

Aix-Marseille Université  
Ecole doctorale de Mathématiques et Informatique, ED 184  
Institut Mathématiques de Marseille, UMR 7373

Thèse présentée pour obtenir le grade de  
**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE D'AIX-MARSEILLE**  
Discipline : Mathématiques appliquées

**Léticia BUSLIG**

**Méthodes stochastiques de modélisation de données :  
application à la reconstruction de données non  
régulières**

Soutenue le 06 octobre 2014 devant le jury :

Pierre GOOVAERTS	Biomedware/Université de Floride (USA)	Rapporteur
Pep MULET MESTRE	Université de Valence (Espagne)	Rapporteur
Victor PICHENY	INRA	Examineur
Christophe POUET	Ecole centrale Marseille	Examineur
Jacques LIANDRAT	Ecole centrale Marseille	Directeur de thèse
Jean BACCOU	IRSN	Co-encadrant

# Table des matières

<b>I</b>	<b>Planification adaptative d'expériences à base de Krigeage</b>	<b>4</b>
<b>1</b>	<b>Rappels sur le Krigeage et les plans d'expériences</b>	<b>8</b>
1.1	Krigeage . . . . .	8
1.1.1	Interpolation par Krigeage . . . . .	8
1.1.2	Simulations séquentielles Gaussiennes . . . . .	22
1.1.3	Conditionnement des matrices de Krigeage . . . . .	25
1.2	Plan d'expériences dépendant d'un modèle . . . . .	29
1.2.1	Algorithmes de construction . . . . .	29
1.2.2	Choix du critère $\mathcal{C}_M$ . . . . .	30
<b>2</b>	<b>Construction et implémentation de plans d'expériences adaptatifs</b>	<b>33</b>
2.1	Commentaires sur l'article . . . . .	33
2.2	Construction and efficient implementation of adaptive objective-based designs of experiments . . . . .	37
2.2.1	Introduction . . . . .	37
2.2.2	Coupling kriging and DoEs . . . . .	39
2.2.3	Adaptive objective-based DoEs . . . . .	44
2.2.4	Numerical stability of the DoE procedure . . . . .	47
2.2.5	Cost reduction strategies for DoE construction . . . . .	53
2.2.6	Numerical tests . . . . .	57
2.2.7	Conclusions . . . . .	63
2.3	Application à l'étude de la fissuration mécanique . . . . .	70
2.3.1	Description du contexte de l'étude . . . . .	70
2.3.2	Construction du plan d'expériences adaptatif . . . . .	71
<b>II</b>	<b>Préconditionneur à base de schémas de subdivision</b>	<b>76</b>
2.4	Résolution de systèmes linéaires et méthodes itératives . . . . .	79
2.5	Analyse multirésolution . . . . .	83
2.5.1	Analyse multi-échelles et schémas de subdivision . . . . .	84

2.5.2	Couplage résolution multigrilles et méthodes multi-échelles	90
2.6	Construction théorique du préconditionneur dans le cas d'une grille régulière	94
2.6.1	Décomposition de la matrice de covariance et reformulation du système dans l'espace de Fourier	96
2.6.2	Construction d'un préconditionneur pour quelques covariances usuelles	102
2.7	Résultats numériques	108
2.7.1	Etude du rapport des valeurs propres de la matrice préconditionnée	108
2.7.2	Résolution multigrille	113

# Introduction générale

Les méthodes de modélisation de données ressortent naturellement en analyse de risques. En effet, les données à traiter sont le plus souvent discrètes car provenant de mesures sur un territoire ou de simulations numériques obtenues à l'aide d'un code de calcul par exemple. Dans ce travail, nous abordons deux problématiques deux applications qui sont issues des études de l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN).

La première concerne la cartographie de données de mesure. Dans sa mission de surveillance de l'environnement, l'IRSN doit régulièrement contrôler l'état de la radioactivité en France. Pour cela, il récolte les données provenant de réseaux de capteurs répartis sur le territoire français (Figure 1, gauche). L'objectif est alors de prédire, via un modèle de reconstruction qui utilise les observations, des cartes qui serviront ensuite pour l'information de la population. Pour améliorer le contrôle, les réseaux de capteurs peuvent être également étendus et la question de l'implantation de nouveaux appareils se pose : sachant que le nombre de capteurs supplémentaires est limité, nous cherchons alors à les placer en priorité dans des régions d'intérêt pour l'analyse comme par exemple dans les zones à forte densité de population.

La seconde application porte sur la prise en compte des incertitudes dans les codes de calcul complexes. L'IRSN dans sa mission d'expertise est amené à faire des études de sûreté pour évaluer les risques de perte d'intégrité d'un réacteur nucléaire en cas d'accidents hypothétiques. Pour cela, il utilise des codes de calcul qui simulent les phénomènes physiques se déroulant dans une installation. Certains paramètres d'entrée de ces codes (constantes des modèles physiques, conditions sur la géométrie, ...) ne sont pas connus précisément et nous cherchons alors à mesurer l'impact de ces incertitudes sur les grandeurs simulées. Il s'agit notamment de savoir si les variations des paramètres d'entrée ne peuvent pas faire basculer le système vers un comportement très différent de celui obtenu quand les paramètres sont fixés à leur valeur de référence (présence de saut ou de forts gradients dans la réponse) (Figure 1, droite) voire l'amener dans un état qui ne respecterait pas les conditions de sûreté (température dans le réacteur dépassant une valeur seuil par exemple). Compte tenu du temps de calcul des codes qui peut être très long, l'objectif est ici de se servir d'un modèle de reconstruction peu cou-

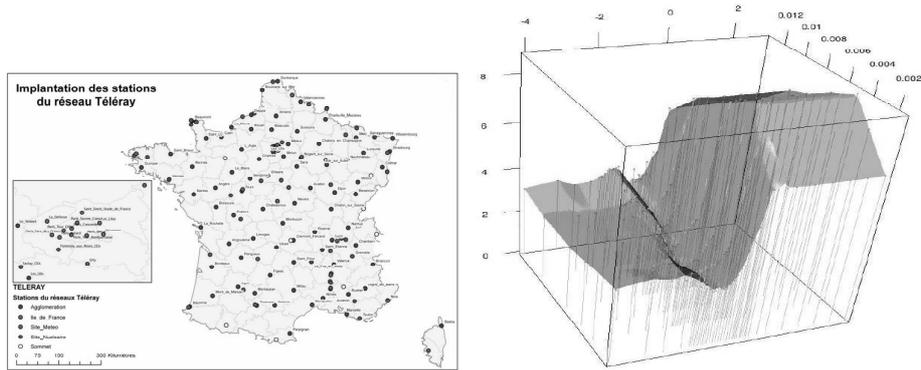


FIGURE 1 – Exemples d’applications. Gauche, réseau de capteurs de mesure (réseau Téléray), droite, réponse d’un code de fissuration mécanique en fonction de deux paramètres incertains.

teurs pour approcher la réponse du code et effectuer des nouvelles simulations dans des zones pertinentes (zones à forts gradients, zone de dépassement de seuil,....).

Ces deux problématiques sont très différentes, toutefois elles peuvent se formaliser de la même façon. En effet, dans les deux cas, l’analyse porte sur un phénomène obtenu via une fonction de transfert (appareil de mesure, code de calcul) qui est évaluée en certains points d’un espace de dimension finie (espace géographique, espace des paramètres d’entrée du code) et qui fournit des réponses d’intérêt (mesure de la radioactivité, température simulée dans un réacteur). De façon générale, dans cette thèse, nous noterons  $y$  la fonction de transfert,  $X^k = \{x_i, i \in \{1, \dots, k\}\}$  l’ensemble des  $k$  points d’observation appelés plan d’expériences à  $k$  points et  $Y^k = \{y(x_1), \dots, y(x_k)\}$  les évaluations disponibles sur ce plan. D’un point de vue méthodologique, deux points importants sont à regarder : ils concernent le choix du modèle d’approximation qui doit représenter le plus fidèlement possible le phénomène à étudier et la construction du plan d’expériences qui doit apporter suffisamment d’information pour capturer les comportements locaux du phénomène.

Dans cette thèse, le modèle est fixé et se base sur une approche stochastique de type Krigeage (Goovaerts (1997), Wackernagel (1998)), ses principaux avantages résidant dans la prise en compte dans la modélisation de la liaison spatiale empirique des données et la possibilité de fournir une erreur a priori qui permet de nuancer la confiance dans les résultats obtenus. Notre travail se focalise sur le deuxième point et plus précisément sur le développement de nouvelles techniques numériques de planification d’expériences. En pratique, le nombre d’observations disponibles est souvent limité à cause du

coût économique (mesures) ou à cause du temps de calcul (simulations) par exemple. Il est alors important de développer des méthodes de sélection efficace des expériences à réaliser. Nous nous intéressons donc à la construction de plans d'expériences qui permettent un bon compromis entre le nombre d'observations et la qualité de prédiction. Afin de traiter les deux applications présentées précédemment, nous chercherons à construire une méthode suffisamment générique pour enrichir l'information dans des zones spécifiques en fonction des objectifs de l'analyste.

Ce mémoire se compose de deux parties. Dans la première partie, un critère générique de planification adaptative est d'abord proposé en étendant les travaux de Picheny *et al* (Picheny et al., 2010), analysé et implémenté. Des stratégies de réduction du coût de calcul de la procédure d'optimisation du critère et de stabilisation (par ajout de variance d'erreur) du système de Krigage sont également proposées. Une alternative à l'ajout de variance d'erreur est ensuite développée dans la seconde partie : elle se base sur la construction d'un préconditionneur qui exploite la décomposition multi-échelle de la matrice de covariance à l'aide de schémas de subdivision (Dyn, 1992). A chaque fois, les développements méthodologiques sont testés sur des fonctions analytiques puis appliqués aux cas de la cartographie de mesures et de la prise en compte des incertitudes dans les codes de calcul.

# Première partie

## Planification adaptative d'expériences à base de Krigeage



# Introduction de la partie I

Il existe deux grandes familles de plans d'expériences. La première se base sur des considérations géométriques et conduit à des plans qui garantissent une bonne couverture de l'espace de variation des entrées (McKay et al. (1979), Niederreiter (1992), Myers and Montgomery (1995)). Parmi les approches classiques, nous pouvons citer les plans à faible discrédance ou les Hypercubes Latins optimisés comme ceux maximisant la distance minimale entre les observations (Figure 2). Plus de détails peuvent être trouvés dans Franco (2008).

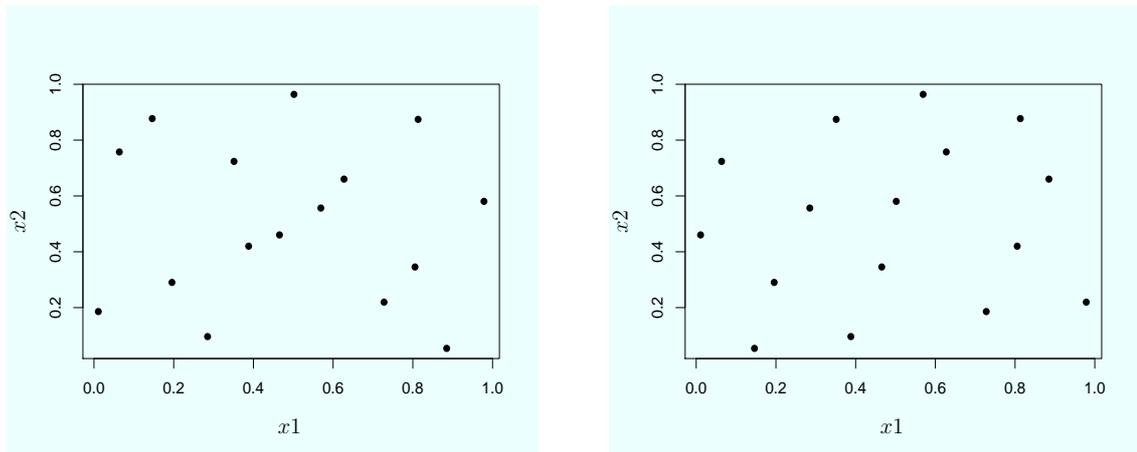


FIGURE 2 – Deux exemples de plans à 16 points ne dépendant pas du modèle. A gauche, plan à faible discrédance, et à droite, plan LHS optimisé.

Cependant, ce type de construction n'est pas toujours satisfaisant en analyse de risques car nous cherchons souvent à préciser le comportement du phénomène dans des régions spécifiques de l'espace et qui sont pertinentes en vue d'une prise de décision. Le raffinement du plan d'expériences étant global, l'augmentation de l'information dans des zones d'intérêt s'accompagne d'une augmentation du nombre d'observations partout même dans des zones peu intéressantes pour l'analyse. C'est la raison pour laquelle nous nous focalisons dans cette thèse sur le second type de plans d'expériences dit dépendant d'un

modèle (de Krigeage ici) (Sacks et al., 1989). Ces derniers consistent à choisir les points observations qui maximisent la qualité de prédiction du modèle. Dans le cas où l'objectif de l'analyste est de cibler l'information dans des régions spécifiques (zone de dépassement de seuil ou de forte densité de population par exemple), ils conduisent à un raffinement local de l'ensemble des points d'observations et nous parlerons de plans adaptatifs. Leur construction nécessite alors une étape de prédiction à l'aide du modèle en partant d'un plan d'expériences avec peu d'observations puis à une étape de rajout de points via l'optimisation d'une fonction coût. Ce type de plan est utilisé dans beaucoup d'applications comme en optimisation (Sasena et al. (2002), Ginsbourger et al. (2014)) ou en fiabilité (Picheny et al., 2010). Cependant, la construction d'un plan d'expériences dépendant d'un modèle s'appuie en général sur un grand nombre de prédictions utilisant de plus en plus de points. L'efficacité de la procédure de planification peut alors être détériorée par des instabilités numériques et un coût de calcul élevé.

Cette partie est donc consacrée à de nouveaux développements numériques pour palier ces difficultés et exploiter pleinement les avantages que présente ce type de techniques. Après un premier chapitre de rappel sur la prédiction par Krigeage et sur la planification d'expériences, le chapitre 2 présente les travaux qui ont été menés pour faciliter l'utilisation des méthodes de planification adaptative d'expériences en pratique.

# Chapitre 1

## Rappels sur le Krigeage et les plans d'expériences

Ce chapitre est dédié à quelques rappels sur les méthodes d'interpolation par Krigeage et de plans d'expériences. Après avoir décrit les différents types de Krigeage, une attention particulière est portée à leur utilisation pour le raffinement de plans. Nous insisterons sur les limitations des stratégies classiques de construction qui concernent le choix du critère de planification et son implémentation numérique et qui motiveront les nouveaux développements proposés dans ce manuscrit.

### 1.1 Krigeage

#### 1.1.1 Interpolation par Krigeage

##### Introduction sur le Krigeage

Le Krigeage est une méthode d'interpolation issue de la géostatistique. Cette méthode porte le nom de son précurseur, l'ingénieur minier sud-africain D.G. Krige. Dans les années 1950, Krige a développé une série de méthodes statistiques empiriques afin de déterminer la distribution spatiale de minerais à partir d'un ensemble de forages. C'est cependant le français Matheron qui a formalisé l'approche en utilisant les corrélations entre les forages pour en estimer la répartition spatiale. Matheron a également assuré le développement de cette méthode au Centre de Géostatistique de l'Ecole des Mines de Paris et lui a donné le nom de « Krigeage ».

Dans ce type d'approche, les données disponibles  $\{y(x_i)\}_{i=1,\dots,k}$  sont considérées comme des réalisations de variables aléatoires  $\{\mathcal{Y}(x_i), i = 1, \dots, k\}$  provenant d'un processus aléatoire  $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$  (avec  $\mathcal{D}$  un domaine borné de

$\mathbb{R}^p$ ) de la forme

$$\mathcal{Y}(x) = m(x) + \delta(x), \quad x \in \mathcal{D}, \quad (1.1)$$

où  $x$  appartient au domaine  $\mathcal{D}$  considéré,  $m(\cdot)$  est la structure déterministe pour l'espérance (ou tendance) de  $\mathcal{Y}(\cdot)$  et  $\delta(\cdot)$  un processus aléatoire spatialement autocorrélé d'espérance nulle. Dans ce manuscrit, nous supposons que la tendance est constante, cela conduit à la notion de krigeage simple ou ordinaire selon que  $m(\cdot)$  soit supposée connue ou inconnue. De plus, on se restreint à l'étude de processus Gaussiens. Dans ce cas, la construction de l'estimateur du krigeage se fait en deux étapes (Cressie, 1993) :

1. L'identification de la structure de corrélation spatiale associée à  $\mathcal{Y}(\cdot)$ .
2. La construction de l'estimateur de Krigeage comme une combinaison linéaire des données dont les poids intègrent la structure spatiale obtenue à l'étape précédente.

### Identification de la structure des données

Cette étape va se faire via l'estimation d'une quantité appelée semi-variogramme qui décrit l'évolution de la semi-variance en fonction de la distance entre les points d'observation et qui s'écrit :

$$\gamma(x, x+h) = \frac{1}{2} \text{var}\{\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x)\}, \quad x \in \mathcal{D}, \quad (1.2)$$

où var représente la variance.

Pour rendre possible l'inférence statistique, des hypothèses de stationnarité sur  $\mathcal{Y}$  sont formulées. Au sens strict, la stationnarité signifie que la loi de probabilité de  $\mathcal{Y}$  est invariante par translation. En théorie du Krigeage, cette hypothèse est souvent affaiblie en se focalisant sur les deux premiers moments de  $\mathcal{Y}$ , sa moyenne et sa variance-covariance. Deux nouvelles notions de stationnarités peuvent alors être définies de la façon suivante.

