuti, M., Agnani, E., and Corticelli, M. A. (2015). Optimization of a finned concentric pipes heat exchanger for industrial recuperative burners. *Applied Thermal Engineering*, 84 :110 – 117.
- Chaudhuri, P. D., Diwekar, U. M., and Logsdon, J. S. (1997). An automated approach for the optimal design of heat exchangers. *Industrial & engineering chemistry research*, 36(9) :3685–3693.
- Chauvet, P. (2008). *Aide-mémoire de géostatistique linéaire*. Presses des MINES.
- Chen, W., Wiecek, M. M., and Zhang, J. (1999). Quality utility - a compromise programming approach to robust design. *Journal of Mechanical Design*, 121(2) :179.
- Chevalier, C., Picheny, V., and Ginsbourger, D. (2014). Kriginv : An efficient and user-friendly implementation of batch-sequential inversion strategies based on kriging. *Computational statistics & data analysis*, 71 :1021–1034.
- Ciuffini, A., Scattina, A., Carena, F., Roberti, M., Rivalta, G. T., Chiavazzo, E., Fasano, M., and Asinari, P. (2016). Multiscale computational fluid dynamics methodology for predicting thermal performance of compact heat exchangers. *Journal of Heat Transfer*, 138(7) :071801.
- Collette, Y. and Siarry, P. (2013). *Multiobjective optimization : principles and case studies*. Springer Science & Business Media.
- Costa, A. L. and Queiroz, E. M. (2008). Design optimization of shell-and-tube heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 28(14) :1798–1805.

- Cottle, R. W. (1974). Manifestations of the schur complement. *Linear algebra and its Applications*, 8(3) :189–211.
- Culioli, J.-C. (2012). *Introduction à l'optimisation*. Références sciences. Ellipses, 2e édition.
- Damblin, G., Couplet, M., and Iooss, B. (2013). Numerical studies of space-filling designs : optimization of latin hypercube samples and subprojection properties. *Journal of Simulation*, 7(4) :276–289.
- Das, I. and Dennis, J. E. (1996). Normal-boundary intersection : An alternate method for generating pareto optimal points in multicriteria optimization problems. Technical Report 96-62, NASA - ICASE.
- Das, I. and Dennis, J. E. (1997). A closer look at drawbacks of minimizing weighted sums of objectives for pareto set generation in multicriteria optimization problems. *Structural Optimization*, 14(1) :63–69.
- Das, I. and Dennis, J. E. (1998). Normal-boundary intersection : A new method for generating the pareto surface in nonlinear multicriteria optimization problems. *SIAM Journal on Optimization*, 8(3) :631–657.
- de Boer, A., Van der Schoot, M., and Bijl, H. (2007). Mesh deformation based on radial basis function interpolation. *Computers & Structures*, 85(11) :784–795.
- De Weck, O. L. (2004). Multiobjective optimization : History and promise. In *Invited Key-note Paper, GL2-2, The Third China-Japan-Korea Joint Symposium on Optimization of Structural and Mechanical Systems, Kanazawa, Japan*, volume 2, page 34.
- Deb, K. (1995). *Optimization for engineering design : Algorithms and examples*. PHI Learning Pvt. Ltd. Tenth Printing (May 2009).
- Deb, K. (2001). *Multi-objective optimization using evolutionary algorithms*, volume 16. John Wiley & Sons.
- Deb, K., Agrawal, S., Pratap, A., and Meyarivan, T. (2000). A fast elitist non-dominated sorting genetic algorithm for multi-objective optimization : Nsga-ii. In *International Conference on Parallel Problem Solving From Nature*, pages 849–858. Springer.
- Deb, K. and Jain, H. (2014). An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point-based nondominated sorting approach, part i : Solving problems with box constraints. *IEEE Trans. Evolutionary Computation*, 18(4) :577–601.
- Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S., and Meyarivan, T. (2002). A fast and elitist multiobjective genetic algorithm : Nsga-ii. *IEEE transactions on evolutionary computation*, 6(2) :182–197.
- Dehoux, F. (2012). *Modélisation statistique des écoulements turbulents en convection forcée, mixte et naturelle*. PhD thesis, Poitiers.
- Dehoux, F., Benhamadouche, S., and Manceau, R. (2017). An elliptic blending differential flux model for natural, mixed and forced convection. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 63 :190–204.

- Dempster, A. P., Laird, N. M., and Rubin, D. B. (1977). Maximum likelihood from incomplete data via the em algorithm. *Journal of the royal statistical society. Series B (methodological)*, pages 1–38.
- Dréo, J., Pétrowski, A., Siarry, P., and Taillard, E. (2006). *Metaheuristics for hard optimization : methods and case studies*. Springer Science & Business Media.
- Duchaine, F. (2007). *Optimisation de forme multi-objectif sur machines parallèles avec méta-modèles et coupleurs. Application aux chambres de combustion aéronautiques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse.
- Dupuy, D., Helbert, C., Franco, J., et al. (2015). Dicedesign and diceeval : Two r packages for design and analysis of computer experiments. *Journal of Statistical Software*, 65(11) :1–38.
- Durbin, P. A. (1991). Near-wall turbulence closure modeling without “damping functions”. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 3(1) :1–13.
- El Attar, A. (2012). *Estimation robuste des modeles de mélange sur des données distribuées*. PhD thesis, Université de Nantes.
- El-Behery, S. M. and Hamed, M. H. (2011). A comparative study of turbulence models performance for separating flow in a planar asymmetric diffuser. *Computers & Fluids*, 44(1) :248 – 257.
- Emmerich, M. T., Deutz, A. H., and Klinkenberg, J. W. (2011). Hypervolume-based expected improvement : Monotonicity properties and exact computation. In *Evolutionary Computation (CEC), 2011 IEEE Congress on*, pages 2147–2154. IEEE.
- Emmerich, M. T., Giannakoglou, K. C., and Naujoks, B. (2006). Single-and multiobjective evolutionary optimization assisted by gaussian random field metamodels. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 10(4) :421–439.
- Epstein, N. (1977). Fouling in heat exchangers. In *Sixth International Heat Transfer Conference.*, volume 6, pages 235–253.
- ERCOFTAC (2000). *Industrial Computational Fluid Dynamics of Single-Phase Flow - Best Practice Guidelines*. European Research Community On Flow Turbulence and Combustion, https://www.ercoftac.org/publications/ercoftac_best_practice_guidelines/single-phase_flows_spf/.
- EDF R&D (2018a). Code_saturne version 5-1. <https://www.code-saturne.org/>.
- EDF R&D (2018b). Code_saturne version 5-1 theory guide. <https://www.code-saturne.org/cms/sites/default/files/docs/5.1/theory.pdf>.
- Farhat, C., Degand, C., Koobus, B., and Lesoinne, M. (1998). Torsional springs for two-dimensional dynamic unstructured fluid meshes. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 163(1) :231–245.
- Feng, Z., Zhang, Q., Zhang, Q., Tang, Q., Yang, T., and Ma, Y. (2015). A multiobjective optimization based framework to balance the global exploration and local exploitation in expensive optimization. *Journal of Global Optimization*, 61(4) :677–694.

