

# Comité d'évaluation du laboratoire MAS Ecole Centrale Paris

Axe de Recherche  
Ingénierie Scientifique et Visualisation (ISV)

Florian De Vuyst

# Ingénierie Scientifique et Visualisation

- ISV 1 DORA Dimension, Optimisation, Réduction et Apprentissage pour les problèmes de fluides (Florian De Vuyst)
- ISV2 Ingénierie de systèmes complexes (Christian Saguez)
- ISV3 DIGIPLANTE : Modélisation et simulation pour les sciences de l'environnement (Paul-Henry Cournède)
- ISV4 WYSIWYG : Synthèse d'images – Réalité Virtuelle et Simulation (Patrick Callet)

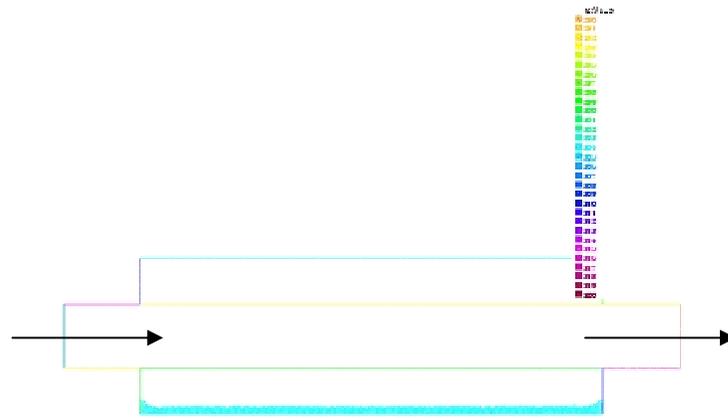
## Les enjeux de la Recherche en calcul numérique aujourd'hui

- Physique complexe
- Aspects pluridisciplinaires
- Estimation (robuste) de paramètres
- Assimilation de données
- Conception / optimisation de systèmes
- Prise en compte des incertitudes
- Rendu
- Temps réel

## “Physique complexe” - Exemples de problèmes de fluides considérés

- Volumes finis pour les fluides compressibles [JCP 2004, ESAIM Proc. 08, E. J. Mech B Fluids 08]
- Fluides multiphasiques, CEA Saclay [Award ICONE 2004, Nucl. Design 2008]
- Moulage par injection de thermoplastiques, RNTL, PEP
- Interpénétration de plasmas, CEA DAM [JCP 2007]
- Trafic routier, ACI MD 2003, U. Dauphine, INRETS [Award EGC 2007, Proc. Trans. Res. Board]
- Plasma magnétosphérique, CEA DAM [CPC 2006]
- Fluides magnétisés, Doshisha U., Kyoto [J. Phys. Cond Mat., J Mech. Eng. Sci. 2008]
- Migration/prolifération cellulaire, F. Xavier, Institut Curie, Institut Carnot Supélec
- Modèles réduits pour les fluides, ANR OMD, CSDL [IJNME 2008, Chap. Hermès et Wiley]
- Biochimie moléculaire dynamique stochastique, Paris 6, ANR CI PITAC [DDM 2008]
- Modèles Temps Réel de systèmes (PPF TAMARIS, ENS Cachan)
- Conception collaborative pour les problèmes à base de fluides (CSDL, Dassault)
- CO2 transcritique/supercritique (Doshisha U.)
- Modèles fluides de flux d'informations [Comp. Networks 2008]

Coll. France – Japon (+ Chine en projet)  
Conception optimale de systèmes de conversion d'énergie



Ecoulement de fluide CO2  
en état transcritique



## Devenir des doctorants & postdocs (ISV1)

- Christophe Audouze Postdoc labo EM2C ECP
- Fatima Daim CDI IR ENSAM Paris
- Cédric Enaux CDI Ingénieur CEA Bruyères (ECP 2004)
- Lucie Fréret CDI IR CNRS Paris
- Pascal Jaisson PRAG U. Versailles
- Marc Joliveau Post-doc Montréal
- Solène Le Bourdiec CDI Ingénieur EDF R&D
- Takuya Kuwahara Post-doc ENS Cachan & Osaka U.
- Michael Ndjinga CDI Ingénieur CEA Saclay (ECP 2003)

Un zoom :

L'initiative  
Complex System Design Lab (CSDL)

Présentation F. De Vuyst  
Responsable ECP du projet CSDL

## Le projet CSDL

*Mettre en place un environnement collaboratif  
d'aide à la décision pour la conception de systèmes complexes*

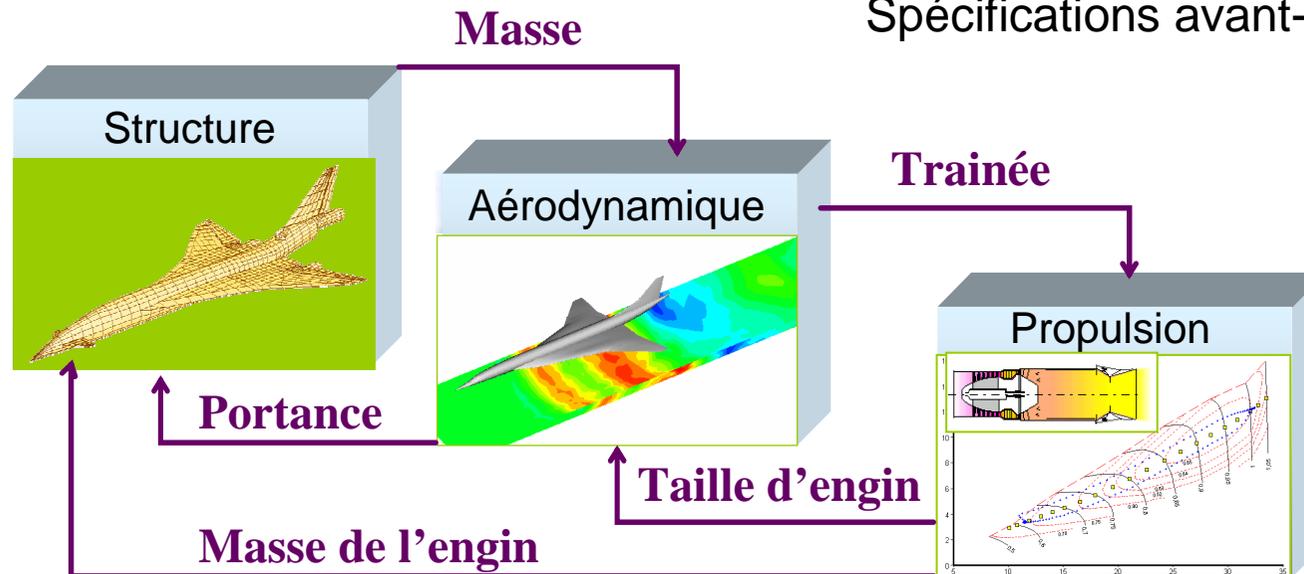
Industrie et services			Centre de recherche	
Grand Groupes	ME	PME	Recherche publique	Centre de Recherche
Dassault-Aviation	CS	Distene	Digiteo/Scilab	ONERA
EADS	ANSYS	EnginSoft	ESILV	ARMINES
MBDA	ESI Group	Eurodécision	INRIA	Supelec
Bull	LMS- Imagine	Oxalya	ECP	
Alcatel Lucent		Samtech	ENS Cachan	
EDF		HPC-Projet		
Thales		Logilab		
Renault				
Dassault-Systèmes				