#### **Définition 1.1.1 Stationnarité du second ordre :**

- La moyenne de  $\mathcal{Y}$  existe et ne dépend pas de  $x$ .

$$E\{\mathcal{Y}(x)\} = m, \quad \forall x \in \mathcal{D}.$$

*En Krigeage, cette moyenne est souvent supposée nulle, quitte à considérer le processus centré ( $\mathcal{Y} - m$ ).*

- La covariance de  $\mathcal{Y}(x)$  et  $\mathcal{Y}(x+h)$  existe et ne dépend que du vecteur de translation  $h$ .

$$\text{cov}\{\mathcal{Y}(x), \mathcal{Y}(x+h)\} = C(h), \quad \forall x, x+h \in \mathcal{D}.$$

*La fonction  $C(\cdot)$  est alors appelée fonction de covariance.*

D'après la définition du semi-variogramme, Eq. 1.2, celui-ci se calcule à partir des différences  $\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x)$  et non des valeurs de  $\mathcal{Y}(x)$ . L'hypothèse de stationnarité du second ordre, qui suppose l'existence des deux premiers moments de  $\mathcal{Y}(x)$ , est donc inutilement restrictive : la stationnarité intrinsèque est alors introduite.

**Définition 1.1.2 Stationnarité intrinsèque :**

- La moyenne de tout accroissement  $\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x)$  existe et est nulle.

$$E\{\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x)\} = 0, \quad \forall x, x+h \in \mathcal{D}.$$

- La variance de tout accroissement  $\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x)$  existe et ne dépend que du vecteur de translation  $h$ .

$$\text{var}\{\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x)\} = 2\gamma(h), \quad \forall x, x+h \in \mathcal{D}.$$

Il est important de noter qu'un processus aléatoire stationnaire du second ordre est intrinsèquement stationnaire. La réciproque n'est vraie que si le semi-variogramme est borné. L'hypothèse de stationnarité intrinsèque va donc permettre de travailler avec un ensemble de modèles de semi-variogrammes beaucoup plus riche que celui qui serait construit à partir de fonctions de covariance.

**Remarque 1.1.1**

*Même si par la suite, les travaux de cette thèse porteront essentiellement sur des formulations du krigeage à l'aide de la fonction de covariance, l'hypothèse de stationnarité intrinsèque a été rappelée ici car c'est celle qui est le plus souvent retenue en pratique. En effet, elle caractérise une propriété du semi-variogramme qui est la quantité clé étudiée par les ingénieurs.*

Sous ces deux hypothèses de stationnarité, le semi-variogramme devient :

$$\gamma(h) = \frac{1}{2}E\{(\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x))^2\}$$

et vérifie les propriétés suivantes :

- La parité :  $\gamma(h) = \gamma(-h), \quad \forall h$
- La positivité :  $\begin{cases} \gamma(h) > 0, & \forall h \neq 0, \\ \gamma(0) = 0. \end{cases}$
- La négativité conditionnelle :  $\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k a_i a_j \gamma(x_i - x_j) \leq 0$   
 $\forall \{x_i\}_{i=1,\dots,k}$  et  $\forall \{a_i\}_{i=1,\dots,k}$  tel que  $\sum_{i=1}^k a_i = 0$

Dans la suite de ces travaux, on considère une structure spatiale invariante par rotation. Elle ne dépend donc que de la distance entre les points (i.e.

la norme du vecteur de translation) que nous continuons à noter  $h$  pour simplifier.

En pratique, pour ne pas avoir à tester la négativité conditionnelle de tout modèle candidat pour représenter un semi-variogramme, il est usuel de se limiter à une liste de modèles admissibles dont les plus classiques (Fig. 1.1) sont :

– Modèle Gaussien :

$$\gamma(h) = c(1 - e^{-\left(\frac{h}{a}\right)^2}), \quad (1.3)$$

– Modèle exponentiel :

$$\gamma(h) = c(1 - e^{-\frac{h}{a}}), \quad (1.4)$$

– Modèle sphérique :

$$\gamma(h) = \begin{cases} c\left(\frac{3}{2}\frac{h}{a} - \frac{1}{2}\frac{h^3}{a^3}\right), & \text{pour } 0 \leq h \leq a, \\ c, & \text{pour } h > a. \end{cases}, \quad (1.5)$$

– Modèle puissance :

$$\gamma(h) = ch^r, \text{ pour } 0 < r < 2. \quad (1.6)$$

Notons que chaque semi-variogramme représente une structure spatiale différente des données.

Si l'on se place à petites échelles, le modèle Gaussien présente une pente à l'origine plus lente que les modèles exponentiel et sphérique ce qui correspond à des données plus régulières. A grande échelle, nous pouvons également noter une différence majeure entre les 3 premiers modèles et le modèle puissance. En effet, les modèles exponentiel, sphérique et Gaussien atteignent un plateau lorsque  $h$  augmente traduisant le fait qu'à partir d'une certaine distance la corrélation spatiale entre les données ne dépend plus de la distance qui les sépare. Ils sont donc bornés et il existe alors un lien entre semi-variogramme et la fonction de covariance :

$$\gamma(h) = C(0) - C(h) \quad \text{ou} \quad C(h) = \lim_{h \rightarrow +\infty} \gamma(h) - \gamma(h)$$

La valeur du plateau (i.e. la limite à l'infini du semi-variogramme) est appelée **palier** et la distance à partir de laquelle elle est atteinte est appelée **portée**. Dans le cas de semi-variogrammes tels que le modèle Gaussien, ce palier est asymptotique et nous définissons alors une portée pratique comme la distance à laquelle le semi-variogramme atteint 95% de la valeur de son palier.

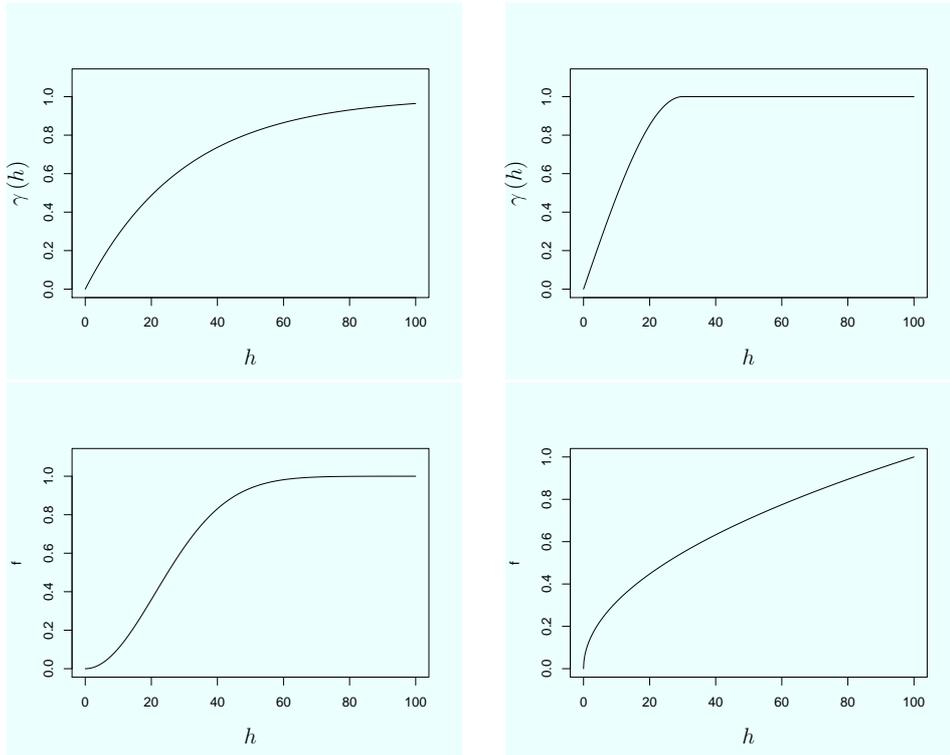


FIGURE 1.1 – Modèles de semi-variogramme. De haut en bas et de gauche à droite, exponentiel, sphérique et Gaussien de paramètres  $(1, 30)$  puis puissance de paramètres  $(c, r) = (0.1, 0.5)$ .

Il est possible d'introduire une discontinuité à l'origine dans le modèle de semi-variogramme appelé **effet pépîte**. Celui-ci caractérise une faible similarité entre des données spatialement proches qui peut être due par exemple à une erreur de mesure ou à une variation brutale à petite échelle du phénomène étudié.

La figure 1.2 résume les caractéristiques importantes d'un semi-variogramme.

### Estimation du semi-variogramme expérimental

Le semi-variogramme est obtenu empiriquement à partir des données. Son estimateur s'appuie sur le calcul de la variabilité spatiale pour tout couple de points de données en fonction de leur distance, c'est la nuée variographique (Fig. 1.3 à droite) qui s'écrit

$$\{(\|x_i - x_j\|_2, \frac{1}{2}(y(x_i) - y(x_j))^2), (i, j) \in \{1, \dots, k\}^2\},$$

où  $\|\cdot\|_2$  désigne la norme euclidienne.

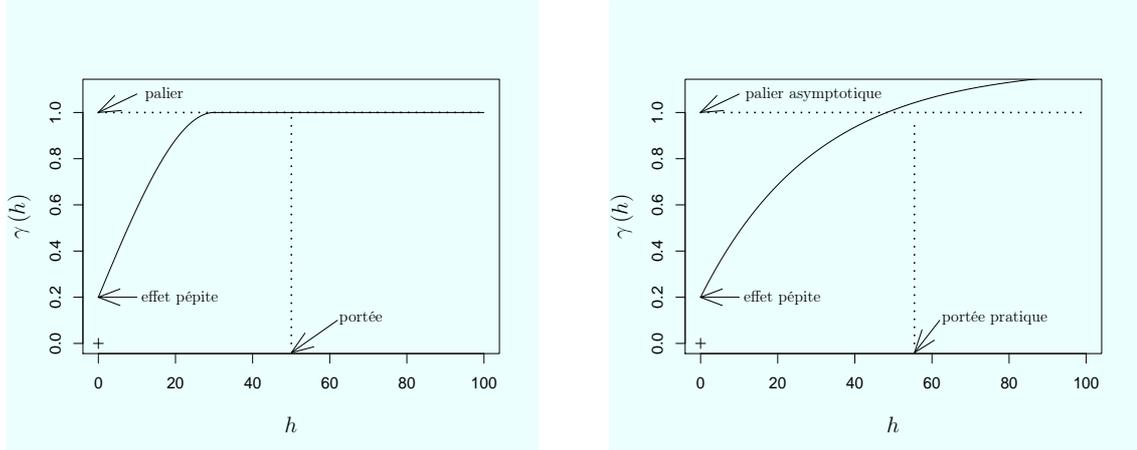


FIGURE 1.2 – Caractéristiques d'un semi-variogramme sur deux exemples.

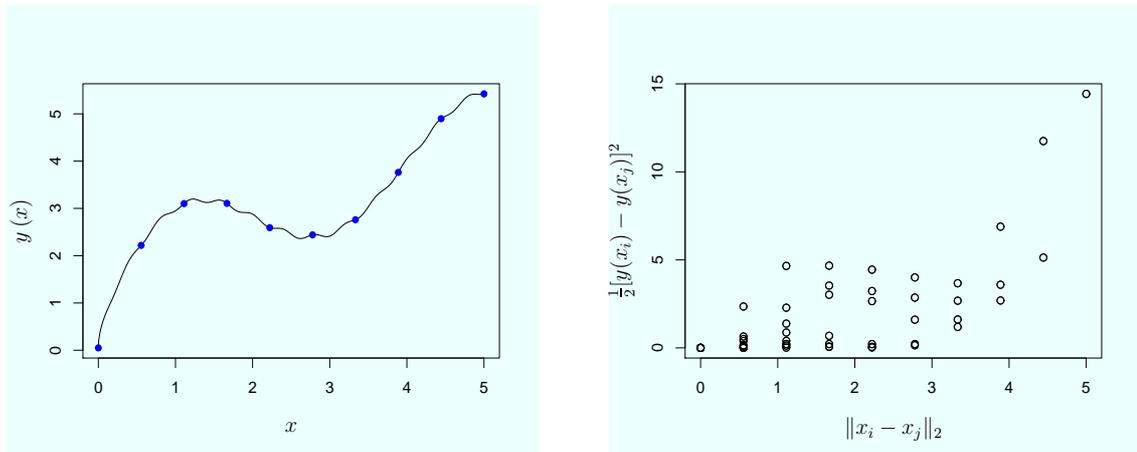


FIGURE 1.3 – A gauche, la fonction  $y(x) = \sin(\frac{1}{2}\pi x) + 2x^{1/2} + \frac{1}{20} \cos(5\pi x)$  ainsi que les 10 observations disponibles (en bleu), et à droite, la nuée variographique associée.

Celle-ci permet une première analyse exploratoire en mettant en évidence les valeurs anormales et l'hétérogénéité de l'échantillonnage mais elle reste difficile à modéliser en vue d'une intégration dans une procédure d'interpolation. En moyennant la nuée variographique pour chaque classe de distance, une estimation empirique du semi-variogramme  $\gamma(h)$ , appelée semi-variogramme expérimental (Fig. 1.4, à gauche), peut alors être définie comme suit :

$$\gamma_{exp}(h) = \frac{1}{2|N(h)|} \sum_{(m,n) \in N(h)} (y(x_m) - y(x_n))^2, \quad (1.7)$$

où  $N(h) = \{(m, n), h - \epsilon \leq \|x_m - x_n\|_2 \leq h + \epsilon\}$  et  $|N(h)|$  représente le cardinal de  $N(h)$ . Ce dernier doit être suffisamment grand pour garantir un

nombre de paires de points suffisant dans chaque classe (au moins 30 d'après Journel and Huijbregts, 1978) tout en étant représentatif en vue de l'interpolation par krigeage pour traduire la variabilité spatiale à petites distances. Pour ces deux raisons, nous limitons souvent la distance maximale à  $1/3$  ou  $1/2$  (Wackernagel, 1998) de la distance maximale entre deux points de données.

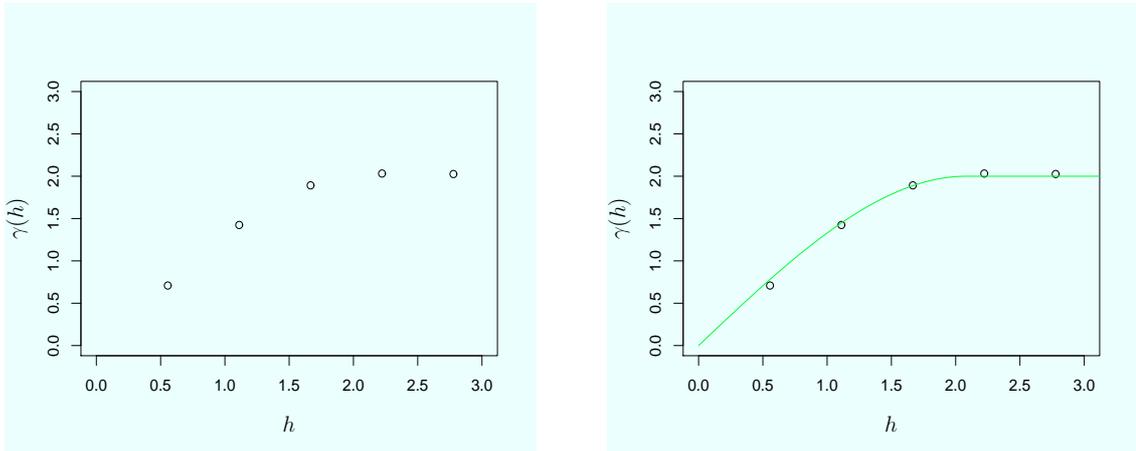


FIGURE 1.4 – Suite de l'exemple Fig.1.3. Sur les deux figures, le semi-variogramme expérimental construit à partir de 9 classes de distances et à droite, en vert, le semi-variogramme théorique choisi pour ce dernier. Le modèle adopté est un modèle Gaussien de paramètres  $(c, a) = (1, 1)$ .

### Modélisation du semi-variogramme

La dernière phase de l'analyse variographique consiste à ajuster sur le semi-variogramme expérimental, un modèle de semi-variogramme théorique. En pratique, nous testerons le plus souvent les modèles admissibles (1.3)-(1.6) ou des combinaisons linéaires de ces modèles.

Une fois le type de semi-variogramme sélectionné, l'estimation de ces paramètres se fait par moindres carrés en minimisant l'écart entre le semi-variogramme expérimental et théorique. Une façon simple de comparer plusieurs hypothèses sur le modèle de structure spatiale comme le type de semi-variogramme théorique choisi et ses paramètres estimés est d'effectuer une validation croisée. Son principe consiste à enlever tour à tour chaque observation et à la prédire à partir des observations restantes. Une erreur de prédiction peut alors être calculée en chaque point d'observation et donnera des indications sur l'adéquation entre le modèle et la structure empirique des observations.

### Remarque 1.1.2

L'identification de la structure spatiale via l'estimation d'un semi-variogramme est l'approche standard chez les ingénieurs qui font de l'analyse spatiale de données environnementales. La communauté travaillant sur les codes de calcul dont les réponses évoluent dans un espace de dimension souvent plus grande que 2, passe plutôt par le choix d'une fonction de covariance dont les paramètres sont estimés par la méthode du maximum de vraisemblance. En plus de la version covariance des modèles de semi-variogrammes rappelés, un modèle classique qui ressort dans les analyses est celui de Matern qui s'écrit :

$$C(h) = c \frac{1}{\Gamma(\nu)2^{\nu-1}} \left( \sqrt{2\nu} \frac{h}{a} \right)^\nu K_\nu \left( \sqrt{2\nu} \frac{h}{a} \right)$$

où  $\Gamma$  représente la fonction gamma et  $K_\nu$  la fonction de Bessel modifiée.