- Ferziger, J. H. and Peric, M. (2012). *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Science & Business Media.
- Foli, K., Okabe, T., Olhofer, M., Jin, Y., and Sendhoff, B. (2006). Optimization of micro heat exchanger : Cfd, analytical approach and multi-objective evolutionary algorithms. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(5) :1090–1099.
- Fonseca, C. M. and Fleming, P. J. (1993). Genetic algorithms for multiobjective optimization : Formulation, discussion and generalization. In *Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms*, pages 416–423.
- Forrester, A. I. and Keane, A. J. (2009). Recent advances in surrogate-based optimization. *Progress in Aerospace Sciences*, 45(1-3) :50–79.
- Franco, J. (2008). *Planification d'expériences numériques en phase exploratoire pour la simulation des phénomènes complexes*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne.
- Freitas, C. J. (2002). The issue of numerical uncertainty. *Applied Mathematical Modelling*, 26(2) :237 – 248.
- Gholap, A. and Khan, J. (2007). Design and multi-objective optimization of heat exchangers for refrigerators. *Applied Energy*, 84(12) :1226 – 1239.
- Ghosh, A. and Dehuri, S. (2004). Evolutionary algorithms for multi-criterion optimization : A survey. *International Journal of Computing & Information Sciences*, 2(1) :38–57.
- GIEC (2013). Changements climatiques 2013 - les éléments scientifiques. Technical report, Groupement d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climats.
- Gillebaart, T., Blom, D., van Zuijlen, A., and Bijl, H. (2016). Adaptive radial basis function mesh deformation using data reduction. *Journal of Computational Physics*, 321 :997–1025.
- Ginsbourger, D. (2009). *Multiplés métamodèles pour l'approximation et l'optimisation de fonctions numériques multivariées*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne.
- Ginsbourger, D., Le Riche, R., and Carraro, L. (2010). Kriging is well-suited to parallelize optimization. In *Computational Intelligence in Expensive Optimization Problems*, pages 131–162. Springer.
- Glover, F. (1989). Tabu search—part i. *ORSA Journal on computing*, 1(3) :190–206.
- Goldberger, A. S. (1962). Best linear unbiased prediction in the generalized linear regression model. *Journal of the American Statistical Association*, 57(298) :369–375.
- Gottschalk, S., Lin, M. C., and Manocha, D. (1996). Obbtree : A hierarchical structure for rapid interference detection. In *Proceedings of the 23rd annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, pages 171–180. ACM.

- Gramacy, R. B. and Lee, H. K. (2011). Optimization under unknown constraints. In Bernardo, J., Bayarri, M., Berger, J., Dawid, A., Heckerman, D., Smith, A., and West, M., editors, *Bayesian Statistics - Proceedings of the 9th Valencia International Meeting*, volume 9, pages 229–256. Oxford.
- Guerra, S. R. G. G. d. P. (2017). Fouling of exhaust gas recirculation coolers. Master's thesis, Faculdade de Engenharia - Universidade do Porto.
- Guo, J., Cheng, L., and Xu, M. (2009). Optimization design of shell-and-tube heat exchanger by entropy generation minimization and genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 29(14) :2954–2960.
- Guo, J., Cheng, L., and Xu, M. (2010). Multi-objective optimization of heat exchanger design by entropy generation minimization. *Journal of Heat Transfer*, 132(8) :081801.
- Guo, Z., Li, D., and Wang, B. (1998). A novel concept for convective heat transfer enhancement. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41(14) :2221–2225.
- Habchi, C., Lemenand, T., Della Valle, D., Pacheco, L., Le Corre, O., and Peerhossaini, H. (2011). Entropy production and field synergy principle in turbulent vortical flows. *International Journal of Thermal Sciences*, 50(12) :2365–2376.
- Hadidi, A., Hadidi, M., and Nazari, A. (2013). A new design approach for shell-and-tube heat exchangers using imperialist competitive algorithm (ica) from economic point of view. *Energy Conversion and Management*, 67(Supplement C) :66 – 74.
- Hajabdollahi, H., Tahani, M., and Fard, M. S. (2011). Cfd modeling and multi-objective optimization of compact heat exchanger using can method. *Applied Thermal Engineering*, 31(14) :2597–2604.
- Han, J.-C., Glicksman, L., and Rohsenow, W. (1978). An investigation of heat transfer and friction for rib-roughened surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 21(8) :1143–1156.
- Han, T., Booth, A., Song, S., Styles, D., and Hoard, J. (2015). Review and a conceptual model of exhaust gas recirculation (EGR) cooler fouling deposition and removal mechanism. In *Proceeding of Internal Conference on Heat Exchanger Fouling and Cleaning*.
- Han, W., Saleh, K., Aute, V., Ding, G., Hwang, Y., and Radermacher, R. (2011). Numerical simulation and optimization of single-phase turbulent flow in chevron-type plate heat exchanger with sinusoidal corrugations. *HVAC&R Research*, 17(2) :186–197.
- Hanjalić, K., Popovac, M., and Hadžiabdić, M. (2004). A robust near-wall elliptic-relaxation eddy-viscosity turbulence model for cfd. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 25(6) :1047 – 1051.
- He, Y.-L., Tao, W., Song, F., and Zhang, W. (2005). Three-dimensional numerical study of heat transfer characteristics of plain plate fin-and-tube heat exchangers from view point of field synergy principle. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 26(3) :459–473.
- Healy, D. P. (2003). *On the full lagrangian approach and thermophoretic deposition in gas-particle flows*. PhD thesis, University of Cambridge.