Pilote : Dassault Aviation



## Exemple : la conception avant-projet d'avion

Spécifications avant-projet

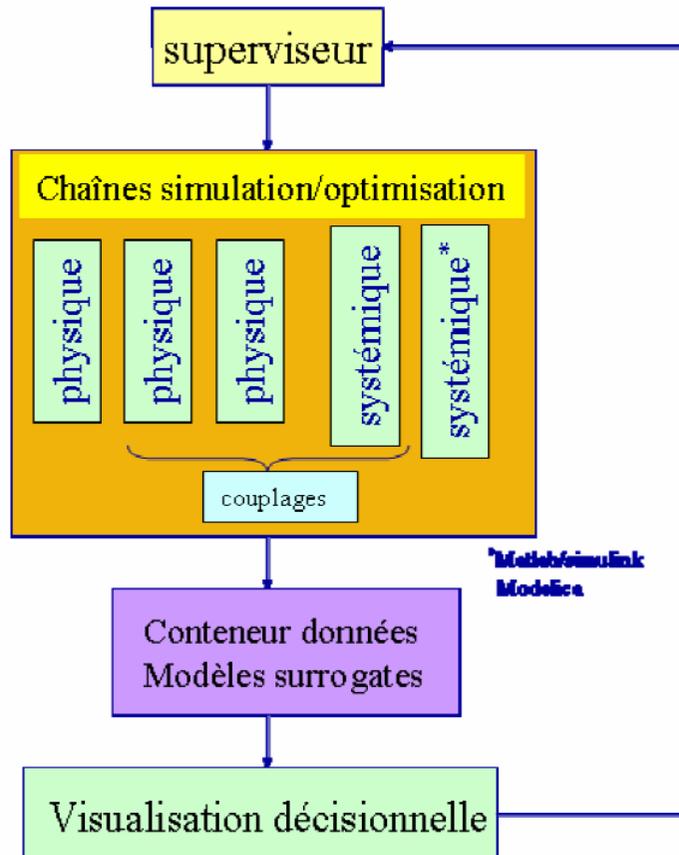


Images Dassault Aviation

Processus de dimensionnement

**Conception avant-projet :**  
**gérer les paramètres de conception**  
**entre disciplines**

## Besoins scientifiques



- Modèles réduits
- Propagation d'incertitudes
- Modèles de données
- Requêtage complexe
- Interactions multidisciplinaires
- Extraction de connaissances
- Visualisation/optimisation "on-the-fly"

Schéma du processus envisagé dans CSDL

## Projet fédérateur laboratoire + partenaires

- Marie-Aude Aufaure  
Modèles et Entrepôts de données  
(chaire Business Objects)
- Céline Hudelot  
Recherche de caractéristiques dans les  
grands volumes de résultats, visualisation
- Erick Herbin  
(+ Supélec + INRIA)  
Prise en compte des incertitudes  
Problèmes de probabilité sous jacents
- Florian De Vuyst  
(+ N. Vayatis ENS Cachan)  
Réduction de modèles  
POD et métamodèles pour la visualisation  
Optimisation/Visualisation on-the-fly  
Apprentissage, Scoring / ranking

## Eclairage : réduction de modèle

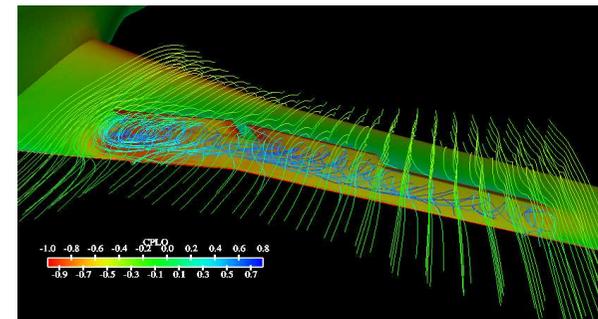
Paramètres de conception  $\longrightarrow$

Champ Elément Finis spatial (x)

$$\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p$$



Modèle d'incertitudes  $\mathbf{Y}$



$$u = u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{Y})$$

ou 
$$u = u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{Y}_\theta)$$

Hyp. : pour une réalisation de  $\mathbf{Y}$ , on suppose que le champ  $u$  est régulier.

## Modèle de représentation (approximation)

$$u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) \approx u_0(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^K a_k(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) \Psi^k(x).$$

Champ moyen

Coefficients de décomposition  
= fonctions de  $\boldsymbol{\theta}$  et  $\mathbf{Y}_\theta$

Base spatiale

## Calcul des coefficients

Si les fonctions  $\Psi^k$  sont orthonormées dans  $L^2(\Omega)$ , alors

$$a_k(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) = \left( u(\cdot, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) - u_0(\cdot), \Psi^k(\cdot) \right)_{L^2(\Omega)}.$$

Processus stochastique à déterminer numériquement  
(polynômes de chaos, ...)