### Construction de l'estimateur de Krigeage

Le prédicteur du krigeage en un point  $x^*$ , noté  $\mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, Y^k)$ , est un estimateur linéaire sans biais (i.e.  $E\{\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, Y^k)\} = 0$ ) intégrant la structure spatiale des données et minimisant la variance d'estimation (ou variance de krigeage)

$$\sigma_{kg}^2(x^* | X^k, Y^k) = \text{var}(\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, Y^k)).$$

L'estimation par Krigeage possède trois propriétés importantes :

- Elle permet la prise en compte de la structure de corrélation spatiale des données fournie par la fonction de covariance ou le semi-variogramme.
- L'estimation fournit, en tout point du domaine d'étude, une valeur prédite mais également une estimation de l'erreur de prédiction via la variance de Krigeage. Cette variance d'estimation dépend du modèle de covariance (ou de semi-variogramme) et de la position des points d'observation, mais pas directement de la valeur des observations. Elle permet de quantifier l'incertitude liée à la prédiction.
- C'est une méthode d'interpolation exacte, ce qui signifie que la valeur prédite en un site d'observation est identique à la valeur observée et la variance de Krigeage est nulle en ce point.

Nous allons maintenant détailler la construction de l'estimateur pour les Krigeages simple et ordinaire.

### Krigeage Simple

Le terme de tendance constante dans l'expression (1.1) est supposé connu et le processus aléatoire  $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$  est supposé stationnaire du second ordre. L'estimateur du krigeage s'écrit alors :

$$\mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, Y^k) = m + \sum_{i=1}^k \lambda_i [y(x_i) - m]$$

La stationnarité du second ordre implique également l'existence de la variance de  $\mathcal{Y}(x)$  pour tout  $x \in \mathcal{D}$  et on a

$$\begin{aligned} \text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, Y^k)\} &= \text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - m - \sum_{i=1}^k \lambda_i [\mathcal{Y}(x_i) - m]\} \\ &= \text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - m\} + \text{var}\{\sum_{i=1}^k \lambda_i (\mathcal{Y}(x_i) - m)\} \\ &\quad - 2 \text{cov}\{\mathcal{Y}(x^*) - m, \sum_{i=1}^k \lambda_i (\mathcal{Y}(x_i) - m)\} \\ &= C(0) + \text{cov}\{\sum_{i=1}^k \lambda_i (\mathcal{Y}(x_i) - m), \sum_{j=1}^k \lambda_j (\mathcal{Y}(x_j) - m)\} \\ &\quad - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i \text{cov}\{\mathcal{Y}(x^*) - m, \mathcal{Y}(x_i) - m\} \\ &= C(0) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j C(\|x_i - x_j\|_2) \\ &\quad - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x^* - x_i\|_2) \end{aligned} \quad (1.8)$$

En introduisant  $\mathcal{F}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$  la fonction définie de  $\mathbb{R}^k$  dans  $\mathbb{R}$  par :

$$\mathcal{F}(\lambda_1, \dots, \lambda_k) = C(0) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j C(\|x_i - x_j\|_2) - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x^* - x_i\|_2),$$

la variance d'estimation est minimale lorsque le gradient de  $\mathcal{F}$  s'annule. Puisque pour tout  $l \in \{1, \dots, k\}$ ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda_l} \mathcal{F}(\lambda_1, \dots, \lambda_k) &= \frac{\partial}{\partial \lambda_l} [C(0) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j C(\|x_i - x_j\|_2) - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x^* - x_i\|_2)] \\ &= 0 + \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x_i - x_l\|_2) + \sum_{j=1}^k \lambda_j C(\|x_l - x_j\|_2) - 2 C(\|x^* - x_l\|_2) \\ &= 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x_i - x_l\|_2) - 2 C(\|x^* - x_l\|_2), \end{aligned}$$

le système d'équation du Krigeage simple se formule de la façon suivante :

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x_i - x_l\|_2) = C(\|x^* - x_l\|_2), \quad \forall l \in \{1, \dots, k\}, \quad (1.9)$$

ce qui revient à résoudre le système matriciel suivant :

$$\Sigma^{X^k} \Lambda^{X^k} (x^*) = \mathcal{C}^{X^k} (x^*) \quad (1.10)$$

où  $\Sigma^{X^k}$  est la matrice de covariance associée :

$$\Sigma^{X^k} = \begin{bmatrix} C(\|x_1 - x_1\|_2) & \cdots & C(\|x_1 - x_k\|_2) \\ C(\|x_2 - x_1\|_2) & \cdots & C(\|x_2 - x_k\|_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C(\|x_k - x_1\|_2) & \cdots & C(\|x_k - x_k\|_2) \end{bmatrix},$$

$\Lambda^{X^k}(x^*)$  est le vecteur des poids du Krigeage simple et  $\mathcal{C}^{X^k}(x^*)$  le vecteur de covariance entre les données et  $x^*$  :

$$\Lambda^{X^k}(x^*) = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_k \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{C}^{X^k}(x^*) = \begin{bmatrix} C(\|x^* - x_1\|_2) \\ C(\|x^* - x_2\|_2) \\ \dots \\ C(\|x^* - x_k\|_2) \end{bmatrix}.$$

L'estimateur de krigeage et la variance d'estimation s'écrivent :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, Y^k) &= m + (\mathcal{C}^{X^k}(x^*))^T (\Sigma^{X^k})^{-1} (Y^k - m\mathbb{1}) \\ \sigma_{kg}^2(x^* | X^k, Y^k) &= C(0) - (\mathcal{C}^{X^k}(x^*))^T (\Sigma^{X^k})^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \end{aligned}$$

où  $\mathbb{1}$  est le vecteur unité de taille  $k$ .

La figure 1.5 donne un exemple d'interpolation par Krigeage simple de la fonction monodimensionnelle :

$$f(x) = \sin\left(\frac{1}{2}\pi x\right) + 2x^{1/2} + \frac{1}{20} \cos(5\pi x)$$

Le plan d'expérience est uniforme à 6 points et une fonction de covariance sphérique de variance 2 et de portée 2.5 a été identifiée.

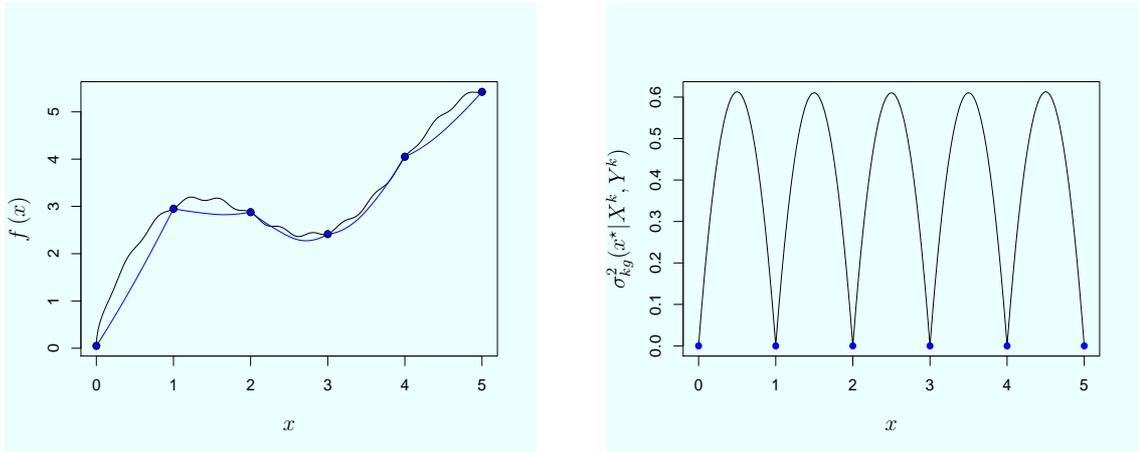


FIGURE 1.5 – Exemple de Krigeage simple sur la fonction  $f(x) = \sin(\frac{1}{2}\pi x) + 2x^{1/2} + \frac{1}{20} \cos(5\pi x)$ , avec une covariance sphérique de paramètres  $(c, a) = (2, 2.5)$ . À gauche, la fonction (en noir), les données (points bleus) et la prédiction par Krigeage simple (en bleu). À droite, les sites d'observation (points bleus) et la variance de Krigeage obtenue.

Nous retrouvons ici les principales propriétés du Krigeage. En tout site d'observation, la prédiction par Krigeage a la même valeur que la mesure observée (qui dans ce cas représente la valeur de la fonction  $f$ ). De plus, la variance de Krigeage s'annule aux points du plan d'expériences. Ces deux points proviennent du caractère exact du Krigeage.

## Extension au Krigeage Ordinaire

Le terme de tendance constante dans l'expression (1.1) est supposé ici inconnu et dans sa forme la plus générale, le processus aléatoire  $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$  est supposé stationnaire intrinsèque. L'estimateur du krigeage s'écrit alors :

$$\mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, Y^k) = \sum_{i=1}^k \lambda_i y(x_i). \quad (1.11)$$

La condition de non-biais est satisfaite si et seulement si  $\sum_{i=1}^k \lambda_i = 1$ . L'existence de l'espérance de l'erreur d'estimation est également assurée par cette contrainte.

En effectuant un calcul similaire à celui du krigeage simple, la variance d'estimation s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | \{x_i\}, \{y(x_i)\})\} &= - \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j \gamma(\|x_i - x_j\|_2) \\ &\quad + 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i \gamma(\|x_i - x^*\|_2) \end{aligned} \quad (1.12)$$

Pour minimiser la variance d'estimation sous la condition de non-biais, un Lagrangien de la forme suivante est introduit :

$$\begin{aligned} L(\lambda_1, \dots, \lambda_k, \mu) &= - \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j \gamma(\|x_i - x_j\|_2) + 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i \gamma(\|x_i - x^*\|_2) \\ &\quad - 2\mu \left( \sum_{i=1}^k \lambda_i - 1 \right) \end{aligned} \quad (1.13)$$

où  $\mu$  représente un multiplicateur de Lagrange. La variance d'estimation est minimale lorsque toutes les dérivées partielles s'annulent et nous aboutissons au système de Krigeage ordinaire suivant :

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^k \lambda_j \gamma(\|x_i - x_j\|_2) + \mu = \gamma(\|x_i - x^*\|_2), & \forall i \in \{1, \dots, k\} \\ \sum_{j=1}^k \lambda_j = 1. \end{cases}$$

qui s'écrit :

$$\begin{bmatrix} \gamma(\|x_1 - x_1\|_2) & \dots & \gamma(\|x_1 - x_k\|_2) & 1 \\ \gamma(\|x_2 - x_1\|_2) & \dots & \gamma(\|x_2 - x_k\|_2) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & 1 \\ \gamma(\|x_k - x_1\|_2) & \dots & \gamma(\|x_k - x_k\|_2) & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \lambda_k \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(\|x^* - x_1\|_2) \\ \gamma(\|x^* - x_2\|_2) \\ \dots \\ \gamma(\|x^* - x_k\|_2) \\ 1 \end{bmatrix},$$

Dans le cas de processus stationnaires d'ordre 2 qui correspondent au cadre des travaux de cette thèse, le système matriciel précédent peut se reformuler en introduisant la covariance au lieu du semi-variogramme. Plus précisément, puisque  $\gamma(h) = C(0) - C(h)$  et  $\sum_{j=1}^k \lambda_j = 1$ , l'expression (1.12) devient :

$$\begin{aligned} \text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | \{x_i\}, \{y(x_i)\})\} &= C(0) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j C(\|x_i - x_j\|_2) \\ &\quad - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x_i - x^*\|_2) \end{aligned} \quad (1.14)$$

et le Lagrangien (1.13) s'écrit

$$\begin{aligned} L(\lambda_1, \dots, \lambda_k, \mu) &= C(0) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j C(\|x_i - x_j\|_2) - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x_i - x^*\|_2) \\ &\quad - 2\mu \left( \sum_{i=1}^k \lambda_i - 1 \right) \end{aligned} \quad (1.15)$$

Avec les mêmes notations que pour le Krigeage simple, la minimisation du Lagrangien conduit alors à l'équation matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} \Sigma^{X^k} & \mathbb{1} \\ \mathbb{1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda^{X^k}(x^*) \\ -\mu^{X^k}(x^*) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (1.16)$$

où  $\mu^{X^k}(x^*)$  désigne le multiplicateur de Lagrange associé au plan d'expériences  $X^k$ . La matrice du membre de gauche étant symétrique, son inverse s'obtient de façon analytique sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \Sigma^{X^k} & \mathbb{1} \\ \mathbb{1}^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} (\Sigma^{X^k})^{-1} \left( I + \mathbb{1} S^{-1} \mathbb{1}^T (\Sigma^{X^k})^{-1} \right) & -(\Sigma^{X^k})^{-1} \mathbb{1} S^{-1} \\ -S^{-1} \mathbb{1}^T (\Sigma^{X^k})^{-1} & S^{-1} \end{bmatrix}$$

où  $I$  est la matrice identité de taille  $k \times k$  et  $S$  est le complément de Schur qui s'écrit  $S^{-1} = -\mathbb{1}^T (\Sigma^{X^k})^{-1} \mathbb{1}$ . D'après (1.16), il vient alors :

$$\begin{aligned} \Lambda^{X^k}(x^*) &= (\Sigma^{X^k})^{-1} \left( I + \mathbb{1} S^{-1} \mathbb{1}^T (\Sigma^{X^k})^{-1} \right) \mathcal{C}^{X^k}(x^*) - (\Sigma^{X^k})^{-1} \mathbb{1} S^{-1} \\ \mu^{X^k}(x^*) &= S^{-1} \mathbb{1}^T (\Sigma^{X^k})^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*) - S^{-1} \end{aligned}$$

Puisque  $\Lambda^{X^k}(x^*)$  peut s'écrire  $\Lambda^{X^k}(x^*) = \left(\Sigma^{X^k}\right)^{-1} \left(\mathcal{C}^{X^k}(x^*) + \mathbb{1}\mu^{X^k}(x^*)\right)$ , on trouve finalement en utilisant l'expression de  $S$  :

$$\Lambda^{X^k}(x^*) = \left(\Sigma^{X^k}\right)^{-1} \left(\mathcal{C}^{X^k}(x^*) + \mathbb{1} \frac{1 - \mathbb{1}^T \left(\Sigma^{X^k}\right)^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)}{\mathbb{1}^T \left(\Sigma^{X^k}\right)^{-1} \mathbb{1}}\right) \quad (1.17)$$

$$\mu^{X^k}(x^*) = \frac{1 - \mathbb{1}^T \left(\Sigma^{X^k}\right)^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)}{\mathbb{1}^T \left(\Sigma^{X^k}\right)^{-1} \mathbb{1}}. \quad (1.18)$$

L'expression de l'estimateur s'obtient alors en combinant (1.11) et (1.17). Concernant la variance d'estimation, l'expression (1.14) peut s'écrire comme suit :

$$\begin{aligned} \text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^*|\{x_i\}, \{y(x_i)\})\} &= C(0) + \sum_{i=1}^k \lambda_i \left(C(\|x_i - x^*\|_2) + \mu^{X^k}(x^*)\right) \\ &\quad - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x_i - x^*\|_2), \end{aligned}$$

ce qui conduit à :

$$\text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^*|\{x_i\}, \{y(x_i)\})\} = C(0) - \left(\Lambda^{X^k}(x^*)\right)^T \mathcal{C}^{X^k}(x^*) + \mu^{X^k}(x^*).$$

où  $\Lambda^{X^k}(x^*)$  et  $\mu^{X^k}(x^*)$  sont fournis par (1.17) et (1.18).

### Remarque 1.1.3

*La construction rappelée dans cette section peut être étendue au cas de données entachées d'incertitudes. Dans ce cas, les observations sont supposées être issues d'un processus aléatoire de la forme  $\tilde{\mathcal{Y}}(x) = \mathcal{Y}(x) + \epsilon(x)$  où  $\epsilon(x)$  représente un terme d'erreur satisfaisant*

- 1)  $\text{var}\{\epsilon(x_i)\} = \sigma_i^2$  et  $E\{\epsilon(x_i)\} = 0$ ,  $\forall i$ ,
- 2)  $\text{cov}(\epsilon(x_i), \epsilon(x_j)) = 0$ ,  $\forall i \neq j$ ,
- 3)  $\text{cov}(\epsilon(x_i), \mathcal{Y}(x)) = 0$ ,  $\forall i$  et  $\forall x$ .

*Nous parlons alors de krigage avec variance d'erreur ou erreur non systématique (Goovaerts (1997), Chiles and Delfiner (1999)) et l'estimateur associé s'exprime comme une combinaison linéaire des données incertaines :*

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | X^k, \tilde{Y}^k) &= \sum_{i=1}^k \lambda_i \tilde{y}(x_i), \\
&= \sum_{i=1}^k \lambda_i (y(x_i) + \epsilon(x_i)),
\end{aligned}$$

En utilisant les hypothèses d'indépendance entre les erreurs et entre les erreurs et les vraies données, la variance d'estimation s'écrit ici :

$$\begin{aligned}
\text{var}\{\mathcal{Y}(x^*) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x^* | \{x_i\}, \{\tilde{y}(x_i)\})\} &= C(0) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \lambda_i \lambda_j C(\|x_i - x_j\|_2) \\
&\quad - 2 \sum_{i=1}^k \lambda_i C(\|x_i - x^*\|_2) + \sum_{i=1}^k \lambda_i^2 \sigma_i^2.
\end{aligned} \tag{1.19}$$

Notons que l'intégration d'un terme d'erreur ne fait que rajouter un terme supplémentaire dans la variance d'estimation du krigeage ordinaire (Expression (1.14)).