- Helbert, C. (2018). Prise en compte des simulations non-convergées dans un processus de métamodélisation par krigeage. Communication privée.
- Henry, C. and Minier, J.-P. (2014). Progress in particle resuspension from rough surfaces by turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 45 :1 – 53.
- Henry, C., Minier, J.-P., and Lefèvre, G. (2012). Towards a description of particulate fouling : From single particle deposition to clogging. *Advances in colloid and interface science*, 185 :34–76.
- Herpe, J., Bougeard, D., Russeil, S., and Stanciu, M. (2009). Numerical investigation of local entropy production rate of a finned oval tube with vortex generators. *International Journal of Thermal Sciences*, 48(5) :922–935.
- Herwig, H. and Kock, F. (2007). Direct and indirect methods of calculating entropy generation rates in turbulent convective heat transfer problems. *Heat and mass transfer*, 43(3) :207–215.
- Hesselgreaves, J. (2000). Rationalisation of second law analysis of heat exchangers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43(22) :4189–4204.
- Hilbert, R., Janiga, G., Baron, R., and Thévenin, D. (2006). Multi-objective shape optimization of a heat exchanger using parallel genetic algorithms. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(15) :2567–2577.
- Holland, J. H. (1975). Adaptation in natural and artificial systems : an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence.
- Hornig, G., Volk, P., Wachtmeister, G., and Niessner, R. (2011). Fouling of EGR heat exchangers-investigations of mechanisms involved in soot particle deposition. In *Proceedings of International Conference on Heat Exchanger Fouling & Cleaning IX, Greece*.
- Huang, D., Allen, T. T., Notz, W. I., and Zeng, N. (2006). Global optimization of stochastic black-box systems via sequential kriging meta-models. *Journal of Global Optimization*, 34(3) :441–466.
- Huang, Y., Liu, Z., Lu, G., and Yu, X. (2014). Multi-scale thermal analysis approach for the typical heat exchanger in automotive cooling systems. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 59 :75–87.
- Huband, S., Hingston, P., Barone, L., and While, L. (2006). A review of multiobjective test problems and a scalable test problem toolkit. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 10(5) :477–506.
- Huebner, K., Ruthotto, S., and Kragic, D. (2008). Minimum volume bounding box decomposition for shape approximation in robot grasping. In *Robotics and Automation, 2008. ICRA 2008. IEEE International Conference on*, pages 1628–1633. IEEE.
- Husain, A. and Kim, K.-Y. (2010). Enhanced multi-objective optimization of a microchannel heat sink through evolutionary algorithm coupled with multiple surrogate models. *Applied Thermal Engineering*, 30(13) :1683 – 1691.

- Iaccarino, G., Ooi, A., Durbin, P., and Behnia, M. (2002). Conjugate heat transfer predictions in two-dimensional ribbed passages. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23(3) :340–345.
- Jacquenot, G. (2010). *Méthode générique pour l'optimisation d'agencement géométrique et fonctionnel*. PhD thesis, Ecole Centrale de Nantes, Nantes.
- Jain, H. and Deb, K. (2013). An improved adaptive approach for elitist nondominated sorting genetic algorithm for many-objective optimization. In *International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization*, pages 307–321. Springer.
- Jakobsson, S. and Amoignon, O. (2007). Mesh deformation using radial basis functions for gradient-based aerodynamic shape optimization. *Computers & Fluids*, 36(6) :1119–1136.
- Jeyapaul, E. (2011). *Turbulent flow separation in three-dimensional asymmetric diffusers*. PhD thesis, Iowa State University.
- Jiji, L. M. (2002). *Heat Transfer Essentials*. Begell House, New York, 2nd edition.
- Jin, R., Chen, W., and Sudjianto, A. (2005). An efficient algorithm for constructing optimal design of computer experiments. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 134(1) :268–287.
- Jones, D. R., Schonlau, M., and Welch, W. J. (1998). Efficient global optimization of expensive black-box functions. *Journal of Global Optimization*, 13(4) :455–492.
- Ju, Y. and Zhang, C. (2016). Robust design optimization method for centrifugal impellers under surface roughness uncertainties due to blade fouling. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 29(2) :301–314.
- Kennedy, J. (2011). Particle swarm optimization. In *Encyclopedia of machine learning*, pages 760–766. Springer.
- Keshmiri, A., Osman, K., Benhamadouche, S., and Shokri, N. (2016). Assessment of advanced rans models against large eddy simulation and experimental data in the investigation of ribbed passages with passive heat transfer. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, pages 1–15.
- Kim, H.-M., Moon, M.-A., and Kim, K.-Y. (2011). Multi-objective optimization of a cooling channel with staggered elliptic dimples. *Energy*, 36(5) :3419 – 3428.
- Kim, K. M., Kim, B. S., Lee, D. H., Moon, H., and Cho, H. H. (2010). Optimal design of transverse ribs in tubes for thermal performance enhancement. *Energy*, 35(6) :2400–2406.
- Kim, K.-Y. and Choi, J.-Y. (2005). Shape optimization of a dimpled channel to enhance turbulent heat transfer. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 48(9) :901–915.
- Kim, K.-Y. and Kim, S.-S. (2002). Shape optimization of rib-roughened surface to enhance turbulent heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(13) :2719–2727.