## Choix possible de base réduite spatiale

Les fonctions  $\Psi^k$  sont choisies comme modes POD.

Méthodologie :

1. Plan d'expérience numérique explorant  $\theta$  et  $\mathbf{Y}_\theta$
2. Base de données de solutions
3. ACP sur la base de données (choix d'un produit scalaire)

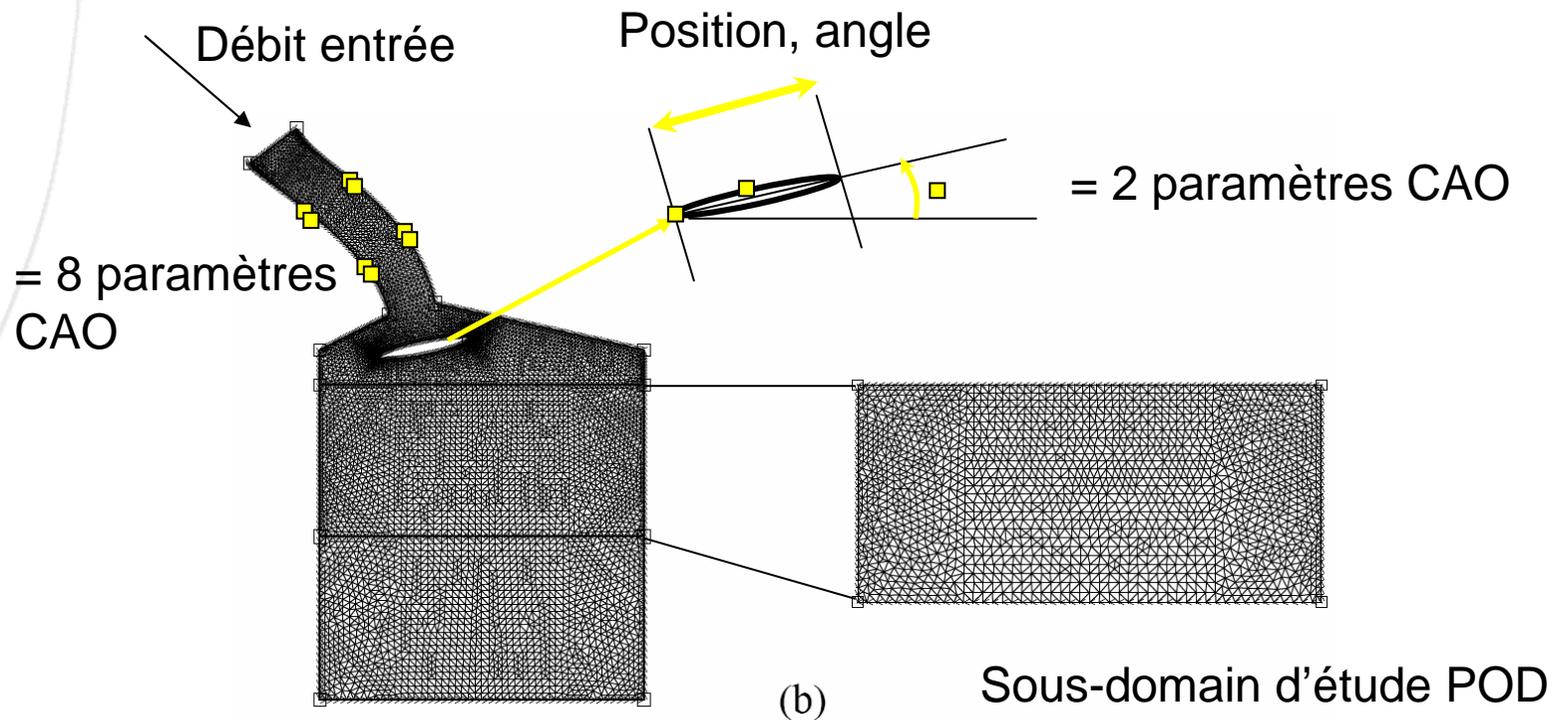
*Approche non intrusive*

## Discussion dans le cas déterministe

$$u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \approx u_0(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^K a_k(\boldsymbol{\theta}) \Psi^k(x).$$

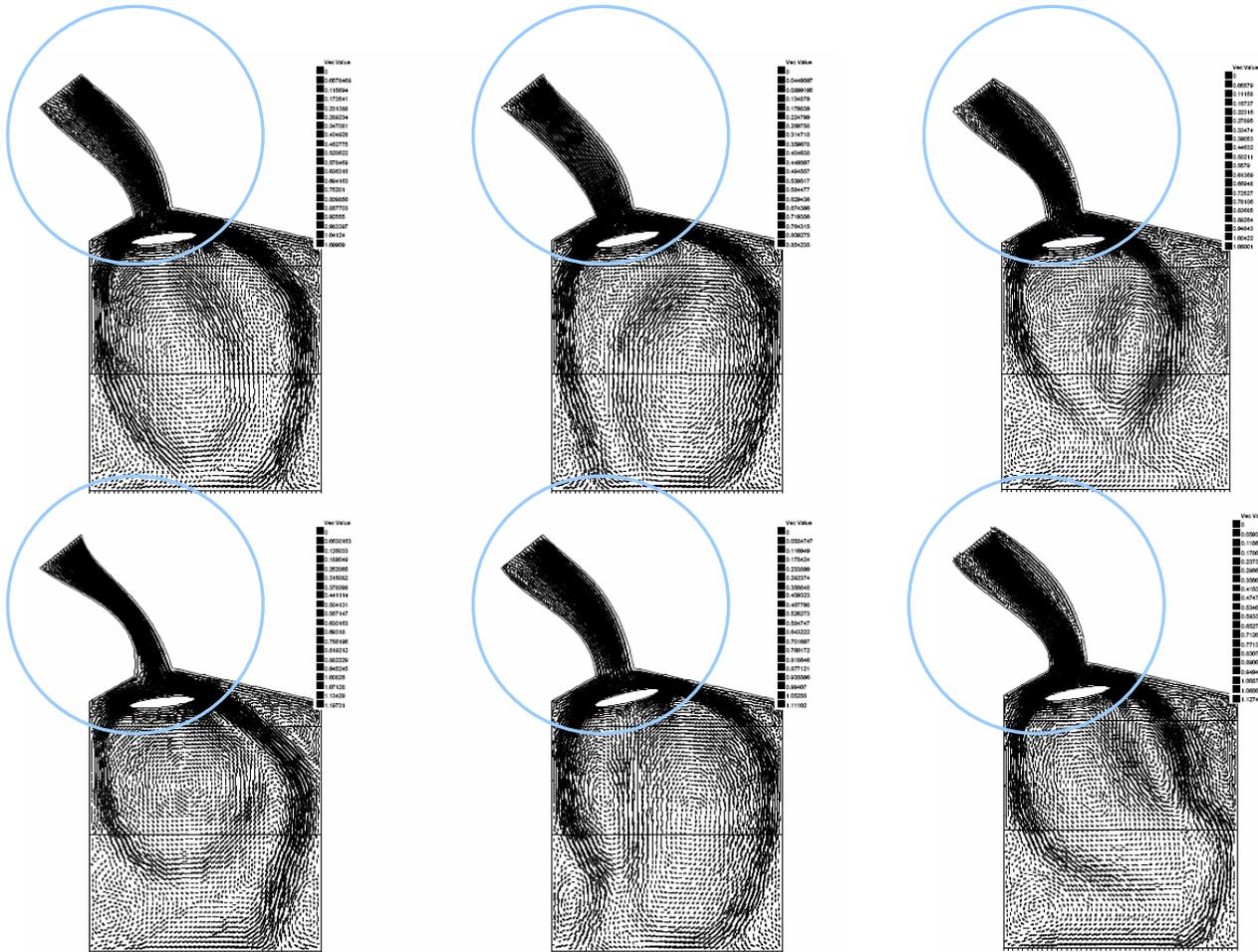
## Etude de cas – Solutions de Navier-Stokes dépendant de onze paramètres