La minimisation de (1.19) sous la contrainte de non biais fournit les poids de krigeage en résolvant un système matriciel de type (1.16) où  $\Sigma^{X^k}$  est remplacée par  $\Sigma^{X^k} + C_0$  avec  $C_0$  la matrice diagonale telle que  $\forall i \in \{1, \dots, k\}$ ,  $(C_0)_{ii} = \sigma_i^2$ . Cela conduit à une reconstruction non interpolante.

De plus, d'après l'expression de la variance d'estimation, les poids du krigeage peuvent être interprétés comme solutions du problème de minimisation suivant :

$$\begin{cases} \min_{\Lambda \in \mathbb{R}^k} \left( \frac{1}{2} \langle \Sigma^{X^k} \Lambda, \Lambda \rangle_2 + \frac{1}{2} \langle C_0 \Lambda, \Lambda \rangle_2 - \langle \mathcal{C}^{X^k}(x^*), \Lambda \rangle_2 \right), \\ \langle \Lambda, \mathbb{1} \rangle_2 = 1, \end{cases} \tag{1.20}$$

où  $\langle \cdot \rangle_2$  désigne le produit scalaire euclidien. L'intégration d'une erreur dans la modélisation revient donc à rajouter  $\frac{1}{2} \langle C_0 \Lambda, \Lambda \rangle_2$  dans le problème de minimisation. Ce terme peut s'interpréter comme un terme de pénalisation des oscillations des coefficients de  $\Lambda$ . L'ajout d'une erreur définit donc une procédure de régularisation du problème de krigeage. Par sa forme diagonale,  $C_0$  est même à rapprocher d'une matrice de régularisation associée à la méthode classique de Tikhonov (Tikhonov and Arsenin, 1977). Cet éclairage déterministe sur le krigeage avec variance d'erreur sera largement analysé et exploité au chapitre suivant.

#### Remarque 1.1.4

Le Krigeage peut être utilisé pour estimer les dérivées de tout ordre du processus aléatoire étudié. La construction du prédicteur s'appuie sur la théorie des fonctions aléatoires intrinsèques (Matheron, 1973) et n'est rappelée ici que dans le cas de l'estimation de la dérivée première d'un processus stationnaire intrinsèque. Plus de détails peuvent être trouvés dans Vazquez and Walter (2005).

Comme pour le krigeage ordinaire, l'estimateur s'écrit comme une combinaison linéaire des données :

$$\mathcal{P}(\mathcal{Y}^{(1)}, x^* | X^k, Y^k) = \Lambda^{X^k}(x^*)^T Y^k$$

et doit respecter les conditions de non-biais et de minimisation de la variance d'estimation. Cela conduit à la résolution du système matriciel suivant :

$$\begin{bmatrix} \Sigma^{X^k} & \mathbb{1} \\ \mathbb{1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda^{X^k}(x^*) \\ -\mu^{X^k}(x^*) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}^{X^k(1)}(x^*) \\ 0 \end{bmatrix}.$$

où  $\mathcal{C}^{X^k(1)}(x^*)$  est le vecteur défini  $\forall i \in \{1, \dots, k\}$  par  $\left(\mathcal{C}^{X^k(1)}(x^*)\right)_i = C^{(1)}(\|x^* - x_i\|_2)$  avec  $\forall h \geq 0$ ,  $C^{(1)}(h) = \frac{dC}{dh}(h)$ .

L'estimateur et la variance de Krigeage s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathcal{Y}^{(1)}, x^* | X^k, Y^k) &= \left( \mathcal{C}^{X^k(1)}(x^*)^T + \mathbb{1} \mu^{X^k}(x^*) \right) \left( \Sigma^{X^k} \right)^{-1} Y^k \\ \sigma_{kg}^2(\mathcal{Y}^{(1)}, x^* | X^k, Y^k) &= -C^{(2)}(0) - \Lambda^{X^k}(x^*)^T \mathcal{C}^{X^k(1)}(x^*). \end{aligned}$$

La figure 1.6 donne un exemple de Krigeage de la dérivée première de la fonction monodimensionnelle  $f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [0; 3[ \\ 2 & \text{si } x \in [3; 7[ \\ 3 & \text{si } x \in [7; 10] \end{cases}$  à partir d'un plan d'expériences à 6 points. La valeur absolue de cette dérivée estimée apparaît alors comme un bon indicateur des zones de fortes variations de la fonction et sera utilisée dans le chapitre suivant pour faire du raffinement local de plans d'expériences.

### 1.1.2 Simulations séquentielles Gaussiennes

Les méthodes de krigeage fournissent une estimation en tout point du phénomène étudié. Cependant, l'estimateur de krigeage a tendance à conduire à une reconstruction plus lisse que le phénomène réel. De plus, chaque prédiction est entachée d'une erreur d'estimation qui peut limiter la confiance dans les valeurs obtenues. Afin de capturer des détails locaux et de prendre

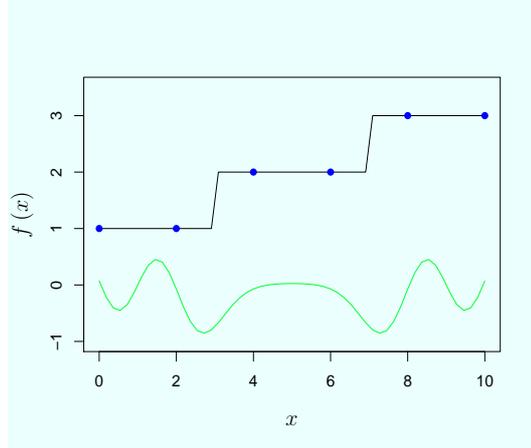


FIGURE 1.6 – Exemple d’estimation de la dérivée sur la fonction  $f$  qui vaut 1 sur  $[0; 3[$ , 2 sur  $[3; 7[$  et 3 sur  $[7; 10]$ . La fonction est en noir et les 6 observations sont les points bleus. En vert est représentée l’estimation de la dérivée de  $f$  obtenue par un Krigeage ordinaire sur les dérivées.

en compte l’incertitude sur les résultats, l’analyste a recours aux simulations géostatistiques (Goovaerts, 1997) pour générer des représentations alternatives de la réalité unique mais inconnue. Nous introduirons alors l’ensemble  $\{y^\alpha(u_l), l = 1, \dots, L, \alpha = 1, \dots, M\}$  des  $M$  simulations du processus  $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$  sur la grille  $\{u_l\}_{l=1, \dots, L}$ . Celui-ci pourra être utilisé pour évaluer une probabilité de dépassement d’un seuil de danger ou pour faire de la propagation d’incertitudes à travers un code de calcul par exemple.

Il existe de nombreuses façons de générer ces représentations alternatives. Ici, nous nous concentrons sur l’une des plus classiques utilisées en géostatistiques basée sur des simulations conditionnelles séquentielles. Une simulation se fait en deux étapes :

### Algorithme 1.1.1

- 1) Générer un chemin aléatoire  $\{u_l^\alpha\}_{l=1, \dots, L}$  permettant de visiter chacun des  $L$  points de la grille de simulation.
- 2) Pour chaque point  $u_l^\alpha$  ( $l = 1, \dots, L$ ), attribuer une valeur simulée de la variable aléatoire  $\mathcal{Y}(u_l^\alpha)$  en prenant en compte les  $k$  observations d’origine ainsi que les  $(l-1)$  points déjà simulés. Plus précisément, en introduisant  $Y_\alpha^{k+l-1} = \{y(x_i)\}_{i=1, \dots, k} \cup \{y^\alpha(u_i^\alpha)\}_{i=1, \dots, l-1}$ .  $y^\alpha(u_l^\alpha)$  s’obtient par la procédure suivante :
  - Modéliser la loi de probabilité conditionnelle de la variable aléatoire  $\mathcal{Y}(u_l^\alpha)$

$$F_{\mathcal{Y}(u_l^\alpha)}(t|Y^{k+l-1}) = P\{\mathcal{Y}(u_l^\alpha) \leq t|Y^{k+l-1}\}$$

- où  $P$  désigne la probabilité mathématique.
- Tirer aléatoirement, à partir de la fonction de répartition de  $\mathcal{Y}(u_l^\alpha)$ , une réalisation  $y^\alpha(u_l^\alpha)$ .

Cet algorithme est répété autant de fois que nous voulons de réalisations (ici  $M$  fois).

Pour faire une simulation séquentielle, il est nécessaire de déterminer la fonction de répartition conditionnelle pour chaque point de la grille de simulation. Dans le cas de processus gaussiens, son identification se fera à partir de la moyenne et de la variance de krigeage. C'est ce qui est détaillé dans la suite.

### Simulations séquentielles Gaussiennes

Comme dans le cas général, une simulation Gaussienne séquentielle se fait en deux étapes : la génération du chemin aléatoire à parcourir et l'attribution d'une valeur simulée en tout point de la grille de simulation. La première étape reste la même que dans le cas d'une simulation séquentielle non Gaussienne. En revanche la procédure pour obtenir  $y^\alpha(u_l^\alpha)$  dans la seconde étape de l'algorithme 1.1.1 est modifiée. L'algorithme de simulation séquentielle Gaussienne s'écrit :

#### **Algorithme 1.1.2**

- 1) Générer un chemin aléatoire  $\{u_l^\alpha\}_{l=1,\dots,L}$  permettant de visiter chacun des  $L$  points de la grille de simulation.
- 2) Pour chaque point  $u_l^\alpha$  ( $l = 1, \dots, L$ ), attribuer une valeur simulée de la variable aléatoire  $\mathcal{Y}(u_l^\alpha)$  en prenant en compte les  $k$  observations d'origine ainsi que les  $(l-1)$  points déjà simulés. Plus précisément, en introduisant  $Y_\alpha^{k+l-1} = \{y(x_i)\}_{i=1,\dots,k} \cup \{y^\alpha(u_i^\alpha)\}_{i=1,\dots,l-1}$ .  $y^\alpha(u_l^\alpha)$  s'obtient par la procédure suivante :
  - Calculer par Krigeage simple  $\mathcal{P}(\mathcal{Y}, u_l^\alpha | Y^{k+l-1})$  et la variance d'estimation  $\sigma_{kg}^2(u_l^\alpha | Y^{k+l-1})$  en prenant en compte les points déjà simulés.
  - Modéliser la loi de probabilité de  $\mathcal{Y}(u_l^\alpha)$  par une loi normale de moyenne  $\mathcal{P}(\mathcal{Y}, u_l^\alpha | Y^{k+l-1})$  et de variance  $\sigma_{kg}^2(u_l^\alpha | Y^{k+l-1})$ .
  - Tirer aléatoirement, à partir de la fonction de répartition de  $\mathcal{Y}(u_l^\alpha)$ , une réalisation  $y^\alpha(u_l^\alpha)$ .

La figure 1.7 compare les résultats issus d'un Krigeage simple et de simulations Gaussiennes séquentielles pour une fonction mono-dimensionnelle et un plan d'expériences uniforme à 6 points. Nous pouvons noter la perte de régularité des trajectoires par rapport au Krigeage simple. De plus, les trois

simulations sont très différentes les unes des autres ce qui illustre l'effet de la prise en compte des incertitudes.

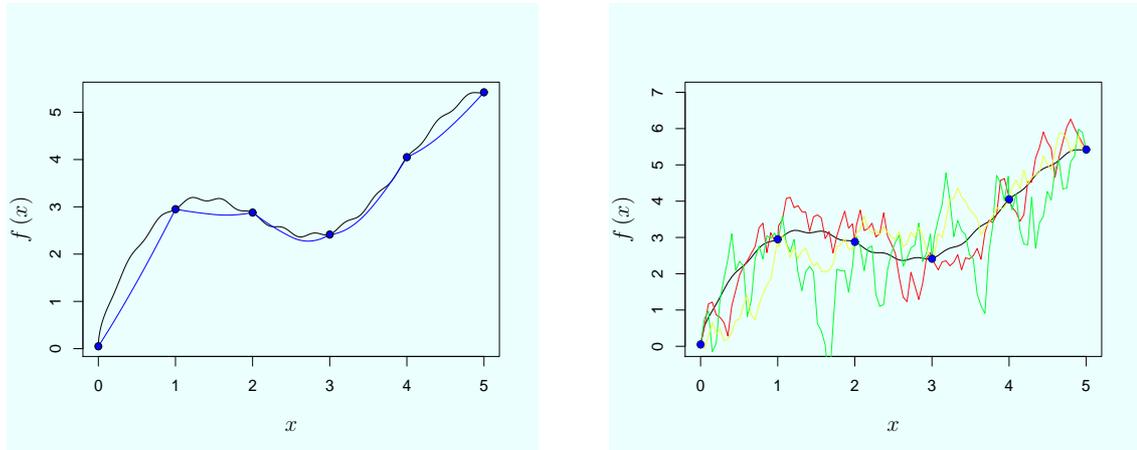


FIGURE 1.7 – Exemple de simulation Gaussienne séquentielle sur la fonction  $f(x) = \sin(\frac{1}{2}\pi x) + 2x^{1/2} + \frac{1}{20} \cos(5\pi x)$ . La fonction est en noir et les données sont les points bleus. A gauche, la prédiction (en bleu) obtenue par un Krigeage simple avec une covariance sphérique de paramètres  $(c, a) = (2, 2.5)$ . A droite, trois simulations Gaussiennes séquentielles (en vert, jaune et rouge) faites sur une grille de simulation uniforme à 100 points.

### 1.1.3 Conditionnement des matrices de Krigeage

Comme cela a été vu dans les sections précédentes, interpoler par Krigeage ou réaliser des simulations conditionnelles revient à résoudre un ou plusieurs systèmes matriciels. Ces derniers en fonction du modèle de semi-variogramme et des observations disponibles peuvent très vite devenir difficile à résoudre numériquement. D'un point de vue mathématique, ceci est dû au mauvais conditionnement des matrices de Krigeage quand le nombre de points d'observations augmente. Cette section est donc dédiée à quelques rappels sur la notion de conditionnement et sur quelques résultats relatifs aux matrices de krigeage.

#### Conditionnement

Le conditionnement permet de mesurer la dépendance de la solution d'un système numérique par rapport aux données. Soit un système linéaire  $Ax = b$  à résoudre. Si  $A$  est mal conditionnée, alors une petite variation sur  $b$  entraîne une grande variation sur  $x$ .

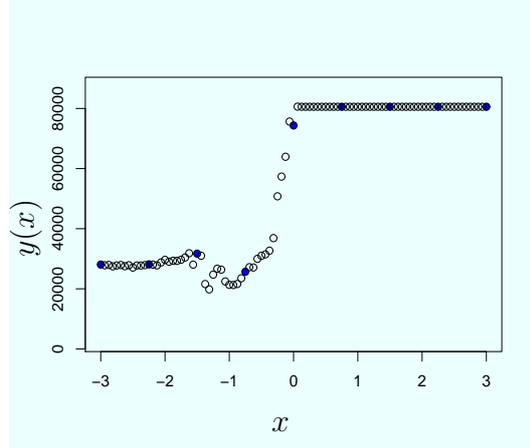


FIGURE 1.8 – Plan d’expériences uniforme à 9 points (en bleu) et une grille de simulation uniforme à 97 points (en noir).

Le conditionnement est défini de la façon suivante :

**Définition 1.1.3 Conditionnement d’une matrice :**

Soit  $A$  une matrice inversible  $N \times N$  et  $\|\cdot\|_p$  une norme subordonnée. Le conditionnement de  $A$  associé à la norme précédente, est défini par la formule :

$$\text{Cond}(A) = \|A\|_p \cdot \|A^{-1}\|_p$$

Le conditionnement dépend de la norme choisie, cependant, celle-ci étant supposée subordonnée nous avons  $\text{Cond}(A) \geq 1$ .

Dans le cas de matrices ayant un conditionnement élevé, on a recours à la construction d’un préconditionneur.

**Définition 1.1.4 Préconditionneur**

Soit  $A$  une matrice inversible  $N \times N$ , on appelle préconditionneur une matrice  $K$  de taille  $N \times N$  telle que  $\text{Cond}(KAK)$  est indépendant de  $N$ .

Pour la suite, nous nous concentrerons sur le conditionnement associé à deux normes particulières ; le conditionnement de Frobenius et le conditionnement spectral.

**Définition 1.1.5 Conditionnement de Frobenius :**

Soit  $A$  une matrice  $N \times N$  et  $\{\mathcal{L}_k\}_{k=1,\dots,N}$  l’ensemble de ses valeurs propres. La norme de Frobenius de  $A$  s’écrit :

$$\|A\|_F = \sqrt{\text{Tr}(A^T A)}.$$

Si, de plus,  $A$  est symétrique positive, alors il existe une matrice orthogonale  $Q$  (c'est-à-dire  $Q^T Q = Q Q^T = I$ ) telle que  $Q^T A Q = \Lambda_A$ , avec  $\Lambda_A = \text{diag}[\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_N]$ . Dans ce cas, la norme de Frobenius de  $A^{1/2}$  devient :

$$\|A^{1/2}\|_F = \sqrt{\text{Tr}(A)}$$

Si  $A$  est symétrique positive, alors le conditionnement de Frobenius de la matrice  $A^{1/2}$  vaut :

$$\text{Cond}_F(A^{1/2}) = \|A^{1/2}\|_F \cdot \|A^{-1/2}\|_F \quad (1.21)$$

$$= \sqrt{\text{Tr}(A) \text{Tr}((A)^{-1})}. \quad (1.22)$$

Ce résultat est très important puisque les matrices de Krigeage sont des matrices de covariance et sont par conséquent symétriques positives.