- Kim, K.-Y. and Shin, D.-Y. (2008). Optimization of a staggered dimpled surface in a cooling channel using kriging model. *International Journal of Thermal Sciences*, 47(11) :1464 – 1472.
- Kirkpatrick, S., Gelatt Jr, C., and Vecchi, M. P. (1983). Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598) :671–680.
- Knupp, P. M. (2003). Algebraic mesh quality metrics for unstructured initial meshes. *Finite Elements in Analysis and Design*, 39(3) :217–241.
- Kohonen, T. (1982). Self-organized formation of topologically correct feature maps. *Biological Cybernetics*, 43(1) :59–69.
- Koo, G.-W., Lee, S.-M., and Kim, K.-Y. (2014). Shape optimization of inlet part of a printed circuit heat exchanger using surrogate modeling. *Applied Thermal Engineering*, 72(1) :90 – 96. {ASCHT2013}.
- Koski, J. and Silvennoinen, R. (1987). Norm methods and partial weighting in multi-criterion optimization of structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24(6) :1101–1121.
- Koziel, S., Ciaurri, D. E., and Leifsson, L. (2011). Surrogate-based methods. In *Computational Optimization, Methods and Algorithms*, pages 33–59. Springer.
- Krige, D. G. (1951). A statistical approach to some basic mine valuation problems on the witwatersrand. *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, 52(6) :119–139.
- Kulkarni, K., Afzal, A., and Kim, K.-Y. (2015). Multi-objective optimization of solar air heater with obstacles on absorber plate. *Solar Energy*, 114 :364 – 377.
- Kumar, B., Srivastava, G. P., Kumar, M., and Patil, A. K. (2018). A review of heat transfer and fluid flow mechanism in heat exchanger tube with inserts. *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*, 123 :126 – 137.
- Kuya, Y., Takeda, K., Zhang, X., and J. Forrester, A. I. (2011). Multifidelity surrogate modeling of experimental and computational aerodynamic data sets. *AIAA journal*, 49(2) :289–298.
- Lauder, B. (1974). The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3 :269–289.
- Laurent, L. (2013). *Stratégie multiparamétrique et métamodèles pour l’optimisation multinationaux de structures*. PhD thesis, École normale supérieure de Cachan-ENS Cachan.
- Le Gall, J.-F. (2006). Intégration, probabilités et processus aléatoires. *Ecole Normale Supérieure de Paris*.
- Lee, H., Saleh, K., Hwang, Y., and Radermacher, R. (2012). Optimization of novel heat exchanger design for the application to low temperature lift heat pump. *Energy*, 42(1) :204 – 212. 8th World Energy System Conference, {WESC} 2010.

- Lee, S.-M. and Kim, K.-Y. (2012). Optimization of zigzag flow channels of a printed circuit heat exchanger for nuclear power plant application. *Journal of nuclear science and technology*, 49(3) :343–351.
- Lee, S.-M. and Kim, K.-Y. (2015). Multi-objective optimization of arc-shaped ribs in the channels of a printed circuit heat exchanger. *International Journal of Thermal Sciences*, 94(Supplement C) :1 – 8.
- Liu, C., Bu, W., and Xu, D. (2017a). Multi-objective shape optimization of a plate-fin heat exchanger using cfd and multi-objective genetic algorithm. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 111 :65 – 82.
- Liu, C., Deng, Y., Wang, X., Liu, X., Wang, Y., and Su, C. (2016). Multi-objective optimization of heat exchanger in an automotive exhaust thermoelectric generator. *Applied Thermal Engineering*, 108 :916 – 926.
- Liu, J., Han, Z., and Song, W. (2012). Comparison of infill sampling criteria in kriging-based aerodynamic optimization. In *28th Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences*, pages 23–28.
- Liu, J., Song, W.-P., Han, Z.-H., and Zhang, Y. (2017b). Efficient aerodynamic shape optimization of transonic wings using a parallel infilling strategy and surrogate models. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 55(3) :925–943.
- Liu, Z. and Cheng, H. (2008). Multi-objective optimization design analysis of primary surface recuperator for microturbines. *Applied Thermal Engineering*, 28(5) :601 – 610.
- MacQueen, J. (1967). Some methods for classification and analysis of multivariate observations. In *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume 1 : Statistics*, pages 281–297, Berkeley, Calif. University of California Press.
- Maghsoudi, P., Sadeghi, S., Khanjarpanah, H., and Gorgani, H. H. (2018). A comprehensive thermo-economic analysis, optimization and ranking of different microturbine plate-fin recuperators designs employing similar and dissimilar fins on hot and cold sides with nsga-ii algorithm and dea model. *Applied Thermal Engineering*, 130(Supplement C) :1090 – 1104.
- Manceau, R. and Hanjalić, K. (2002). Elliptic blending model : A new near-wall reynolds-stress turbulence closure. *Physics of Fluids*, 14(2) :744–754.
- Manceau, R., Parneix, S., and Laurence, D. (2000). Turbulent heat transfer predictions using the v_2 - f model on unstructured meshes. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 21(3) :320–328.
- Manglik, R. M. (2003). Heat transfer enhancement. In Bejan, A. and Kraus, A. D., editors, *Heat Transfer Handbook*, chapter 14, pages 1129 – 1130. John Wiley & Sons.
- Manglik, R. M. and Bergles, A. E. (1995). Heat transfer and pressure drop correlations for the rectangular offset strip fin compact heat exchanger. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 10(2) :171–180.

- Marler, R. T. and Arora, J. S. (2004). Survey of multi-objective optimization methods for engineering. *Struct. Multidiscip. Optim.*, 26(6) :369–395.
- Martínez-Frutos, J. and Herrero-Pérez, D. (2016). Kriging-based infill sampling criterion for constraint handling in multi-objective optimization. *Journal of Global Optimization*, 64(1) :97–115.
- Mastrippolito, F., Aubert, S., Ducros, F., and Buisson, M. (2018a). On the use of Schur complement to improve the efficiency of RBF-based mesh deformation applied to internal cooling. In *53rd 3AF International Conference on Applied Aerodynamics, 26-28 March 2018, Salon de Provence - France*.
- Mastrippolito, F. and Aubert, S., Ducros, F., Ferrand, M., and Fourmigue, J.-F. (2018b). Multi-objective shape optimization of a plate heat exchanger : a multi-scale approach. In *International Conference on Energy Engineering and Smart Grids, 25-26 Juin 2018, Cambridge, United Kingdom*.
- Matheron, G. (1969). Le krigeage universel : cahiers du centre de morphologie mathématique. *École nationale supérieure des mines de Paris*.
- MATLAB (2010). *version 7.10.0 (R2010a)*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts.
- Mebane Jr, W. R., Sekhon, J. S., et al. (2011). Genetic optimization using derivatives : the rgenoud package for r. *Journal of Statistical Software*, 42(11) :1–26.
- Menter, F. R. (1994). Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA journal*, 32(8) :1598–1605.
- Messac, A., Ismail-Yahaya, A., and Mattson, C. A. (2003). The normalized normal constraint method for generating the pareto frontier. *Struct. Multidiscip. Optim.*, 25(2) :86–98.
- Messac, A. and Mattson, C. A. (2002). Generating well-distributed sets of pareto points for engineering design using physical programming. *Optimization and Engineering*, 3(4) :431–450.
- Messac, A., Puemi-Sukam, C., and Melachrinoudis, E. (2000). Aggregate objective functions and pareto frontiers : Required relationships and practical implications. *Optimization and Engineering*, 1(2) :171–188.
- Michler, A. K. (2011). Aircraft control surface deflection using rbf-based mesh deformation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 88(10) :986–1007.
- Mikielewicz, D., Mikielewicz, J., and Doerffer, P. (2018). White paper on renewx heat exchangers. Disponible en ligne : <http://www.heatexdesign.com/technical-information/white-papers/white-paper-on-renewx-heat-exchangers/> - consulté le 14/06/2018.
- Minvielle, Z., Caney, N., Clément, P., Bandelier, P., Marty, P., Gruss, J., and Roussel, C. (2014). échangeurs de chaleur - descriptions. Technical Report BE9516, Techniques de l'ingénieur.