[Audouze, De Vuyst 2008]



→ Total de 11 paramètres CAO  
Chaque paramètre varie dans un intervalle de conception

## Plan d'expérience numérique – Exemples de solutions EF



## Solutions discrètes EF paramétrées

$$u^h = u^h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$$

Variable  
d'espace

Vecteur  
paramétrique

Espace paramétrique :

$$\boldsymbol{\theta} \in [0, 1]^p$$

Q : comment construire un estimateur “rapide” de

$$\boldsymbol{\theta} \mapsto u^h(\cdot, \boldsymbol{\theta}) ?$$

# Analyse Proper Orthogonal Decomposition

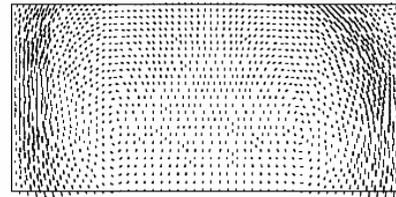
## Modes POD en vitesse

$\lambda^1$ 23708.3	$\lambda^5$ 328.89
$\lambda^2$ 3667.95	$\lambda^6$ 155.382
$\lambda^3$ 735.854	$\lambda^7$ 145.539
$\lambda^4$ 505.24	$\lambda^8$ 85.2643

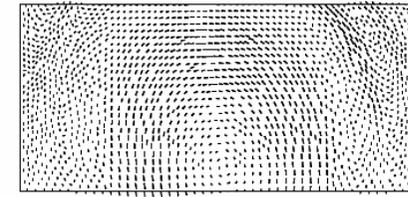
1ères v.p. de la matrice de corrélation

Bon taux de décroissance

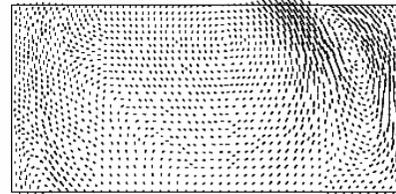
POM #1



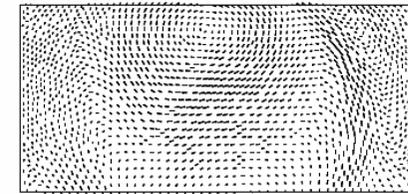
POM #2



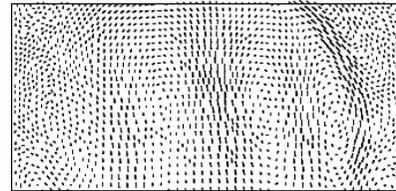
POM #3



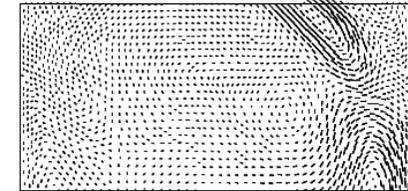
POM #4



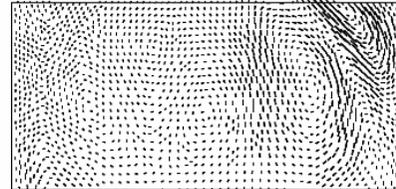
POM #5



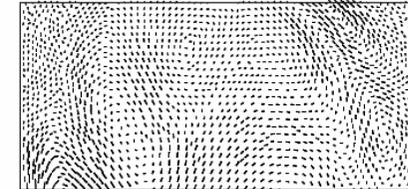
POM #6



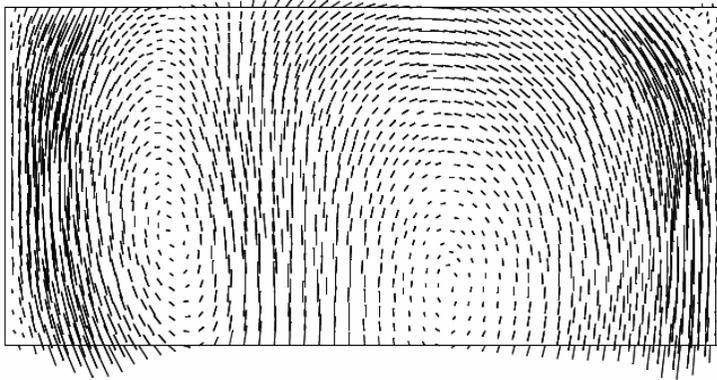
POM #7



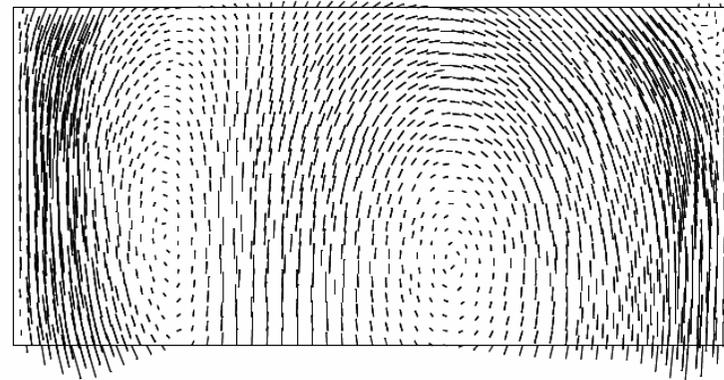