**Définition 1.1.6 Conditionnement spectral :**

Soit  $A$  une matrice  $N \times N$  et  $\{\mu_k\}_{k=1, \dots, N}$  (resp.  $\{\mathcal{L}_k\}_{k=1, \dots, N}$ ) l'ensemble de ses valeurs singulières (resp. propres), la norme spectrale de  $A$  est définie par :

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^* A)},$$

où  $A^*$  représente la matrice adjointe de  $A$  et  $\rho(A)$  la plus grande valeur propre de  $A$ .

Le conditionnement spectral s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \text{Cond}_2(A) &= \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 \\ &= \frac{\max_{k \in \{1, \dots, N\}} \mu_k}{\min_{k \in \{1, \dots, N\}} \mu_k} \end{aligned} \quad (1.23)$$

Dans le cas où  $A$  est une matrice symétrique, le conditionnement spectral devient :

$$\text{Cond}_2(A) = \frac{\max_{k \in \{1, \dots, N\}} |\mathcal{L}_k|}{\min_{k \in \{1, \dots, N\}} |\mathcal{L}_k|}$$

**Quelques résultats relatifs aux matrices de Krigeage**

Il existe beaucoup de travaux sur le comportement du conditionnement des matrices de krigeage. Dans Posa (1989) et O'Dowd (1991), la sensibilité du conditionnement spectral au choix du modèle de semi-variogramme et à ses paramètres est étudiée numériquement dans le cas de grilles uniformes. Nous pouvons également trouver des estimations théoriques du conditionnement dans Ababou et al. (1994) mais toujours limitées à des grilles uniformes.

Puisque la matrice de Krigeage est au moins aussi mal conditionnée que la matrice de covariance  $\Sigma^{X^k}$  (O'Dowd, 1991), les auteurs se focalisent sur le conditionnement de la matrice de covariance. Dans le cas mono-dimensionnel, cette matrice (comme celle de Krigeage) possède une structure dite Toeplitz, c'est à dire de la forme :

$$T = \begin{bmatrix} t_0 & t_{-1} & t_{-2} & \cdots & t_{-(n-1)} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & & \\ t_2 & t_1 & t_0 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \\ t_{n-1} & & \cdots & & t_0 \end{bmatrix}$$

En exploitant le lien asymptotique (quand le pas de la grille de discrétisation tend vers 0) entre matrices Toeplitz et circulantes détaillé dans Gray (2006), ils montrent que, pour une certaine classe de fonctions de covariance (rappelée dans la proposition 1.1.1), le conditionnement s'exprime en fonction de la transformée de Fourier de la covariance. Plus précisément, si la transformée de Fourier se définit comme suit

**Définition 1.1.7**

Pour toute fonction  $U \in L^1_{loc}(\mathbb{R})$  on note  $\hat{U}(\omega) = \int U(x)e^{-2i\pi\omega x} dx$  la transformée de Fourier de  $U$ .

alors on a :

**Proposition 1.1.1**

Soit un domaine  $\mathcal{D}$  de longueur  $L_{\mathcal{D}}$  discrétisé uniformément avec un pas  $\Delta x$ . Si la fonction de covariance  $C$  associée aux observations admet une transformée de Fourier monotone, alors le conditionnement de la matrice de covariance notée  $\Sigma$  satisfait :

$$Cond_2(\Sigma) \sim_{L_{\mathcal{D}} \rightarrow +\infty, \Delta x \rightarrow 0} \frac{K}{\hat{C}(\frac{1}{\Delta x})}$$

où  $K$  est une constante.

Dans le cas d'une covariance Gaussienne (resp. exponentielle) obtenue à partir de l'expression (1.3) (resp 1.4) et de paramètres (1, 1), la proposition précédente, après un calcul de transformée de Fourier, montre que le conditionnement de la matrice de covariance est proportionnel à  $e^{\frac{1}{\Delta x^2}}$  (resp.  $\frac{1}{\Delta x^2}$ ), ce qui explique que les matrices de Krigeage deviennent très vite mal conditionnées quand le nombre de points augmentent. La détérioration est plus rapide pour une covariance Gaussienne comme le montre la Figure 1.9.

Nous terminons ce chapitre en faisant un bref rappel sur les techniques de planification d'expériences dépendant d'un modèle en supposant qu'une modélisation de type krigeage, notée  $\mathcal{M}$ , a été choisie.

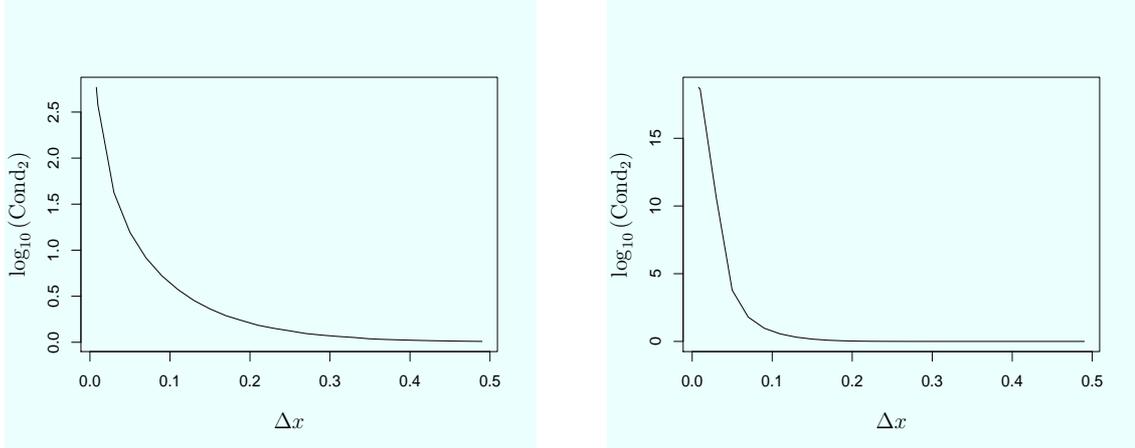


FIGURE 1.9 – Logarithme en base 10 du conditionnement spectral des matrices de covariance en fonction du pas de discrétisation. La grille de discrétisation est uniforme. A gauche, la covariance est exponentielle de paramètres  $(1, 0.1)$  et à droite, la covariance est Gaussienne de paramètres  $(1, 0.1)$ .

## 1.2 Plan d'expériences dépendant d'un modèle

Ce type de plans d'expériences nécessite d'abord d'estimer le modèle de Krigeage sur un premier plan grossier puis de rajouter des observations pour obtenir une meilleure prédiction au sens d'un certain critère d'amélioration (Figure 1.10).

### 1.2.1 Algorithmes de construction

En se fixant un modèle  $\mathcal{M}$ , deux procédures sont envisageables. La première est non-itérative et dans ce cas tous les nouveaux points sont ajoutés en une seule fois en utilisant les informations disponibles sur le plan d'expériences initial :

#### Algorithme 1.2.1

*A partir du plan d'expériences  $X^{k_0}$ , collecter les observations  $Y^{k_0}$  mesurées en  $X^{k_0}$ ,*

*Trouver l'ensemble des nouveaux points  $X^* = (x_1^*, \dots, x_{N-k_0}^*)$  qui optimise le critère  $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}(X^*, X^{k_0}, Y^{k_0})$ ,*

*Evaluer l'ensemble des nouvelles observations  $Y^*$  en chacun des sites de  $X^*$ ,  
Mettre à jour le plan d'expériences,  $X^N = X^{k_0} \cup X^*$  et le jeu de données  $Y^N = Y^{k_0} \cup Y^*$ .*

La construction peut également être itérative. Les nouveaux points sont alors ajoutés les uns après les autres permettant ainsi la prise en compte de toute l'information disponible sur les observations déjà réalisées pour déterminer les nouveaux points d'observation :

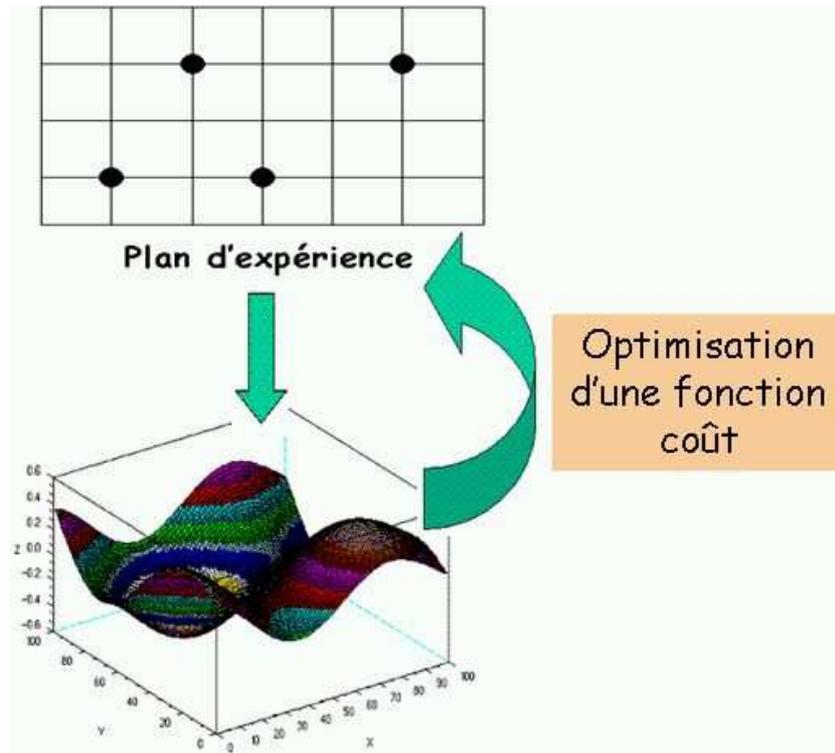


FIGURE 1.10 – Procédure de construction d'un plan d'expériences dépendant d'un modèle.

### Algorithme 1.2.2

A partir du plan d'expériences  $X^{k_0}$ , collecter les observations  $Y^{k_0}$  mesurées en  $X^{k_0}$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pour } k = k_0 \dots N, \\ \text{Trouver le nouveau point } x^* \text{ qui optimise le critère } \mathcal{C}_{\mathcal{M}}(x^*, X^k, Y^k), \\ \text{Evaluer la nouvelle observation } y^* \text{ en } x^*, \\ \text{Mettre à jour le plan d'expériences, } X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\} \text{ et le jeu de} \\ \text{données } Y^{k+1} = Y^k \cup \{y^*\}. \end{array} \right.$$

L'efficacité de la procédure de planification dépend clairement du critère à optimiser. Dans la section suivante, nous en rappelons deux qui sont des choix classiques quand la modélisation s'appuie sur le Krigeage.

### 1.2.2 Choix du critère $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}$

Dans le cas du Krigeage, l'idée la plus intuitive est de se servir de la variance d'estimation notée MSE, pour Mean Square Error, fournie par le

modèle. Deux critères sont alors envisagés :

- la **MSE** qui va être maximisée.

$$\text{MSE}^{X^k}(x) = \text{E}\{\mathcal{Y}(x) - \mathcal{P}(\mathcal{Y}, x|X^k, Y^k)\}^2 \quad (1.24)$$

Ce critère conduit à inclure dans le plan d'expériences le point pour lequel l'incertitude est la plus élevée. Il permet de détecter les zones sous-échantillonnées du domaine comme le montre la figure 1.11 puisque la variance d'estimation croît à mesure que l'on s'éloigne des points d'observation.

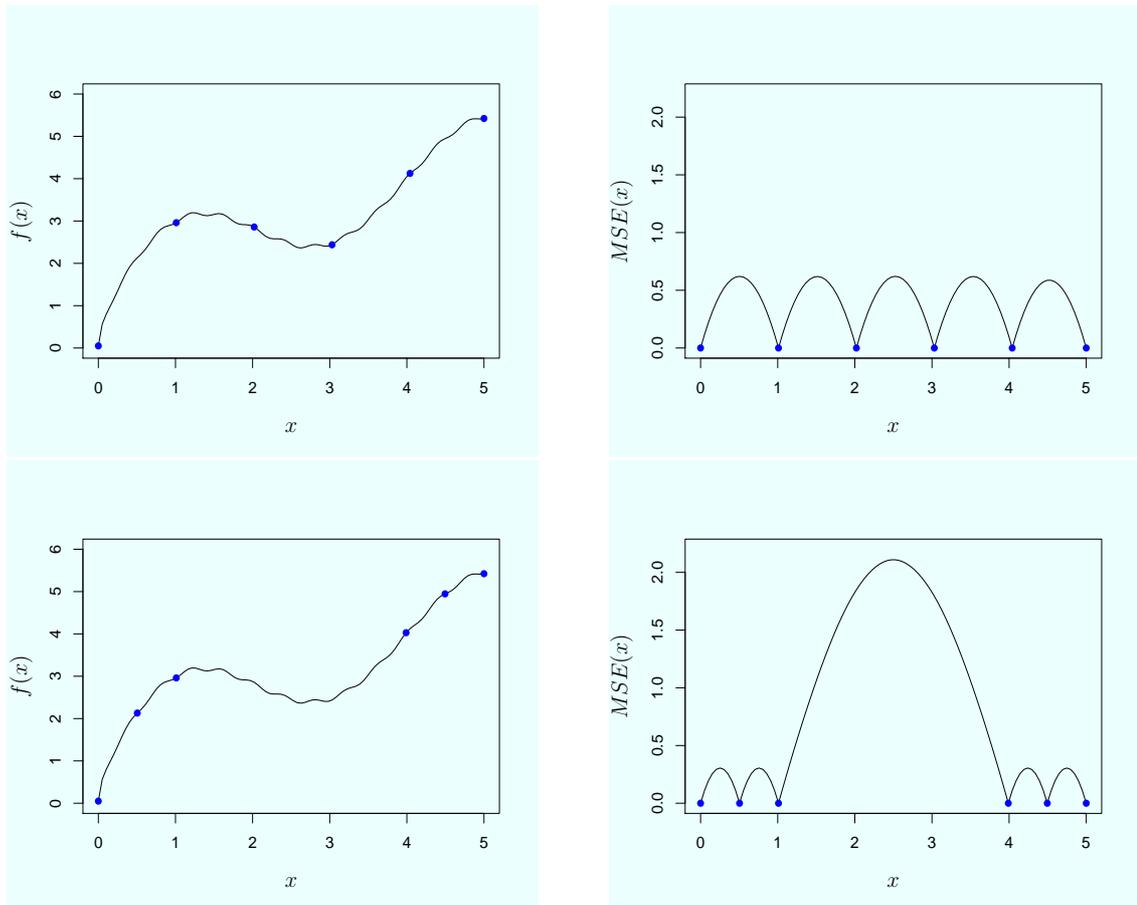


FIGURE 1.11 – Exemples de Krigage simple sur la fonction  $f(x) = \sin(\frac{1}{2}\pi x) + 2x^{1/2} + \frac{1}{20}\cos(5\pi x)$ . Nous avons utilisé un plan d'expériences à 6 points (en bleu) dont la répartition est uniforme pour les graphes du haut et non uniforme pour ceux du bas. A gauche est représentée la fonction  $f$  (en noir) et à droite la MSE obtenue par Krigage.

Le critère MSE permet un bon remplissage de l'espace. De plus, son

calcul n'est pas coûteux mais il ne permet de positionner qu'un seul point à la fois.

- l'**IMSE**, pour Integrated Mean Square Error, qui correspond à la MSE intégrée et qui va être minimisée.

$$\text{IMSE}^{X^k} = \int_{\mathcal{D}} \text{MSE}^{X^k}(u) du \quad (1.25)$$

Ce critère conduit à inclure dans le plan d'expériences les points minimisant l'incertitude globale. Il permet, lui aussi, un bon remplissage de l'espace. Un de ses avantages par rapport à la MSE est qu'il est possible de positionner plusieurs points en même temps. Toutefois, son calcul peut devenir coûteux à cause de l'intégrale sur tout le domaine à évaluer et de sa minimisation qui demande de résoudre un grand nombre de systèmes de Krigeage pour tester plusieurs ensembles de points candidats (nous renvoyons au tableau 2.1 du chapitre suivant pour plus de détails sur la complexité de l'algorithme de construction correspondant) .

Les critères MSE et IMSE conduisent à des plans d'expériences bien répartis sur tout le domaine puisque par construction, ils ne dépendent pas directement des valeurs des observations mais uniquement de leur position. Ils ne seront donc pas adaptés au cas où nous cherchons à raffiner localement le plan d'expériences dans des zones d'intérêt comme par exemple des régions à forte densité de population, à forte probabilité de dépasser un seuil ou à forte variation ...

Les méthodes de Krigeage offrent un cadre intéressant pour la reconstruction de données puisqu'elles se basent sur l'identification de la structure spatiale des observations, sont flexibles pour intégrer des erreurs de mesure et permettent de prendre compte explicitement les incertitudes via des simulations conditionnelles. Toutefois, les deux critères de planification introduits précédemment ne sont pas satisfaisants pour raffiner l'information localement et l'algorithme de planification peut être coûteux et sujet à des instabilités numériques. Pour palier ces difficultés et garantir une utilisation efficace dans le contexte de l'analyse de risques, une nouvelle approche de construction de plans d'expérience dépendant d'un modèle de Krigeage est proposée dans le chapitre suivant.