- Mishra, M., Das, P., and Sarangi, S. (2009). Second law based optimisation of crossflow plate-fin heat exchanger design using genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 29(14) :2983 – 2989.
- Missirlis, D., Donnerhack, S., Seite, O., Albanakis, C., Sideridis, A., Yakinthos, K., and Goulas, A. (2010). Numerical development of a heat transfer and pressure drop porosity model for a heat exchanger for aero engine applications. *Applied Thermal Engineering*, 30(11-12) :1341–1350.
- Mocanu, B., Tapu, R., and Tapu, E. (2013). Mesh deformation with hard constraints. In *Signals, Circuits and Systems (ISSCS), 2013 International Symposium on*, pages 1–4. IEEE.
- Mohammadi, B. and Pironneau, O. (2004). Shape optimization in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36 :255–279.
- Mohammadi, H. (2016). *Kriging-based black-box global optimization : analysis and new algorithms*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne.
- Musto, M., Bianco, N., Rotondo, G., Toscano, F., and Pezzella, G. (2016). A simplified methodology to simulate a heat exchanger in an aircraft’s oil cooler by means of a porous media model. *Applied Thermal Engineering*, 94 :836–845.
- Najafi, H. and Najafi, B. (2010). Multi-objective optimization of a plate and frame heat exchanger via genetic algorithm. *Heat and Mass Transfer*, 46(6) :639–647.
- Najafi, H., Najafi, B., and Hoseinpoori, P. (2011). Energy and cost optimization of a plate and fin heat exchanger using genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 31(10) :1839 – 1847.
- Nelder, J. A. and Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. *The computer journal*, 7(4) :308–313.
- Nielsen, E. J. and Anderson, W. K. (2002). Recent improvements in aerodynamic design optimization on unstructured meshes. *AIAA journal*, 40(6) :1155–1163.
- Park, C., Haftka, R. T., and Kim, N. H. (2017). Remarks on multi-fidelity surrogates. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 55(3) :1029–1050.
- Park, J.-S. and Baek, J. (2001). Efficient computation of maximum likelihood estimators in a spatial linear model with power exponential covariogram. *Computers & Geosciences*, 27(1) :1–7.
- Park, K., Choi, D.-H., and Lee, K.-S. (2004). Optimum design of plate heat exchanger with staggered pin arrays. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 45(4) :347–361.
- Park, K., Oh, P.-K., and Lim, H.-J. (2006). The application of the {CFD} and kriging method to an optimization of heat sink. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(19–20) :3439 – 3447.
- Parry, R. H. (2004). *Mohr circles, stress paths and geotechnics*, pages 34–37. CRC Press. 34-37.

- Passos, A. and Luersen, M. (2017). Multiobjective optimization of laminated composite parts with curvilinear fibers using kriging-based approaches. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, pages 1–13.
- Patankar, S., Liu, C., and Sparrow, E. (1977). Fully developed flow and heat transfer in ducts having streamwise-periodic variations of cross-sectional area. *ASME J. Heat Transfer*, 99(2) :180–186.
- Paz, C., Suárez, E., Eirís, A., and Porteiro, J. (2013). Development of a predictive cfd fouling model for diesel engine exhaust gas systems. *Heat Transfer Engineering*, 34(8-9) :674–682.
- Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V., Vanderplas, J., Passos, A., Cournapeau, D., Brucher, M., Perrot, M., and Duchesnay, E. (2011). Scikit-learn : Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 12 :2825–2830.
- Peng, H. and Ling, X. (2008). Optimal design approach for the plate-fin heat exchangers using neural networks cooperated with genetic algorithms. *Applied Thermal Engineering*, 28(5) :642 – 650.
- Peng, H., Ling, X., and Wu, E. (2010). An improved particle swarm algorithm for optimal design of plate-fin heat exchangers. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(13) :6144–6149.
- Picheny, V. (2015). Multiobjective optimization using gaussian process emulators via stepwise uncertainty reduction. *Statistics and Computing*, 25(6) :1265–1280.
- Picheny, V., Ginsbourger, D., Roustant, O., Haftka, R. T., and Kim, N.-H. (2010). Adaptive designs of experiments for accurate approximation of a target region. *Journal of Mechanical Design*, 132(7) :071008.
- Pointot, M. (2016). Cgns test suites for cfd software components. In *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, page 1924.
- Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M., and Jiménez-Gutiérrez, A. (2009). Use of genetic algorithms for the optimal design of shell-and-tube heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 29(2) :203 – 209.
- Ponweiser, W., Wagner, T., Biermann, D., and Vincze, M. (2008a). Multiobjective optimization on a limited budget of evaluations using model-assisted \mathcal{S} -metric selection. In *International Conference on Parallel Problem Solving from Nature*, pages 784–794. Springer.
- Ponweiser, W., Wagner, T., and Vincze, M. (2008b). Clustered multiple generalized expected improvement : A novel infill sampling criterion for surrogate models. In *Evolutionary Computation, 2008. CEC 2008. (IEEE World Congress on Computational Intelligence). IEEE Congress on*, pages 3515–3522. IEEE.
- Powell, M. J. (1964). An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *The computer journal*, 7(2) :155–162.

- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., and Kramer, P. B. (1992). *Numerical Recipes in C - The Art of Scientific Computing - Second Edition*, chapter 2 - Solution of Linear Algebraic Equations, pages 43–50. Cambridge Univ Press.
- R Core Team (2012). *R : A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0.
- Raja, B. D., Jhala, R., and Patel, V. (2017). Many-objective optimization of cross-flow plate-fin heat exchanger. *International Journal of Thermal Sciences*, 118 :320–339.
- Rao, R. and Patel, V. (2010). Thermodynamic optimization of cross flow plate-fin heat exchanger using a particle swarm optimization algorithm. *International Journal of Thermal Sciences*, 49(9) :1712 – 1721.
- Rasmussen, C. E. and Williams, C. K. (2006). Gaussian processes for machine learning. 2006. *The MIT Press, Cambridge, MA, USA*, 38 :715–719.
- Rau, G., Cakan, M., Moeller, D., and Arts, T. (1998). The effect of periodic ribs on the local aerodynamic and heat transfer performance of a straight cooling channel. *Journal of Turbomachinery*, 120(2) :368–375.
- Rendall, T. and Allen, C. (2008). Unified fluid–structure interpolation and mesh motion using radial basis functions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 74(10) :1519–1559.
- Rendall, T. and Allen, C. (2009). Efficient mesh motion using radial basis functions with data reduction algorithms. *Journal of Computational Physics*, 228(17) :6231–6249.
- Rendall, T. and Allen, C. (2010). Parallel efficient mesh motion using radial basis functions with application to multi-bladed rotors. *International journal for numerical methods in engineering*, 81(1) :89–105.
- Roustant, O., Ginsbourger, D., and Deville, Y. (2012). Dicekriging, diceoptim : Two r packages for the analysis of computer experiments by kriging-based metamodeling and optimization. *Journal of statistical software*, 51(1) :1–55.
- Rozenberg, Y., Aubert, S., and Bénéfice, G. (2014). Fluid structure interaction problems in turbomachinery using rbf interpolation and greedy algorithm. In *ASME Turbo Expo 2014 : Turbine Technical Conference and Exposition*, pages V02BT39A033–V02BT39A033. American Society of Mechanical Engineers.
- Sacks, J., Welch, W. J., Mitchell, T. J., and Wynn, H. P. (1989). Design and analysis of computer experiments. *Statistical science*, pages 409–423.
- Saleh, K., Abdelaziz, O., Aute, V., Radermacher, R., and Azarm, S. (2013a). Approximation assisted optimization of headers for new generation of air-cooled heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 61(2) :817 – 824.
- Saleh, K., Aute, V., Radermacher, R., and Azarm, S. (2013b). Chevron plate heat exchanger optimization using efficient approximation-assisted multi-objective optimization techniques. *HVAC&R Research*, 19(7) :788–799.

- Sanaye, S. and Hajabdollahi, H. (2010a). Multi-objective optimization of shell and tube heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 30(14) :1937 – 1945.
- Sanaye, S. and Hajabdollahi, H. (2010b). Thermal-economic multi-objective optimization of plate fin heat exchanger using genetic algorithm. *Applied Energy*, 87(6) :1893 – 1902.
- Sasena, M. J., Papalambros, P., and Goovaerts, P. (2002). Exploration of metamodeling sampling criteria for constrained global optimization. *Engineering optimization*, 34(3) :263–278.
- Schaback, R. and Wendland, H. (2000). Adaptive greedy techniques for approximate solution of large rbf systems. *Numerical Algorithms*, 24(3) :239–254.
- Schaffer, J. D. (1985). Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms. In *Proceedings of the First International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications, 1985*. Lawrence Erlbaum Associates. Inc., Publishers.
- Schüürmann, G., Ebert, R.-U., Chen, J., Wang, B., and Kühne, R. (2008). External validation and prediction employing the predictive squared correlation coefficient — test set activity mean vs training set activity mean. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 48(11) :2140–2145. PMID : 18954136.
- Sciacovelli, A., Verda, V., and Sciubba, E. (2015). Entropy generation analysis as a design tool—a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 43 :1167–1181.
- Sciubba, E. (1996). A minimum entropy generation procedure for the discrete pseudo-optimization of finned-tube heat exchangers. *Revue générale de thermique*, 35(416) :517–525.
- Scott, W., Frazier, P., and Powell, W. (2011). The correlated knowledge gradient for simulation optimization of continuous parameters using gaussian process regression. *SIAM Journal on Optimization*, 21(3) :996–1026.
- Sederberg, T. W. and Parry, S. R. (1986). Free-form deformation of solid geometric models. *Computer Graphics*, 20(4) :151–160.
- Selbas, R., Önder Kızıllan, and Reppich, M. (2006). A new design approach for shell-and-tube heat exchangers using genetic algorithms from economic point of view. *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*, 45(4) :268 – 275.
- Seo, J.-W., Afzal, A., and Kim, K.-Y. (2016). Efficient multi-objective optimization of a boot-shaped rib in a cooling channel. *International Journal of Thermal Sciences*, 106 :122 – 133.
- Sewall, E. A., Tafti, D. K., Graham, A. B., and Thole, K. A. (2006). Experimental validation of large eddy simulations of flow and heat transfer in a stationary ribbed duct. *International journal of heat and fluid flow*, 27(2) :243–258.
- Shah, R. K. and Sekulic, D. P. (1998). Heat exchangers. In Rohsenow, W. M., Hartnett, J. P., Cho, Y. I., et al., editors, *Handbook of Heat Transfer - Third Edition*, chapter 17, pages 17.1 – 17.169. McGraw-Hill New York, 3 edition.