POM #8



## Comparaison solution E.F. / approximation POD



$$u^{\theta,h}(\mathbf{x})$$



$$\Pi^K u^{\theta,h} = \sum_{k=1}^K a_k(\boldsymbol{\theta}) \Psi^{k,h}(\mathbf{x}).$$

Reconstruction avec  $K=5$

(5 modes POD) !

## Apprentissage des coefficients

1. Générer un nuage de  $N$  points  $\theta^i$  dans  $[0, 1]^p$  (LHS, Sobol, etc.);
2. Calculer  $N$  solutions discrètes EF  $u^{i,h} = u^{\theta^i,h}$ ;
3. Calculer  $a_k^i = a_k(\theta^i) = (u^{i,h}, \Psi^{k,h})$ ;
4. Interpoler/approcher les coefficients  $a_k$  dans le domaine paramétrique.

[Audouze, De Vuyst IJNME 2008]

→ Nécessite des interpolateurs/approximateurs haute dimension

Plusieurs candidats :

Polynômes

Fonctions à base radiales (RBF) [Wendland 2006]

Approches à krigeage

Moindres carrés mobiles (diffuse approximation)

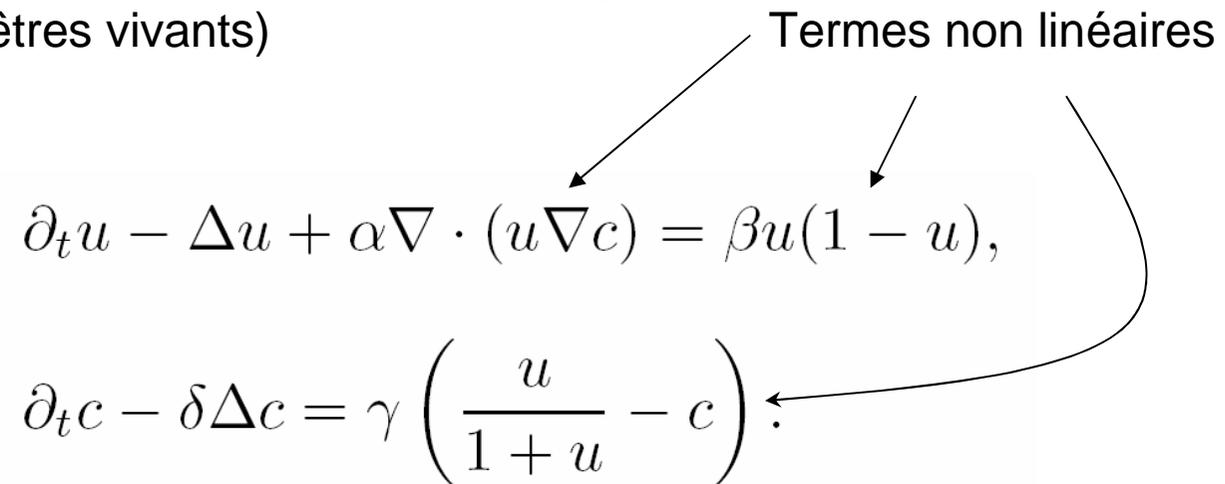
Approximation particulière type SPH, etc...

## Expérimentation numérique

Système non linéaire 1D de Keller-Segel  
(modélisant la formation de motifs sur la peau  
de certains êtres vivants)

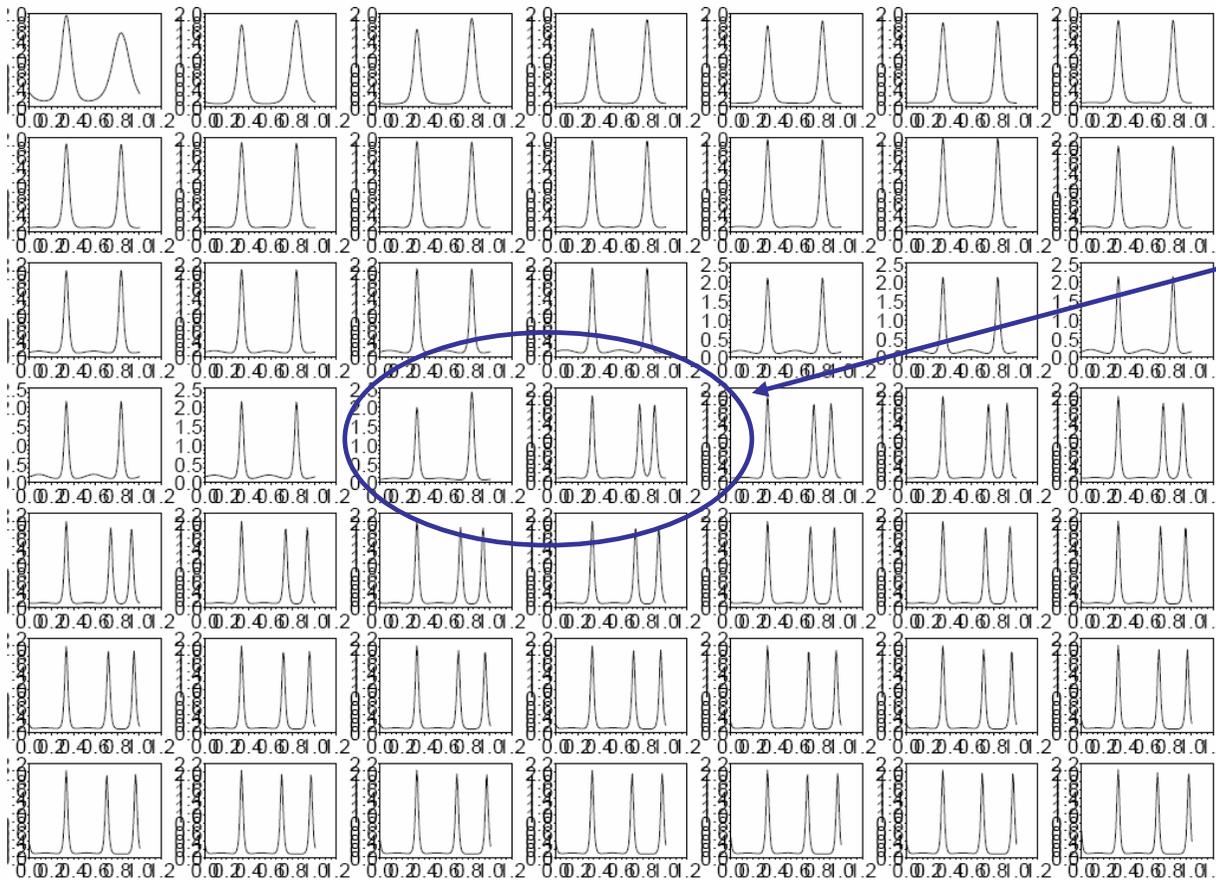
$$\begin{aligned} \partial_t u - \Delta u + \alpha \nabla \cdot (u \nabla c) &= \beta u(1 - u), \\ \partial_t c - \delta \Delta c &= \gamma \left( \frac{u}{1 + u} - c \right). \end{aligned}$$