# Chapitre 2

## Construction et implémentation de plans d'expériences adaptatifs

Ce chapitre est consacré à de nouveaux développements relatifs au raffinement local de plans d'expériences prenant en compte les régions d'intérêt fournies par l'analyste. Ce travail a fait l'objet d'une publication (Buslig et al. (2014)) dans le journal *Mathematical Geosciences* en avril 2014. Les étapes de la construction de cette approche ainsi que les principaux résultats sont résumés dans la section 2.1. L'article dans sa version intégrale est fourni dans la section 2.2. Enfin, la section 2.3 est dédiée à une application de la méthode construite précédemment à un exemple issu des applications de l'IRSN concernant la prise en compte des incertitudes dans un code de fissuration mécanique.

### 2.1 Commentaires sur l'article

La nouvelle méthode de planification est d'abord décrite dans cet article. Elle se base sur de nouveaux critères de planification pour le raffinement dans une zone d'intérêt et intègre une implémentation efficace qui permet son utilisation dans un contexte industriel. Ses performances sont ensuite comparées à celles d'approches classiques. Enfin, deux applications numériques sont présentées : la première sur un cas d'école et la seconde, dans le cadre de l'analyse de risque, sur des données environnementales.

Comme nous avons pu le voir dans le chapitre précédent, les critères de planification basés uniquement sur la variance d'estimation ( $MSE^{X^k}$  et  $IMSE^{X^k}$ ) ne sont pas pleinement satisfaisants puisqu'ils ne permettent pas de prendre en compte les objectifs des analystes qui ont souvent besoin de réduire l'incertitude dans certaines régions du domaine. Pour palier ce pro-

blème, dans la section 2.2.3, nous nous basons sur les travaux de Picheny et al. (2010) pour modifier les critères  $MSE^{X^k}$  et  $IMSE^{X^k}$  qui se trouvent alors pondérés par une fonction  $W_{\mathcal{A}}$  permettant de caractériser l’objectif visé. Les zones d’intérêt peuvent alors être définies par une variable extérieure telle une densité de population (Eq. 2.19) ou par une probabilité de dépasser un seuil par exemple (Eq. 2.18). Les nouveaux critères ainsi obtenus, la  $MSE_w^{X^k}$  et l’ $IMSE_w^{X^k}$  (Eqs. 2.16 et 2.17) conduisent à un bon compromis entre réduction de l’incertitude dans les régions sous-échantillonnées à travers le terme  $MSE^{X^k}$  et exploration des zones d’intérêt à travers le terme  $W_{\mathcal{A}}$ .

La stabilité de la procédure de planification est ensuite étudiée dans la section 2.2.4. Cette propriété est importante à contrôler afin d’éviter un ralentissement de la vitesse de convergence des algorithmes d’inversion (voire une impossibilité d’inverser) ou l’obtention d’une solution erronée. Les résultats standards sur le conditionnement des matrices de covariance rappelés dans le chapitre précédent n’étant pas applicables ici compte tenu que nous travaillons avec des grilles non régulières, une étude théorique du comportement du conditionnement de Frobenius de la matrice de covariance est effectuée. Elle conduit au résultat énoncé dans la proposition 2.2.2 qui relie le conditionnement des matrices de covariance avant et après l’ajout d’un nouveau point (Eq. 2.25). Il apparaît que la présence d’un nouveau point proche d’un point d’observation augmente le conditionnement de la matrice initiale d’un terme de perturbation qui dépend de la distance minimale séparant le nouveau point des observations et du modèle de semi-variogramme. Une première procédure de stabilisation est ensuite proposée. Elle s’appuie sur l’introduction d’une variance d’erreur artificielle sur la diagonale de la matrice de covariance comme c’est fait classiquement pour prendre en compte une erreur de mesure (Remarque 1.1.3). Dans ce cas, le terme de perturbation  $\tilde{V}$  ne dépend plus de la distance (Proposition 2.2.4), ce qui garantit la stabilité du problème de Krigeage. Le prix à payer est la perte du caractère interpolant de la reconstruction, ce qui nécessite un choix éclairé de la variance d’erreur.

D’un point de vue théorique, le critère  $IMSE_w^{X^k}$  permet un bon compromis entre réduction des incertitudes et exploration des zones d’intérêt. Toutefois, en pratique, si nous considérons l’ensemble des observations, l’estimation de ce critère devient très rapidement coûteuse en terme de temps de calcul puisqu’elle nécessite de réaliser un grand nombre de Krigeage. En se basant sur un algorithme de planification itératif (Algorithme 2.2.2), deux stratégies de réduction de coût de calcul sont donc proposées dans la section 2.2.5. La première consiste en un couplage de ce critère avec le critère  $MSE^{X^k}$ . En effet, le maximum de la  $MSE^{X^k}$  se situe souvent à proximité du minimum de l’ $IMSE^{X^k}$ . Il s’agit alors de minimiser l’ $IMSE^{X^k}$  uniquement sur un voisinage

$D(\tilde{x}, r^{\tilde{x}})$  du point  $\tilde{x}$  qui maximise la  $MSE^{X^k}$  sur tout le domaine (Proposition 2.2.6). Le nombre de Krigeages à réaliser ne dépend plus de la taille du domaine mais uniquement de celle du voisinage choisi ce qui nous conduit à une réduction conséquente du coût de calcul. Toutefois, ce dernier reste très important du fait de l'intégration sur tout le domaine nécessaire au calcul de l' $IMSE^{X^k}$ . Nous introduisons, en conséquence, une seconde stratégie qui va réduire le coût de calcul de l'intégrale (Proposition 2.2.7).

Tout d'abord, pour évaluer l'effet de l'ajout d'un nouveau point dans le plan d'expériences, nous utilisons les formules de mise à jour de Barnes and Watson (1992) (Proposition 2.2.1). Ces formules permettent de calculer l'amélioration de l' $IMSE_w$  (c'est-à-dire  $IMSE_w^{X^k \cup \{x^*\}} - IMSE_w^{X^k}$ ) sans avoir à réaliser un Krigeage à partir de  $X^k \cup \{x^*\}$  (Eq. 2.27). Il est ainsi possible de chercher le minimum de l' $IMSE_w$  sans faire de Krigeage supplémentaire. Cependant, l'intégrale se fait toujours sur tout le domaine. En remarquant que lors de l'ajout d'un nouveau point  $x^*$ , la valeur de l'amélioration de la MSE est négligeable en dehors d'un voisinage  $D(x^*, h_c)$  de  $x^*$  où  $h_c$  dépend uniquement de la portée pour un semi-variogramme à palier, nous remplaçons l'intégrale sur tout le domaine par une intégrale sur ce voisinage. Cette seconde stratégie représente un gain significatif pour la réduction du coût de calcul par rapport à la première (Tableau 2.1).

Dans la section 2.2.6, cette méthode de planification adaptative d'expériences est appliquée à un cas d'école (fonction de Branin, Eq. (2.30)) puis à un cas réel.

Pour le cas d'école, les régions d'intérêt sont les zones de forte probabilité de dépassement d'une valeur seuil ou des zones où une forte densité de population est artificiellement simulée à l'aide d'un mélange de deux Gaussiennes. La figure 2.8 fournit le plan d'expériences qui est construit par notre procédure. Dans ce cas, tous les points sont ajoutés dans les zones d'intérêt ou très proches d'elles. De plus, on retrouve le comportement asymptotique du conditionnement des matrices de covariance obtenu théoriquement dans la section 2.2.4. Notre approche est ensuite comparée à une méthode de recuit simulé couramment utilisée pour résoudre des problèmes de plans d'expériences. Le recuit simulé est une méthode inspirée de la métallurgie dans laquelle sont alternés des cycles de refroidissement lent et de réchauffage (appelé recuit). L'objectif est d'atteindre un état d'équilibre thermodynamique où l'énergie du matériau est minimale. Cette méthode peut ensuite être transposée en optimisation pour trouver les extréma d'une fonction. Le recuit simulé génère des configurations successives. Partant d'une solution et d'une température initiales, la température décroît selon un certain schéma de refroidissement à définir. Plus précisément, l'algorithme ci-après décrit la recherche du minimum de la fonction  $f$ , à partir d'un schéma de refroidissement prédéfini c'est-à-dire une fonction décroissante qui définit l'évolution

de la température.

**Algorithme 2.1.1**

*Générer une configuration initiale  $x = x_0$ ,*

*Initialiser la température  $T = t_0$ ,*

*Répéter*

*Générer un voisin aléatoire  $x'$  de  $x$ ,*  
*Calculer  $\Delta f = f(x') - f(x)$ ,*  
*Si  $\Delta f \leq 0$  c'est-à-dire si  $x'$  améliore la minimisation de  $f$*   
*Alors  $x = x'$  c'est-à-dire  $x'$  est accepté,*  
*Sinon tirer aléatoirement  $p$  suivant une loi uniforme sur  $[0, 1]$ ,*  
*{*  
*Si  $p \leq e^{-\frac{\Delta f}{T}}$*   
*Alors  $x = x'$ ,*  
*Sinon*  
*Rejeter  $x'$ ,*  
*} Décroître la température  $T$  selon le schéma de refroidissement adopté,*

*Jusqu'à ce que  $T$  soit proche de 0.*

Le principal avantage du recuit simulé est que cette méthode permet de sortir d'un minimum local, en fonction d'une probabilité d'acceptation. Elle est disponible dans le package R GenSA (Gubian et al., 2012). Nous nous concentrons d'abord sur le comportement des deux approches en terme de temps de calcul (temps CPU). Pour cela, nous fixons le nombre de points à ajouter ainsi que le minimum d'IMSE<sub>w</sub> à atteindre afin de comparer le temps de calcul pour chacune de ces deux approches. Les résultats obtenus sont résumés dans le tableau 2.2. Il en ressort que sur ce cas test, les performances de notre algorithme sont bien meilleures que celles du recuit simulé en terme de réduction de coût de calcul avec par exemple un facteur de réduction de 380 pour 10 nouveaux points ajoutés. Ensuite, nous nous intéressons à l'optimalité de la solution obtenue pour chacune de ces deux approches. En se limitant à l'ajout de 8 points dans le plan d'expériences, la valeur de l'IMSE<sub>w</sub> atteinte est calculée. Pour se rapprocher de la solution optimale 12 recuits simulés correspondant chacun à un point initial différent sont réalisés et la valeur minimale de l'IMSE<sub>w</sub> est comparée à celle obtenue par notre méthode. Il apparaît alors sur le tableau 2.3 que le minimum de l'IMSE<sub>w</sub> venant de notre algorithme est très proche de la solution quasi-optimale fournie par l'approche de recuit simulé avec une réduction du nombre d'appels à la fonction objectif d'un facteur 2800.

Enfin, notre méthode est appliquée à des données environnementales de débit d'équivalent de dose. L'objectif est d'étendre un réseau de 164 capteurs de radioactivité (plan d'expériences initial) en ajoutant 20 nouveaux capteurs. Les régions d'intérêt sont représentées par la densité de population discrétisée

sur une grille uniforme à 22820 points. Nous constatons sur la figure 2.11 que les capteurs ont été rajoutés dans les zones de forte densité de population comme en région parisienne, mais également dans les zones peu représentées par le plan d'expériences initial. De plus, aucun capteur n'a été ajouté dans les zones où de nombreux capteurs sont déjà présents comme c'est le cas pour la vallée du Rhone.

## 2.2 Construction and efficient implementation of adaptive objective-based designs of experiments

### Abstract

This work is devoted to the development of a new efficient procedure for the construction of adaptive model-based designs of experiments. It couples kriging theory with design of experiments optimization techniques. Its originality relies on two main ingredients : (i) the definition of a general criterion in the objective function that allows one to take into account the analyst's choices in order to explore critical regions, (ii) an efficient numerical implementation including a stabilization step to avoid numerical problems due to kriging matrix inversion and a computational cost reduction strategy that allows its use in industrial applications. After a full description of these key points, the resulting efficient algorithm is applied to extend over the French territory a network of probes for environmental monitoring. This study leads to a final design of experiments where the new probes are located in under-sampled regions of high population density. Moreover, it can be performed with an affordable computational cost, which is not the case with classical approach based on an optimization over the whole domain.

**keywords** Kriging . Optimization . Matrix conditioning . Nuclear safety

### 2.2.1 Introduction

Data reconstruction plays a key role in environmental safety studies. Since most of the collected information is discrete (coming from probes over a territory for example), the analyst wants to be able to accurately predict (to map) a phenomenon from a limited number of measurements. This accuracy controls her/his confidence in the predicted values, which is crucial in safety studies since they are then taken into account in the decision-making process.

Therefore, the French “Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire” (IRSN), which is in charge of safety assessment, is currently working on the construction of new approaches to properly handle interpolation problems. From a methodological point of view, one has to cope with two main issues. The first one concerns the construction of an efficient interpolation procedure : from a fixed set of measurements, the goal is to introduce a model that faithfully represents the phenomenon under study that will then be used for prediction. Among classical approaches, kriging (Cressie, 1993) has been proven to be an efficient alternative. Its main advantages stand in the possibility (i) to extract the spatial data structure by identifying the so-called semi-variogram or covariance function and (ii) to quantify the precision of the prediction thanks to an underlying probabilistic model.

The second issue is related to the choice of the finite set of points providing the information on the phenomenon under study : this set is called a Design of Experiments (DoE). Among classical approaches for DoE construction, one can mention space-filling (McKay et al., 1979 ; Myers and Montgomery, 1995 ; Niederreiter, 1992) based on geometric considerations and optimal (or model-dependent) designs (Sacks et al., 1989 ; St John and Draper, 1975) that consists in choosing the design points in order to maximize the quality of the prediction according to the analysts’ objectives (for example, the minimization of the prediction error in some target regions for mapping or optimization procedures). This last type of DoE has been widely used in many applications (for example Delmelle and Goovaerts, 2009), Sasena et al. (2002) or Sasena et al. (2005)) and is particularly interesting for environmental safety studies, since accuracy in the prediction is not critical everywhere but rather in specific regions, such as where the data exceeds a given threshold (detection of a radioactive release) or where the population density is high (radioactivity mapping).

However, a model-dependent DoE construction usually requires to solve a large number of optimization problems, involving numerous calls to the model. As a result, its efficiency can be strongly reduced due to numerical instabilities and high computational cost.

Therefore, this work is devoted to the development of a new efficient method for the construction of adaptive model-based design of experiments. After a quick overview of kriging-based DoE, the construction of adaptive design taking into account the analyst’s objectives is formalized in Sect. 2.2.3. It is based on an extension of the previous work of Picheny et al. (2010) and therefore couples kriging theory with design of experiments optimization techniques. The question of stability associated with the proposed procedure is then addressed in Sect. 2.2.4 by analyzing the condition number of covariance matrices and a stabilization step is introduced. Section 2.2.5 fully describes the cost reduction strategy that is integrated in this approach to ensure an efficient numerical treatment. Finally, the new DOE construction algorithm

is applied in Sect. 2.2.6, first to a simplified case study, then to a real environmental problem coming from the IRSN applications.

## 2.2.2 Coupling kriging and DoEs

### Overview on kriging interpolation

The available data (such as measurements provided by probes) denoted  $\{y(x_i)\}_{i=1,\dots,k}$  are considered as realizations of a subset of random variables  $\{\mathcal{Y}(x_i), i = 1, \dots, k\}$  coming from a Gaussian random process  $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$  (with  $\mathcal{D}$  a bounded domain of  $\mathbb{R}^p$ ) that reads

$$\mathcal{Y}(x) = m(x) + \delta(x), x \in \mathcal{D}, \quad (2.1)$$

where  $m(x)$  is the deterministic mean structure of  $\mathcal{Y}(x)$  and  $\{\delta(x), x \in \mathcal{D}\}$  is a zero-mean random process. The random process  $\delta(x)$  is assumed to be spatially autocorrelated. The kriging estimator is therefore constructed in two steps (Cressie 1993) : the identification of the spatial correlation structure associated with  $\delta(x)$  followed by the construction of a kriging estimator as a linear combination of the observed data.