- Shah, R. K. and Sekulic, D. P. (2003). *Fundamentals of heat exchanger design*. John Wiley & Sons.
- Shah, R. K. and Skiepko, T. (2004). Entropy generation extrema and their relationship with heat exchanger effectiveness—number of transfer unit behavior for complex flow arrangements. *Journal of Heat Transfer*, 126(6) :994–1002.
- Sheng, C. and Allen, C. B. (2012). Efficient mesh deformation using radial basis functions on unstructured meshes. *AIAA journal*, 51(3) :707–720.
- Shi, H., Ma, T., xiao Chu, W., and wang Wang, Q. (2017). Optimization of inlet part of a microchannel ceramic heat exchanger using surrogate model coupled with genetic algorithm. *Energy Conversion and Management*, 149 :988 – 996.
- Shimoyama, K., Sato, K., Jeong, S., and Obayashi, S. (2012). Comparison of the criteria for updating kriging response surface models in multi-objective optimization. In *Evolutionary Computation (CEC), 2012 IEEE Congress on*, pages 1–8. IEEE.
- Sieger, D., Gaulik, S., Achenbach, J., Menzel, S., and Botsch, M. (2016). Constrained space deformation techniques for design optimization. *Computer-Aided Design*, 72 :40–51.
- Simo Tala, J. V. (2012). *Analyse des structures tourbillonnaires et des mécanismes de transfert thermique dans les échangeurs de chaleur multi-rangs de tubes ailetés : Amélioration et optimisation des performances thermoaérouliques*. PhD thesis, École des Mines de Douai et Université de Valenciennes.
- Simpson, T. W., Lin, D. K., and Chen, W. (2001a). Sampling strategies for computer experiments : design and analysis. *International Journal of Reliability and Applications*, 2(3) :209–240.
- Simpson, T. W., Poplinski, J., Koch, P. N., and Allen, J. K. (2001b). Metamodels for computer-based engineering design : survey and recommendations. *Engineering with computers*, 17(2) :129–150.
- Sóbester, A., Leary, S. J., and Keane, A. J. (2005). On the design of optimization strategies based on global response surface approximation models. *Journal of Global Optimization*, 33(1) :31–59.
- Soulat, L. (2010). *Définition, analyse et optimisation d'un nouveau concept de traitement de carter au moyen d'outils numériques : Application aux turbomachines basse vitesse*. Phd thesis, Ecole centrale de Lyon, Ecully.
- Soulat, L., Ferrand, P., Moreau, S., Aubert, S., and Buisson, M. (2013). Efficient optimization procedure for design problems in fluid mechanics. *Computers & Fluids*, 82 :73 – 86.
- Speziale, C. G., Sarkar, S., and Gatski, T. B. (1991). Modelling the pressure–strain correlation of turbulence : an invariant dynamical systems approach. *Journal of fluid mechanics*, 227 :245–272.
- Srinivas, N. and Deb, K. (1994). Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms. *Evolutionary computation*, 2(3) :221–248.

- Suárez, E., Paz, C., Porteiro, J., and Eirís, A. (2010). Simulation of the fouling layer evolution in heat transfer surfaces. In *V European Conference on Computational Fluid Dynamics*.
- Sundén, B. (2007). Computational fluid dynamics in research and design of heat exchangers. *Heat Transfer Engineering*, 28(11) :898–910.
- Svenson, J. (2011). *Computer experiments : Multiobjective optimization and sensitivity analysis*. PhD thesis, The Ohio State University.
- Svenson, J. and Santner, T. (2016). Multiobjective optimization of expensive-to-evaluate deterministic computer simulator models. *Computational Statistics & Data Analysis*, 94 :250–264.
- Tala, J. S., Bougeard, D., Russeil, S., and Harion, J.-L. (2012). Tube pattern effect on thermohydraulic characteristics in a two-rows finned-tube heat exchanger. *International Journal of Thermal Sciences*, 60 :225–235.
- Talbot, L., Cheng, R., Schefer, R., and Willis, D. (1980). Thermophoresis of particles in a heated boundary layer. *Journal of fluid mechanics*, 101(4) :737–758.
- Tanda, G. (2004). Heat transfer in rectangular channels with transverse and v-shaped broken ribs. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(2) :229–243.
- Tang, Z. and Zhang, L. (2016). Nash equilibrium and multi criterion aerodynamic optimization. *Journal of Computational Physics*, 314 :107–126.
- Tao, W., He, Y., Wang, Q., Qu, Z., and Song, F. (2002a). A unified analysis on enhancing single phase convective heat transfer with field synergy principle. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(24) :4871–4879.
- Tao, W.-Q., Guo, Z.-Y., and Wang, B.-X. (2002b). Field synergy principle for enhancing convective heat transfer—its extension and numerical verifications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(18) :3849–3856.
- TEMA (2007). *Standards of Tubular Exchanger Manufacturers Association (TEMA)*. Tubular Exchanger Manufacturers Association, INC New York, 9th edition.
- Thulukkanam, K. (2013). *Heat exchanger design handbook*. CRC Press.
- Tušar, T. and Filipič, B. (2015). Visualization of pareto front approximations in evolutionary multiobjective optimization : A critical review and the prosection method. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 19(2) :225–245.
- Van Veldhuizen, D. A. (1999). *Multiobjective evolutionary algorithms : classifications, analyses, and new innovations*. PhD thesis, PhD thesis. Presented to the Faculty of the Graduate School of Engineering of the Air Force Institute of Technology. Air University. USA. AFIT/DS/ENG.
- Viana, F. A. (2013). Things you wanted to know about the latin hypercube design and were afraid to ask. In *10th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization*, pages 1–9. sn.

- Villemonteix, J., Vazquez, E., and Walter, E. (2009). An informational approach to the global optimization of expensive-to-evaluate functions. *Journal of Global Optimization*, 44(4) :509.
- Wagner, T., Emmerich, M., Deutz, A., and Ponweiser, W. (2010). On expected-improvement criteria for model-based multi-objective optimization. In *International Conference on Parallel Problem Solving from Nature*, pages 718–727. Springer.
- Wald, J.-F. (2016). *Lois de paroi adaptatives pour un modèle de fermeture du second ordre dans un contexte industriel*. PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Wang, G., Mian, H. H., Ye, Z.-Y., and Lee, J.-D. (2015). Improved point selection method for hybrid-unstructured mesh deformation using radial basis functions. *AIAA Journal*, 53(4) :1016–1025.
- Wang, L., Hejcik, J., and Sunden, B. (2007). Piv measurement of separated flow in a square channel with streamwise periodic ribs on one wall. *Journal of fluids engineering*, 129(7) :834–841.
- Wang, L. and Sunden, B. (2005). Experimental investigation of local heat transfer in a square duct with continuous and truncated ribs. *Experimental heat transfer*, 18(3) :179–197.
- Wansaseub, K., Pholdee, N., and Bureerat, S. (2017). Optimal u-shaped baffle square-duct heat exchanger through surrogate-assisted self-adaptive differential evolution with neighbourhood search and weighted exploitation-exploration. *Applied Thermal Engineering*, 118 :455 – 463.
- Warey, A., Bika, A. S., Long, D., Balestrino, S., and Szymkowicz, P. (2013). Influence of water vapor condensation on exhaust gas recirculation cooler fouling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 65 :807 – 816.
- Wen, J., Gu, X., Wang, M., Wang, S., and Tu, J. (2017). Numerical investigation on the multi-objective optimization of a shell-and-tube heat exchanger with helical baffles. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 89(Supplement C) :91 – 97.
- Wen, J., Li, K., Zhang, X., Wang, C., Wang, S., and Tu, J. (2018). Optimization investigation on configuration parameters of serrated fin in plate-fin heat exchanger based on fluid structure interaction analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 119 :282 – 294.
- Wen, J., Yang, H., Tong, X., Li, K., Wang, S., and Li, Y. (2016). Configuration parameters design and optimization for plate-fin heat exchangers with serrated fin by multi-objective genetic algorithm. *Energy Conversion and Management*, 117 :482–489.
- Wendland, H. (1995). Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree. *Advances in computational Mathematics*, 4(1) :389–396.
- Wilcox, D. C. (1988). Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA journal*, 26(11) :1299–1310.