Termes non linéaires



Structure riche des solutions dans l'espace paramétrique.

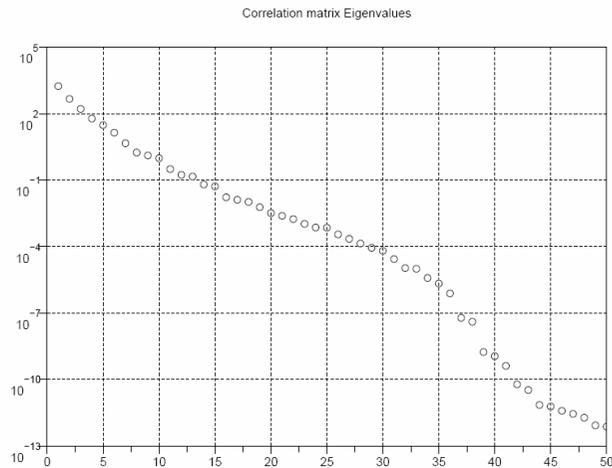
## Solutions 1D stationnaire avec CL périodique



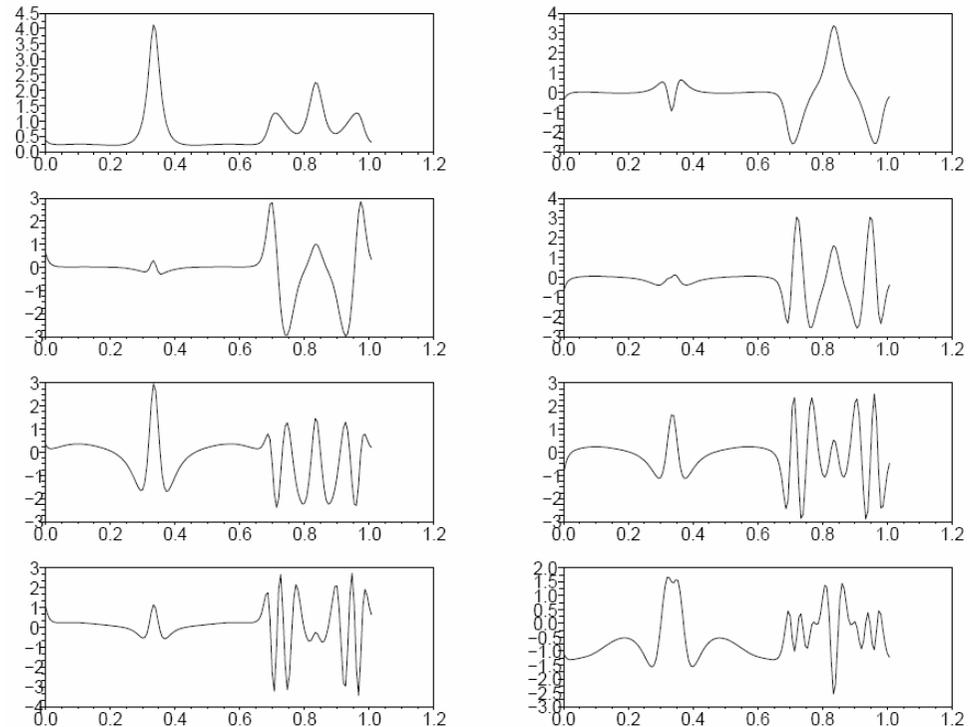
Bifurcation  
paramétrique

Paramètre  $\gamma$  variable seulement dans cet essai.