#### **Remarque 2.2.1**

*The Kriging model considered in this article is based on the assertion that  $\{\mathcal{Y}(x), x \in \mathcal{D}\}$  is a Gaussian process. Alternative frameworks, such as indicator kriging (Goovaerts, 1997) for instance, or Bayesian formulations that introduce variability due to the uncertainty in covariance parameter estimation, are not considered in this work.*

### **Correlation structure identification**

In this paper, we focus on ordinary kriging, which implies that  $\delta(x)$  is stationary and that the mean  $m(x)$  is an unknown deterministic constant. In this case, the spatial correlation structure of  $\{\delta(x), x \in \mathcal{D}\}$  is identified to the spatial correlation of the data and is exhibited by computing the semi-variogram

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} \mathbb{E}\{(\mathcal{Y}(x+h) - \mathcal{Y}(x))^2\}, \quad (2.2)$$

where  $\mathbb{E}$  denotes the mathematical expectation. In practice, this quantity is approximated by a least square fit of the discrete experimental semi-variogram

$$\gamma_{exp}(h) = \frac{1}{2|N(h)|} \sum_{(m,n) \in N(h)} (y(x_m) - y(x_n))^2, \quad (2.3)$$

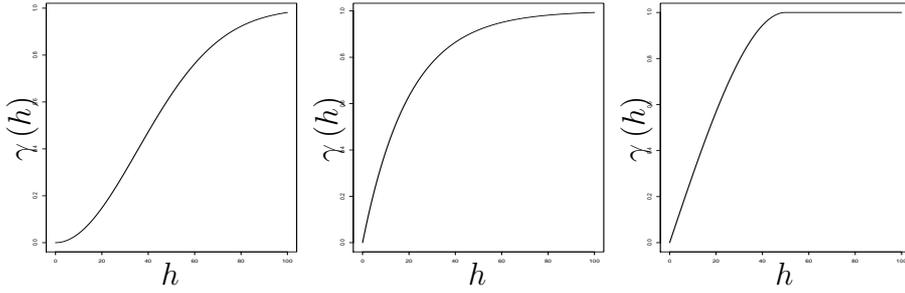


FIGURE 2.1 – Semi-variogram models. From left to right, Gaussian  $((c, a) = (1, 50))$ , exponential  $((c, a) = (1, 20))$  and spherical  $((c, a) = (1, 50))$  semi-variograms.

with  $N(h) = \{(m, n), h - \epsilon \leq \|x_m - x_n\|_2 \leq h + \epsilon\}$  ( $\|\cdot\|_2$  denotes the Euclidian norm) and for every  $h$  such that  $|N(h)|$ , the cardinality of  $N(h)$ , is sufficiently large. The candidates for the experimental semi-variogram fitting have to be chosen in a list of valid semi-variogram models. Among them, we restrict our analysis to the subset of semi-variogram models exhibiting a sill (possibly asymptotically i.e. for large distance) and denoted  $\mathcal{V}$  for the rest of the paper. Classical examples of such semi-variograms are Gaussian, exponential or spherical types (Fig. 2.1) that read (Wackernagel, 1998) :

- Gaussian model :  $\gamma(h) = c(1 - e^{-(\frac{h}{a})^2})$ ,
- Exponential model :  $\gamma(h) = c(1 - e^{-\frac{h}{a}})$ ,
- Spherical model :  $\gamma(h) = \begin{cases} c(\frac{3}{2}\frac{h}{a} - \frac{1}{2}\frac{h^3}{a^3}), & \text{for } 0 \leq h \leq a, \\ c, & \text{for } h > a. \end{cases}$

Since these models exhibit a finite limit for large distance, it is possible to establish the connection to a spatial covariance function,  $C(\cdot)$  by  $\forall h, C(h) = \lim_{h \rightarrow +\infty} \gamma(h) - \gamma(h)$ . Moreover, due to the (asymptotical) sill, a critical distance  $h_c$  can be defined as follows :

### Définition 2.2.1

*To any semi-variogram models of  $\mathcal{V}$ , one can associate a critical distance  $h_c$  such that in cases of semi-variograms exhibiting a sill, the covariance vanishes for  $h \geq h_c$ . If the sill is asymptotically reached,  $h_c$  corresponds to 95% of the decrease of the covariance from its initial value.*

As an example, for Gaussian (resp. exponential) models,  $h_c = \sqrt{3}a$  (resp.  $h_c = 3a$ ). For spherical one,  $h_c = a$ .

### Ordinary kriging estimator

Denoting  $X^k = \{x_i\}_{i=1, \dots, k}$  and  $Y^k = \{y(x_i)\}_{i=1, \dots, k}$ , the ordinary kriging estimator  $\mathcal{P}(Y, x^* | X^k, Y^k)$  at a new location  $x^*$  is the linear, unbiased

predictor minimizing the estimation variance  $\sigma_{kg}^2(x^*|X^k, Y^k) = \text{var}(Y(x^*) - \mathcal{P}(Y, x^*|X^k, Y^k))$ . It is written as  $\mathcal{P}(Y, x^*|X^k, Y^k) = \sum_{i=1}^k \lambda_i Y(x_i)$ , where  $\{\lambda_i\}_{i=1, \dots, k}$  is solution of

$$\begin{bmatrix} \gamma(\|x_1 - x_1\|_2) & \dots & \gamma(\|x_1 - x_k\|_2) & 1 \\ \gamma(\|x_2 - x_1\|_2) & \dots & \gamma(\|x_2 - x_k\|_2) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & 1 \\ \gamma(\|x_k - x_1\|_2) & \dots & \gamma(\|x_k - x_k\|_2) & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \lambda_k \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(\|x^* - x_1\|_2) \\ \gamma(\|x^* - x_2\|_2) \\ \dots \\ \gamma(\|x^* - x_k\|_2) \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

where  $\mu$  is the Lagrange multiplier enforcing the unbiasedness of the estimator. For semi-variogram models exhibiting an (asymptotical) sill which is our concern in this paper, the previous matricial problem is reformulated using the covariance function as follows :

$$\begin{bmatrix} \Sigma^{X^k} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda^{X^k}(x^*) \\ -\mu^{X^k}(x^*) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

where  $\Lambda^{X^k}(x^*)$  denotes the vector of kriging weights.  $\Sigma^{X^k}$  is the covariance matrix i.e. whose  $(i, j)$ th element is  $C(\|x_i - x_j\|_2)$ ,  $\mathcal{C}^{X^k}(x^*)$  is the vector defined by  $\forall i \in \{1, \dots, k\}$ ,  $(\mathcal{C}^{X^k}(x^*))_i = C(\|x^* - x_i\|_2)$  and  $\mathbf{1}$  is the identity vector. The upperscript  $T$  denotes the transpose operator.

Using the covariance function, the best estimator and variance can be written as :

$$\mathcal{P}(Y, x^*|X^k, Y^k) = \left( \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T + \mathbf{1} \mu^{X^k}(x^*) \right) \left( \Sigma^{X^k} \right)^{-1} Y^k, \quad (2.6)$$

and

$$\begin{aligned} \sigma_{kg}^2(x^*|X^k, Y^k) &= \text{E}\{Y(x^*) - \mathcal{P}(Y, x^*|X^k, Y^k)\}^2, \\ &= C(0) - \Lambda^{X^k}(x^*)^T \mathcal{C}^{X^k}(x^*) + \mu^{X^k}(x^*). \end{aligned} \quad (2.7)$$

In this work, we consider the possibility to introduce an error variance on the diagonal of the covariance matrix i. e.  $\Sigma^{X^k}$  is replaced by  $\Sigma^{X^k} + c_0 I_{k \times k}$ , where  $c_0$  denotes the error variance and  $I_{k \times k}$  is the  $k \times k$  identity matrix. In practice, it allows one to take into account in the modelling a measurement error (Chiles and Delfiner, 1999). In our work, as it will become clear in Sect. 2.2.4, the introduction of an artificial error variance will be useful to stabilize the DoE procedure.

The set of points  $X^k$  is called a design of experiments of  $k$  points. Its construction plays a key role in the prediction by kriging. It provides the information on the phenomenon under study that is then used in the estimation of the spatial structure. It is therefore of primary importance, especially for the decision-making process in nuclear safety studies, to have a large enough amount of information to accurately interpolate. However, considering a very rich design of experiments is not technically nor economically affordable in practice, and our goal is to find a compromise between the number of points in the design and the quality of the prediction.

### Model-oriented designs of experiments

We provide in this section a quick overview of DoE construction. A special attention is devoted to sequential model-dependent designs, which are the starting point of our work. In the kriging framework, two classes of strategies are mainly used by practitioners. The first one consists of choosing all the experiments beforehand, based on geometrical considerations. The kriging model being sensitive to “holes” in the design space, space-filling strategies, which aim at providing a good coverage of the design space, have been found to be quite effective to generate accurate models. Many sampling options are available in the literature, for instance low discrepancy sequences, or optimized Latin Hypercube Sampling (LHS) : typically, an LHS maximizing the minimum distance between two observations (see Fang et al., 2006 for a detailed review).

When the model is chosen beforehand, another possible class of strategies consists of choosing the measurements in order to maximize the quality of the model. In the kriging framework, the most natural idea is to use the estimation variance provided by the model. Two criteria are classically used : the MSE (Mean Square Error) which coincides with the estimation variance or the IMSE (Integrated Mean Square Error) (Sacks et al., 1989). They are defined respectively by

$$\text{MSE}^{X^k}(x) = \sigma_{kg}^2(x|X^k, Y^k), \quad (2.8)$$

and

$$\text{IMSE}^{X^k} = \int_{\mathcal{D}} \text{MSE}^{X^k}(u) du \quad (2.9)$$

where the superscript in the MSE and IMSE notations stands for the DoE used for the computation of these two criteria. Such criteria require the covariance to be known.

In this article, we focus on this second class of strategy and propose a DoE construction procedure following a “network augmentation” approach. More precisely, the phenomenon under study is first approximated by a model based on an initial design  $X^{k_0}$  with  $k_0$  points, typically a space-filling design.

Then, the information provided by the predicted surface is integrated into the DoE procedure to increase the number of points in the design. The extension of our methodology to network reduction is not straightforward and will not be addressed in this paper.

There are two main approaches to increase the number of points. The first one is non-iterative and consists in adding them once and for all, exploiting the knowledge associated with the surface constructed from the initial DoE. For a model  $\mathcal{M}$ , the general procedure can be summarized as follows :

**Algorithm 2.2.1**

*From the initial DoE  $X^{k_0}$ , collect the observations of the phenomenon  $Y^{k_0}$  measured on  $X^{k_0}$ ,*

*Find the new set of points  $X^* = (x_1^*, \dots, x_{N-k_0}^*)$  that optimizes the criterion  $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}(X^*, X^{k_0}, Y^{k_0})$ ,*

*Evaluate the new set of observations  $Y^*$  at  $X^*$ ,*

*Update the DoE,  $X^N = X^{k_0} \cup X^*$  and the set of observations  $Y^N = Y^{k_0} \cup Y^*$ .*

The second approach is iterative. In this case, the predicted surface is updated when a new point is added to the design. It allows one to capture extra information that was not directly available in the initial DoE. It is summarized by the following algorithm :

**Algorithm 2.2.2**

*From the DoE  $X^{k_0}$ , collect the observations of the phenomenon  $Y^{k_0}$  measured on  $X^{k_0}$*

*For  $k = k_0 \dots N$ ,*  
*Find a new training point  $x^*$  that optimizes the criterion  $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}(x^*, X^k, Y^k)$ ,*  
*Evaluate the new observation  $y^*$  at  $x^*$ ,*  
*Update the DoE,  $X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\}$  and the set of observations  $Y^{k+1} = Y^k \cup \{y^*\}$ .*

There exists many ways to select  $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}$  within the kriging framework. The criteria introduced previously can be used as follow

$$\forall x \in \mathcal{D}$$

$$\mathcal{C}_{\mathcal{M}}(x, X^k, Y^k) = \text{MSE}^{X^k}(x) \quad (\text{to be maximized}), \quad (2.10)$$

$$\text{and } \forall (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{D}^n$$

$$\mathcal{C}_{\mathcal{M}}(x_1, \dots, x_n, X^k, Y^k) = \text{IMSE}^{X^k \cup \{(x_1, \dots, x_n)\}} \quad (\text{to be minimized}) \quad (2.11)$$

It is important to keep in mind that, by definition, the MSE criterion can only be used in an iterative approach whereas the IMSE, since it allows one to work with a set of points, can be involved in both Algorithms 2.2.1 and

2.2.2. Moreover, the maximum of the MSE corresponds to the point where the model uncertainty is the largest. On the contrary, the IMSE minimization leads to a point that will reduce the global uncertainty. Therefore, working with IMSE is more efficient. However, a criterion based on the estimation variance is not fully satisfactory since we are often interested in increasing the accuracy of the prediction in some target region such as a region where the data exceed a given threshold (detection of a radioactive release) or where the population density is high (radioactivity mapping) and the MSE cannot capture these important characteristics.

From a numerical point of view, both criteria require the computation of the estimation variance and therefore to solve a kriging problem. As it will become clear in Sect. 2.2.4, the condition number of covariance matrices drastically increases when increasing the number of points in the design. As a result, it can generate numerical instabilities in the prediction, which reduces the efficiency of such DoEs in practice. Moreover, in order to minimize the IMSE criterion, an integral over the whole domain using for instance a quadrature formula has to be estimated for each new tested set of points. This step is computationally costly, which becomes a strong limitation for industrial use. For example, in the bi-variate environmental study presented in Sect. 2.2.6, the IMSE is estimated by a quadrature formula defined on a very fine grid coming from an environmental database (22820 points). As a result, solving the kriging problems to achieve one iteration of Algorithms 2.2.1 or 2.2.2 takes too much time. Since this procedure has to be repeated until the total number of additional points is reached ( $> 100$ ), a DoE construction based on the direct minimization of the IMSE is not affordable.

Therefore, we propose in the sequel a new procedure that will be flexible enough to take into account the analyst's objective in the criteria  $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}$  while avoiding the numerical problems due to instabilities and high computational cost.

### 2.2.3 Adaptive objective-based DoEs

The construction of an adaptive objective-based DoE is formalized as follows :

**Définition 2.2.2**

*The construction of an adaptive objective-based DoE is fully specified by four main ingredients : the initial sequence of points and the total number of additional points, an assertion  $\mathcal{A}$  characterizing the target regions to explore, the model  $\mathcal{M}$  for prediction and the criteria  $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}$  to optimize,*

Concerning the assertion  $\mathcal{A}$ , we introduce the following mapping that is useful in the sequel.

### Définition 2.2.3

Let  $\mathcal{A}$  be an assertion characterizing an adaptive objective-based DoE, we define the mapping  $T_{\mathcal{A}} : \mathcal{D} \rightarrow \{0, 1\}$  such that

$$T_{\mathcal{A}}(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } \mathcal{A} \text{ is satisfied at the location } x, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2.12)$$

The target region is then the subset  $\mathcal{D}_{\mathcal{A}} \subset \mathcal{D}$  such that  $\mathcal{D}_{\mathcal{A}} = \{x \in \mathcal{D} / T_{\mathcal{A}}(x) = 1\}$ .

Among classical assertions that are chosen by analysts in nuclear safety studies, one can mention :  $\mathcal{A} = \{\text{The measured quantity, } Q, \text{ exceeds the threshold } \mathcal{T}\}$  in case of the detection of a radioactive release or  $\mathcal{A} = \{\text{The area is inhabited}\}$  for monthly radioactivity mapping.

### Construction of $\mathcal{C}_{\mathcal{M}}$

For the remaining of this paper, we focus on kriging modelling. In this case, as in Picheny et al. (2010), the IMSE criterion is modified in order to take into account the target regions to explore. More precisely, the integration domain of the IMSE is restricted to  $\mathcal{D}_{\mathcal{A}}$  leading for a given DoE,  $X^k$ , to the following weighted IMSE

$$\text{IMSE}_w^{X^k} = \int_{\mathcal{D}} \text{MSE}^{X^k}(x) T_{\mathcal{A}}(x) dx. \quad (2.13)$$

Such criterion allows one to increase the accuracy of the prediction in regions where the assertion  $\mathcal{A}$  is satisfied. However, this deterministic criterion is not fully satisfactory since  $\mathcal{D}_{\mathcal{A}}$  (and thus  $T_{\mathcal{A}}$ ) is unknown. Therefore, expression (2.13) is plugged in the probabilistic framework and the quantity  $T_{\mathcal{A}}$  is interpreted as a random process. The weighted IMSE is then defined with respect to an event  $\omega$  such that

$$\text{IMSE}_w^{X^k} = \int_{\mathcal{D}} \text{MSE}^{X^k}(x) T_{\mathcal{A}}(x, \omega) dx. \quad (2.14)$$

The weighted IMSE is finally evaluated by taking the expectation of the previous expression conditionally to the observations of the random process  $T_{\mathcal{A}}$

$$\text{IMSE}_w^{X^k} = \int_{\mathcal{D}} \text{MSE}^{X^k}(x) \text{E}\{T_{\mathcal{A}}(x) | T_{\mathcal{A}}^{obs}\} dx. \quad (2.15)$$

Noticing that the second term of the integral is the probability (conditionally to the observations) that  $T_{\mathcal{A}}(x) = 1$ , we introduce in the next definition the two weighted criteria that are involved in the adaptive DoE construction by Algorithms 2.2.1 and 2.2.2.

**Définition 2.2.4**

Let  $X^k$  be the DoE with  $k$  points specified by an assertion  $\mathcal{A}$ , the weighted MSE, resp. IMSE, is defined,  $\forall x \in \mathcal{D}$ , by

$$\text{MSE}_w^{X^k}(x) = \text{MSE}^{X^k}(x)W_{\mathcal{A}}(x), \quad (2.16)$$

$$\text{IMSE}_w^{X^k} = \int_{\mathcal{D}} \text{MSE}^{X^k}(x)W_{\mathcal{A}}(x)dx, \quad (2.17)$$

where  $W_{\mathcal{A}}(x)$  is the probability that  $\mathcal{A}$  is satisfied at the location  $x$ .

As an example, for the two classical assertions mentioned previously, the weight  $W_{\mathcal{A}}$  is computed from the predictor and the kriging variance (radioactive release) that can be written as follows

$$\begin{aligned} W_{\mathcal{A}}(x) &= \text{P}(Y(x) > \mathcal{T}) \\ &= 1 - \phi\left(\frac{\mathcal{T} - \mathcal{P}(Y, x|X^k, Y^k)}{\sigma_{kg}(x|X^k, Y^k)}\right), \end{aligned} \quad (2.18)$$

where  $\text{P}$  represents the probability,  $\mathcal{T}$  the threshold and  $\phi$  the univariate Gaussian cumulative distribution function. In order to reduce the computational cost, the kriging estimator is not recomputed when testing a new point. As for the assertion related to radioactive mapping, the weight integrates the population density for a given area and is written

$$W_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\text{Population at location } x}{\text{Total population}}. \quad (2.19)$$

In this case, the weight does not depend on the underlying random function  $Y$  associated with the observed data but on an external variable which comes, for example in the application of Sect. 2.2.6, from a geographic data base. It is therefore evaluated once and for all. Note that the advantage of Criteria (2.16) and (2.17) is to reduce the uncertainty (“MSE” term) while allowing to explore target regions (“ $W_{\mathcal{A}}$ ” term).