- Wintergerste, T., Casey, M., and Hutton, A. (2002). The best practise guidelines for cfd—a european initiative on quality and trust. *American Society of Mechanical Engineers, Pressure Vessels and Piping Division (Publication) PVP*, 2002 :1–10.
- Wood, N. (1981). A simple method for the calculation of turbulent deposition to smooth and rough surfaces. *Journal of aerosol Science*, 12(3) :275–290.
- Xie, G., Sundén, B., and Wang, Q. (2008). Optimization of compact heat exchangers by a genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 28(8) :895–906.
- Xu, Z., Yang, S., and Chen, Z. (1996). A modified entropy generation number for heat exchangers. *Journal of thermal science*, 5(4) :257–263.
- Yang, L., Li, B., Lv, Z., Hou, W., and Hu, P. (2016). Finite element mesh deformation with the skeleton-section template. *Computer-Aided Design*, 73 :11–25.
- Yin, H. and Ooka, R. (2015). Shape optimization of water-to-water plate-fin heat exchanger using computational fluid dynamics and genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 80 :310–318.
- Zhan, D., Qian, J., and Cheng, Y. (2017). Pseudo expected improvement criterion for parallel ego algorithm. *Journal of Global Optimization*, 68(3) :641–662.
- Zhou, J.-H., Yang, C.-X., and Zhang, L.-N. (2009). Minimizing the entropy generation rate of the plate-finned heat sinks using computational fluid dynamics and combined optimization. *Applied thermal engineering*, 29(8-9) :1872–1879.
- Zhu, X. W. and Zhao, J. Q. (2016). Improvement in field synergy principle : More rigorous application, better results. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 100 :347–354.
- Zitzler, E., Thiele, L., Laumanns, M., Fonseca, C. M., and Da Fonseca, V. G. (2003). Performance assessment of multiobjective optimizers : An analysis and review. *IEEE Transactions on evolutionary computation*, 7(2) :117–132.

Les échangeurs de chaleur sont utilisés dans de nombreux secteurs industriels. L'optimisation de leurs performances est donc de première importance pour réduire la consommation énergétique. Le comportement d'un échangeur est intrinsèquement multiéchelle : l'échelle locale de l'intensification des phénomènes de transfert thermique côtoie une échelle plus globale où interviennent des phénomènes de distribution de débit. Un échangeur de chaleur est également le siège de différents phénomènes physiques, tels que la mécanique des fluides, la thermique et l'encrassement.

Les présents travaux proposent une méthode d'optimisation multiobjectif de la forme des échangeurs, robuste, pouvant traiter les aspects multiéchelles et multiphysiques et applicable dans un contexte industriel. Les performances de l'échangeur sont évaluées par des simulations de mécanique des fluides numérique (CFD) et par des méthodes globales (ε -NUT). Suite à une étude bibliographique, une méthode de métamodélisation par krigeage associée à un algorithme génétique ont été retenus. Des méthodes de visualisation adaptées (*clustering* et *Self-Organizing Maps*) sont utilisées pour analyser les résultats.

Le métamodèle permet d'approcher la réponse d'un simulateur (CFD) et d'en fournir une prédiction dont l'interrogation est peu onéreuse. Le krigeage permet de prendre en compte une discontinuité et des perturbations de la réponse du simulateur par l'ajout d'un effet de pépite. Il permet également l'utilisation de stratégies d'enrichissement construisant des approximations précises à moindre coût. Cette méthode est appliquée à différentes configurations représentatives du comportement de l'échangeur, permettant de s'assurer de sa robustesse lorsque le simulateur change, lorsque l'aspect multiéchelle est pris en compte ou lorsque une physique d'encrassement est considérée.

Il a été établi que l'étape de métamodélisation assure la robustesse de la méthode et l'intégration de l'aspect multiéchelle. Elle permet aussi de construire des corrélations à l'échelle locale qui sont ensuite utilisées pour déterminer les performances globales de l'échangeur. Dans un contexte industriel, les méthodes d'analyse permettent de mettre en évidence un nombre fini de formes réalisant un compromis des fonctions objectif antagonistes.

Mot clefs : Échangeur de chaleur, mécanique des fluides numérique - CFD, optimisation multiobjectif, krigeage, stratégie d'enrichissement, *Self-Organizing Maps*

Heat exchangers are used in many industrial applications. Optimizing their performances is a key point to improve energy efficiency. Heat exchanger behaviour is a multi-scale issue where local scale enhancement mechanisms coexist with global scale distribution ones. It is also multi-physics such as fluid mechanics, heat transfer and fouling phenomena appear.

The present work deals with multi-objective shape optimization of heat exchanger. The proposed method is sufficiently robust to address multi-scale and multi-physics issues and allows industrial applications. Heat exchanger performances are evaluated using computational fluid dynamics (CFD) simulations and global methods (ε -NUT). The optimization tools are a genetic algorithm coupled with kriging-based metamodelling. Clustering and Self-Organizing Maps (SOM) are used to analyse the optimization results.

A metamodel builds an approximation of a simulator response (CFD) whose evaluation cost is reduced to be used with the genetic algorithm. Kriging can address discontinuities or perturbations of the response by introducing a nugget effect. Adaptive sampling is used to build cheap and precise approximation. The present optimization method is applied to different configurations which are representative of the heat exchanger behaviour for both multi-scale and multi-physics (fouling) aspects.

Results show that metamodelling is a key point of the method, ensuring the robustness and the versatility of the optimisation process. Also, it allows to build correlations of the local scale used to determine the global performances of the heat exchanger. Clustering and SOM highlight a finite number of shapes, which represent a compromise between antagonist objective functions, directly usable in an industrial context.

Keywords : Heat exchanger , computational fluid dynamics - CFD, multi-objective optimization, kriging, adaptive sampling, Self-Organizing Maps