# Décomposition POD



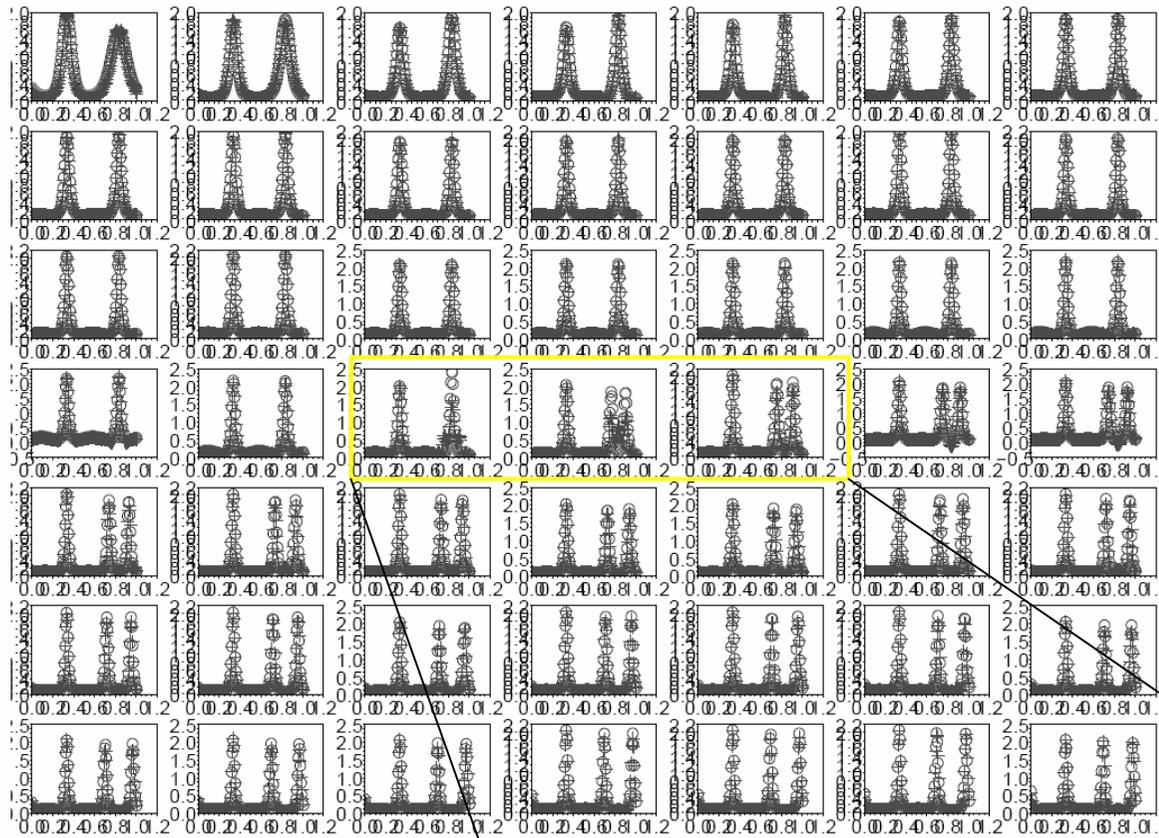
Spectre de la matrice de corrélation



Les huit premiers modes POD

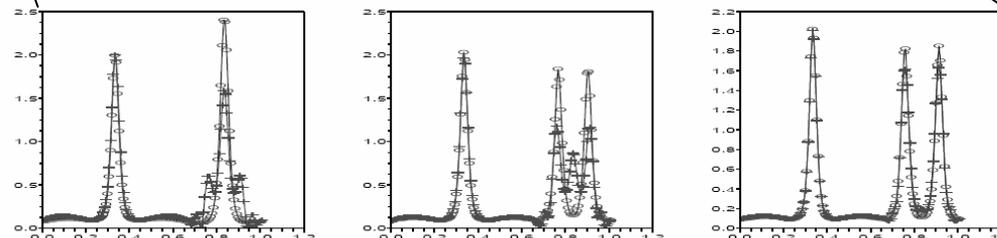
# Comparaison POD-RBF ROM / Eléments finis

(en utilisant  $K=6$ )



Légère perte de précision au voisinage de la bifurcation mais restitution globale satisfaisante

ZOOM

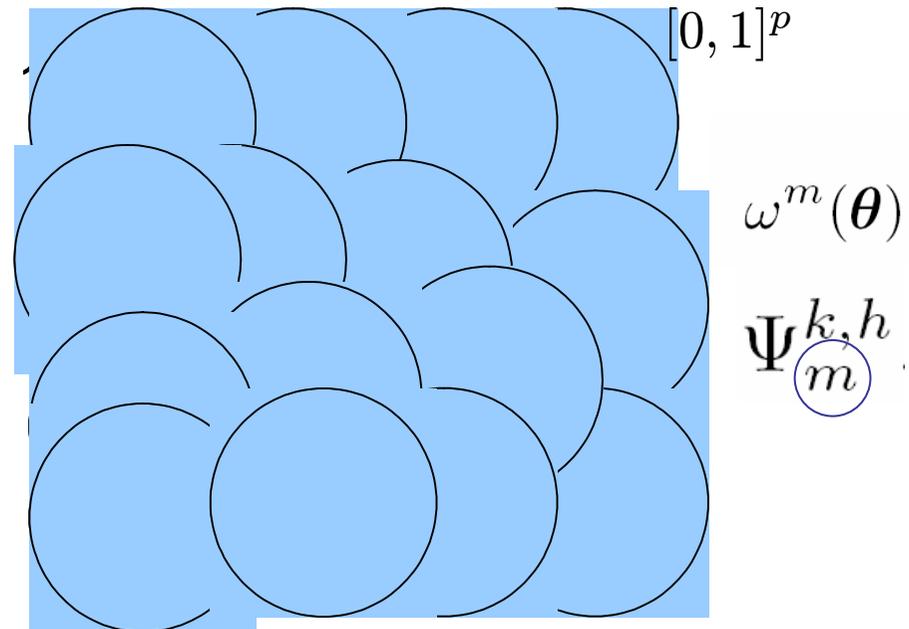


## Proposition : base POD locale + partition de l'unité

Construction pratique d'une partition de l'unité :

$$\hat{\omega}^m(\boldsymbol{\theta}) = \Phi\left(\frac{\|\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{c,m}\|}{\sigma^m}\right).$$

Noyau régulier positif à support compact



Alors  $\omega^m(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\hat{\omega}^m(\boldsymbol{\theta})}{\sum_{\ell=1}^M \hat{\omega}^{\ell}(\boldsymbol{\theta})}$  a les propriétés attendues :

$$\omega^m \geq 0, \sum_m \omega^m \equiv 1.$$

# Algorithme

1. Construire une base locale POD relative à la fonction de partition n°  $m$  :

$$\min_{\substack{(\Psi_m^{1,h}, \dots, \Psi_m^{K_m,h}) \\ (\Psi_m^{k,h}, \Psi_m^{\ell,h}) = \delta_{k\ell}, 1 \leq k \leq \ell \leq K_m}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \omega_m(\theta^i) \left\| u^{i,h} - \sum_{k=1}^{K_m} (u^{i,h}, \Psi_m^{k,h}) \Psi_m^{k,h} \right\|^2$$

Moindres carrés à poids

Reconstruction locale : 
$$\tilde{u}^{\theta,h} = \sum_{k=1}^{K_m} (u^h(\theta), \Psi_m^{k,h}) \Psi_m^{k,h}.$$

# Reconstruction globale

- A partir de

$$\sum_{m=1}^M \omega_m(\boldsymbol{\theta}) = 1$$

on a l'approximation globale :

$$\tilde{u}^{\theta,h} = \sum_{m=1}^M \omega_m(\boldsymbol{\theta}) \sum_{k=1}^{K_m} (u^h(\boldsymbol{\theta}), \Psi_m^{k,h}) \Psi_m^{k,h}.$$

de la forme

$$\hat{u}^{\theta,h} = \sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{K_m} \hat{a}_m^k(\boldsymbol{\theta}) \Psi_m^{k,h}$$

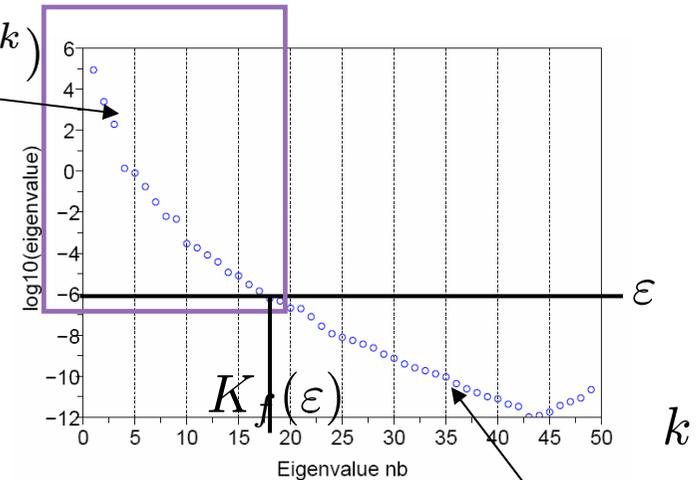
Approximateurs RBF

# Un élément d'analyse numérique (cas d'un problème d'évolution)

# Approximation POD

Most of the information contained here

$\log_{10}(\lambda^k)$



- Soit

$$\varepsilon > 0$$

un seuil d'erreur. Si

$$K_f / \sum_{k=K_f+1}^N \lambda^k \leq \varepsilon \sum_{k=1}^N \lambda^k \quad (K_f = K_f(\varepsilon)),$$

Eigenvalue residual part

alors on a l'estimation

$$\sum_{i=1}^N \|f^i - \Pi^{K_f} f^i\|_{0,\Omega}^2 \leq \varepsilon \sum_{i=1}^N \|f^i\|_{0,\Omega}^2.$$

## Ex éq. de la chaleur

### “Réponse” de la solution à la donnée initiale et au second membre

$$\frac{d}{dt}(u, v)_{0,\Omega} + (u, v)_{1,0,\Omega} = (f, v)_{0,\Omega} g(t) \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), t \in (0, T) \quad (1)$$

$$u(\cdot, t = 0) = u^0 \quad \text{in } \Omega. \quad (2)$$

$$S_f^N = \{f^1, \dots, f^N \in L^2(\Omega)\}$$

$$S_{u^0}^M = \{u^{0,1}, \dots, u^{0,M} \in L^2(\Omega)\}.$$

$$\Pi_f^{K_f} f = \sum_{k=1}^{K_f} (f, \Psi_f^k)_{0,\Omega} \Psi_f^k, \quad f \in L^2(\Omega), \quad \Pi_0^{K_0} u^0 = \sum_{\ell=1}^{K_0} (u^0, \Psi_0^\ell)_{0,\Omega} \Psi_0^\ell, \quad u^0 \in L^2(\Omega).$$

## Dual basis construction

$$\frac{d}{dt}(\varphi_f^k, v)_{0,\Omega} + (\varphi_f^k, v)_{1,0,\Omega} = (\Psi_f^k, v)_{0,\Omega} g(t) \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), t \in (0, T),$$

$$\varphi_f^k(\cdot, t = 0) = 0 \quad \text{in } \Omega$$

$$\frac{d}{dt}(\varphi_0^\ell, v)_{0,\Omega} + (\varphi_0^\ell, v)_{1,0,\Omega} = 0 \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), t \in (0, T),$$

$$\varphi_0^\ell(\cdot, t = 0) = \Psi_0^\ell \quad \text{in } \Omega$$

The solution  $\tilde{u}$  of the approximate heat equation problem

$$\frac{d}{dt}(\tilde{u}, v)_{0,\Omega} + (\tilde{u}, v)_{1,0,\Omega} = (\Pi_f^{K_f} f, v)_{0,\Omega} g(t) \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), t \in (0, T),$$

$$\tilde{u}(\cdot, t = 0) = \Pi_0^{K_0} u^0 \quad \text{in } \Omega$$

writes in closed form

$$\tilde{u}(\cdot, t) = \sum_{k=1}^{K_f} (f, \Psi_f^k)_{0,\Omega} \varphi_f^k(\cdot, t) + \sum_{\ell=1}^{K_0} (u^0, \Psi_0^\ell)_{0,\Omega} \varphi_0^\ell(\cdot, t) \quad \forall t \in [0, T].$$

## Estimation d'erreur a priori

En utilisant le lemme de Gronwall,

$$\sum_{i=1}^N \|(u^i - \tilde{u}^i)(\cdot, t)\|_{0,\Omega}^2 \leq \varepsilon \left[ 2 \sum_{i=1}^N \|u^{0,i}\|_{0,\Omega}^2 + \sum_{i=1}^N \|f^i\|_{0,\Omega}^2 [A(t)]^2 \right] \exp\left(-\frac{t}{[C(\Omega)]^2}\right)$$

$$\text{with } A(t) = \int_0^t \exp\left(\frac{1}{2} \frac{s}{[C(\Omega)]^2}\right) |g(s)| ds.$$

# Deuxième zoom : Projet DIGIPLANTE

Resp. P. H. Cournède