**DoE construction procedure**

We focus for the remaining of this work on DoE construction procedures integrating the previous objective-based IMSE and following the iterative algorithm 2.2.2. In this case, the MSE when adding a new point in the design can be efficiently computed from the MSE associated with the initial one according to the updating formula (Barnes and Watson, 1992) recalled in the next proposition.

**Proposition 2.2.1**

Let  $X^k$  a DoE with  $k$  points. Assume that a new point  $x^* \in \mathcal{D}$  is added in the design, then, for any  $x \in \mathcal{D}$ ,  $\text{MSE}^{X^k \cup \{x^*\}}(x)$  can be evaluated as follows

$$\text{MSE}^{X^k \cup \{x^*\}}(x) = \text{MSE}^{X^k}(x) - \frac{\mathcal{K}_k^2(x, x^*)}{\text{MSE}^{X^k}(x^*)}, \quad (2.20)$$

where  $\mathcal{K}_k(x, x^*) = C(\|x - x^*\|_2) - \left( \Lambda^{X^k}(x^*)^T, -\mu^{X^k}(x^*) \right) \left( \mathcal{C}^{X^k}(x), 1 \right)^T$ .

In other words,  $\text{MSE}^{X^k \cup \{x^*\}}$  can be evaluated from  $\text{MSE}^{X^k}$  provided the kriging weights  $\Lambda^{X^k}$  and the Lagrange multiplier  $\mu^{X^k}$  are known without matrix inversion. Focusing on the bivariate case (which is our concern in this paper) and introducing  $\mathcal{X}^L = \{x_i\}_{i=1, \dots, L}$  a fine uniform 2D grid of  $\mathcal{D}$  (i.e.  $L \gg N$ ) for the estimation of the IMSE by a quadrature formula, the DoE construction procedure is then described by the following algorithm :

**Algorithm 2.2.3**

From the DoE  $X^{k_0}$ , collect the observations of the phenomenon  $Y^{k_0}$  measured on  $X^{k_0}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{For } k = k_0 \dots N, \\ \text{Find } x^* \text{ such that } x^* = \arg \min_{x \in \mathcal{X}^L} \left( \text{IMSE}_{w,L}^{X^k \cup \{x\}} \right) \text{ where } \text{IMSE}_{w,L}^{X^k \cup \{x\}} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \text{MSE}_w^{X^k \cup \{x\}}(x_i) \\ \text{and } \text{MSE}^{X^k \cup \{x\}}(x_i) \text{ is computed from the updating formula,} \\ \text{Evaluate the new observation } y^* \text{ at } x^*, \\ \text{Update the DoE, } X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\} \text{ and the set of observations } Y^{k+1} = Y^k \cup \{y^*\}. \end{array} \right.$$
**2.2.4 Numerical stability of the DoE procedure**

The stability of the kriging problems (i.e. related to the kriging matrix inversion) involved in Algorithm 2.2.3 is first analysed in this section. Then, a stabilization step is proposed and added in the DoE construction algorithm to ensure an efficient numerical treatment.

**Theoretical analysis**

For sake of clarity, the proofs of the propositions introduced in the sequel are postponed to the Appendix section.

**Condition number**

From a mathematical point of view, instabilities are directly connected to large condition numbers of the kriging matrices.

**Définition 2.2.5**

Let  $A$  be an invertible  $N \times N$  matrix, the condition number of  $A$  associated with the matrix norm  $\| \cdot \|$  is defined by

$$\text{Cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|. \quad (2.21)$$

As mentioned previously, the condition number depends on the matrix norm. A classical choice is the spectral norm and the condition number is written as :

**Définition 2.2.6**

Let  $A$  be a symmetric and invertible  $N \times N$  matrix, the spectral condition number is

$$\text{Cond}_2(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2, \quad (2.22)$$

where  $\|A\|_2$  is the square root of the largest eigenvalue of  $A^T A$ .

There exists many works dealing with the behaviour of the condition number of kriging matrices. In Posa (1989) and O'Dowd (1991), the sensitivity of the spectral condition number with respect to the semi-variogram model and the associated parameters is numerically investigated in the case of a uniform DoE (i.e. regularly spaced grid). Theoretical estimations of the condition number are proposed in Ababou et al. (1994). They are based on the asymptotical relation (i.e. when the space step tends to zero) between Toeplitz and circulant matrices also addressed in Gray (2006). However, these results involved the Fourier transform of spectral densities and it is not straightforward to extend them to non-uniform DoE which is our concern in this paper. Therefore, we focus in the sequel on the quantification of the evolution of the condition number in the bivariate case when the design is locally refined. Since it is well known that the kriging matrix is at least as ill-conditioned as the corresponding covariance one (O'Dowd, 1991), we restrict our study to the estimation of the condition number associated with the covariance matrix. The direct estimation of the spectral condition number is not obvious especially for multivariate design. Therefore, in order to facilitate the analysis, we focus on the Frobenius condition number. All the useful definitions related to its estimation are recalled in the sequel, they are taken from Benesty and Gansler (2006).

**Définition 2.2.7**

Let  $A$  be an invertible  $N \times N$  matrix and  $\{\mathcal{L}_k\}_{k=1, \dots, N}$  the set of its eigenvalues. If  $\text{Tr}$  denotes the trace operator, the Frobenius condition number of  $A$  is written

$$\text{Cond}_F(A) = \|A\|_F \cdot \|A^{-1}\|_F, \quad (2.23)$$

with  $\|A\|_F = \sqrt{\text{Tr}(A^T A)}$ .

Moreover if  $A$  is symmetric positive, introducing the square root of  $A$  by  $A^{1/2} = Q\Lambda_A^{1/2}Q^T$  with  $\Lambda_A = \text{diag}[\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_N]$  and  $Q$  satisfying  $Q^T A Q = \Lambda_A$ , the Frobenius condition number of  $A^{1/2}$  reads

$$\text{Cond}_F(A^{1/2}) = \sqrt{\text{Tr}(A) \text{Tr}((A)^{-1})}. \quad (2.24)$$

$\text{Cond}_F^2(A^{1/2})$  is a good measure of the Frobenius condition number of  $A$  (Benesty and Gansler, 2006) which in turn is equivalent to  $\text{Cond}_2^2(A)$ . Therefore, the remaining of this section is devoted to the analysis of the behaviour of  $\text{Cond}_F^2((\Sigma^{X^k})^{1/2})$ . Since our construction procedure is iterative, we focus on the influence on the condition number of one new point in the design. It is convenient to express the condition number of the new covariance matrix as a perturbation of the previous one. This is achieved by the following proposition.

**Proposition 2.2.2**

Let  $\Sigma^{X^k}$  and  $\Sigma^{X^{k+1}}$  the covariance matrices before and after adding a new point  $x^*$  in the design  $\{x_i\}_{i=1, \dots, k}$ , then

$$\text{Cond}_F^2((\Sigma^{X^{k+1}})^{1/2}) = \frac{k+1}{k} \text{Cond}_F^2((\Sigma^{X^k})^{1/2}) + \tilde{V}. \quad (2.25)$$

$\tilde{V}$  is a perturbation term and reads

$$\tilde{V} = \frac{(k+1)C(0)}{\alpha_k} (1 + \text{Tr}(\beta_k \beta_k^T)), \quad (2.26)$$

where  $\beta_k = (\Sigma^{X^k})^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)$  and  $\alpha_k = C(0) - \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T \beta_k$ .

Proposition 2.2.2 offers a straightforward way to measure the influence of a new point in the design by evaluating the perturbation term and without inverting the possibly ill-conditioned matrix,  $\Sigma^{X^{k+1}}$ . It is exploited in the following analysis which is restricted to the case where a new point  $x^*$  is added in a bivariate uniform DoE. This corresponds to the kind of grid involved in the application of Sect. 2.2.6. Without loss of generality, it is assumed that  $x^*$  is located in the vicinity of  $x_1$  and its position is parametrized by an integer  $l$  such that  $x^* = (\frac{1}{2^l}, \frac{1}{2^l})$  as depicted on Figure 2.2 for a 4-point uniform DoE of  $[0, 1]^2$ .

**A general result**

We focus in the sequel on the behaviour of the perturbation term (expression (2.26)) for large  $l$  which is the situation leading to large condition numbers. A special attention is devoted to the impact of the introduction of an artificial error variance (Chiles and Delfiner, 1999) as well.

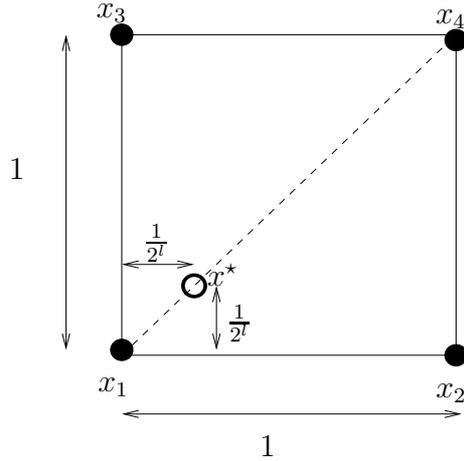


FIGURE 2.2 – Initial DoE (black filled circles) of  $[0, 1]^2$  and new added point (thick circle) for  $k = 4$ .

- Kriging without error variance ( $c_0 = 0$ )
- The following proposition holds :

**Proposition 2.2.3**

*For any type of semi-variograms  $\mathcal{V}$ , there exists an integer  $p_{\mathcal{V}} > 0$  such that the perturbation term satisfies for large  $l$  :  $\tilde{V} \sim (k + 1)2^{p_{\mathcal{V}}l}$ .*

This proposition shows that the perturbation term drastically increases (as a power of  $2^l$ ) when a new point is added. Moreover, its behaviour depends on  $p_{\mathcal{V}}$  and therefore on the semi-variogram model.

- Kriging with error variance

The following proposition provides the asymptotical behaviour of the perturbation term in that case.

**Proposition 2.2.4**

*For any type of semi-variograms  $\mathcal{V}$ , the perturbation term satisfies for large  $l$  :  $\tilde{V} \sim k + 1$ .*

According to the previous proposition, the behaviour of the perturbation when adding an error variance does not depend on  $l$  anymore. This important result is used in Sect. 2.2.4 to introduce a stabilization step in the DoE construction procedure for practical issues.

**Examples for Gaussian and exponential semi-variograms**

The analysis of the asymptotical behaviour is here restricted to Gaussian and exponential semi-variogram models and to an initial DoE of  $[0, 1]^2$  with 4 points (Fig. 2.2). The following result then holds :

**Proposition 2.2.5**

For Gaussian (resp. exponential) semi-variograms, the asymptotical increase speed of the perturbation term is controlled by  $p_V = 2$  (resp.  $p_V = 1$ ).

Note that the strongest increase of  $\hat{V}$  (and therefore of the condition number of the covariance matrix when adding a new point) corresponds to a Gaussian semi-variogram. Figure 2.3 displays the evolution of  $\frac{\text{Log}(\text{Cond}_2((\Sigma^{X^{k+1}})^{1/2}) - \text{Cond}_2((\Sigma^{X^k})^{1/2}))}{\text{Log}(2)}$  with respect to  $l$  for  $k = 4$  with and without introduction of an error variance. It is in full agreement with the theoretical estimate provided by Propositions 2.2.4 (i.e. stabilization of the condition number) and 2.2.5 (i.e. slope of  $m = 2$ , resp. of  $m = 1$  for a Gaussian, resp. exponential semi-variogram).

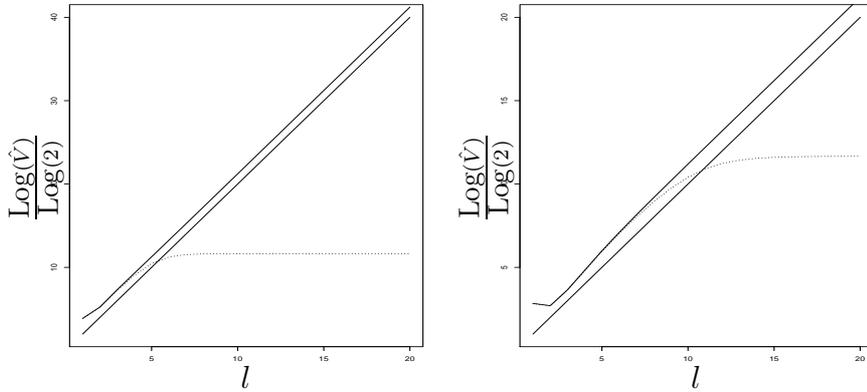


FIGURE 2.3 – Evolution of  $\frac{\text{Log}(\hat{V})}{\text{Log}(2)}$  where  $\hat{V} = \text{Cond}_2((\Sigma^{X^{k+1}})^{1/2}) - \text{Cond}_2((\Sigma^{X^k})^{1/2})$  with respect to  $l$ . The thin solid line stands for the case without error variance whereas the dashed one with error variance ( $c_0 = 0.001$ ). The thick solid line represents the theoretical estimate. Left, Gaussian, right, exponential semi-variograms. The parameters  $(c, a)$  of the semi-variogram models are respectively  $(1, 1)$  and  $(1, 1)$ .

It is also interesting to numerically study the behaviour of the perturbation with respect to  $k$ . Therefore, we introduce, for any  $j \in \mathbb{N}$ , the 2D dyadic grid  $X^{(2^j+1)^2}$  of  $[0, 1]^2$  i.e.  $X^{(2^j+1)^2} = \{(k_1 2^{-j}, k_2 2^{-j}), (k_1, k_2) \in \{0, \dots, 2^j\}^2\}$  and consider a 2-step refinement process to go from  $X^{(2^j+1)^2}$  to  $X^{(2^{j+1}+1)^2}$ . More precisely, we first iteratively add a new point corresponding to the middle of the existing cells and construct the intermediate grids  $X^{(2^j+1)^2+n}$  with  $n \in \{1, \dots, 2^{2j}\}$ . Then, from  $X^{(2^j+1)^2+2^{2j}}$ , the final grid is obtained by iteratively adding a new point at the middle of horizontal then vertical edges of existing cells.

This procedure is applied from  $j_0 = 0$  to  $j_{max} = 4$  and the perturbation  $\text{Cond}_2\left((\Sigma^{X^{k+1}})^{1/2}\right) - \text{Cond}_2\left((\Sigma^{X^k})^{1/2}\right)$  with respect to  $k$  is depicted on Figure 2.4 for an exponential semi-variogram.

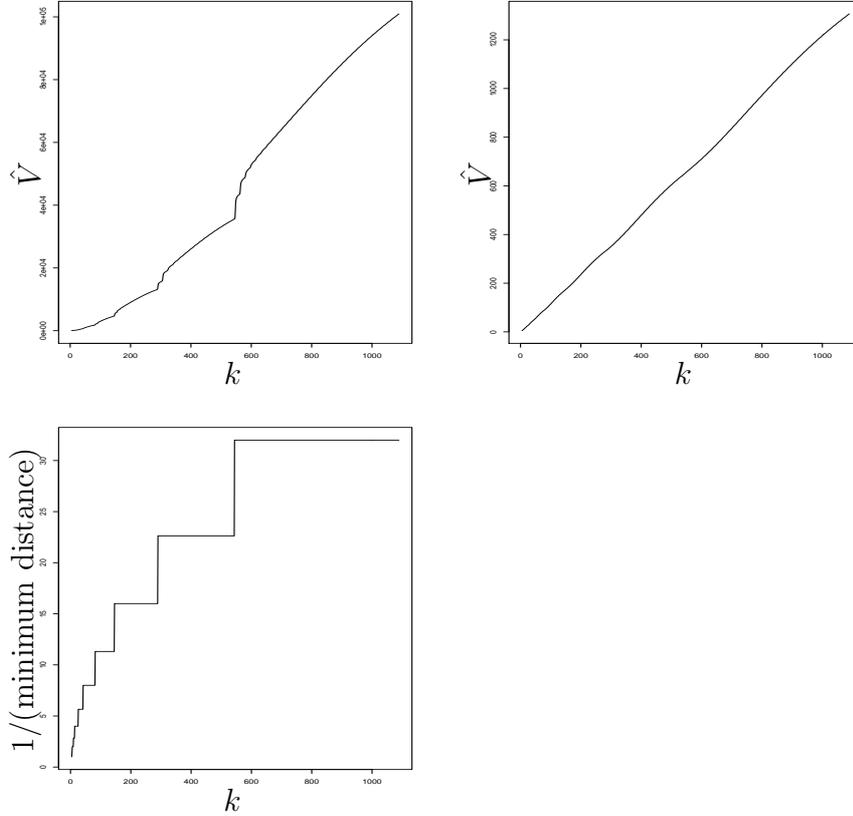


FIGURE 2.4 – Evolution of  $\hat{V} = \text{Cond}_2\left((\Sigma^{X^{k+1}})^{1/2}\right) - \text{Cond}_2\left((\Sigma^{X^k})^{1/2}\right)$  with respect to  $k$  for an exponential semi-variogram of parameters (1,1). Top, left, without error variance, top, right, with error variance ( $c_0 = 0.1$ ), bottom, evolution of the minimal distance between points in the refinement procedure.

It turns out that without error variance, the perturbation growth is piecewise linear, which is in full agreement with Proposition 2.2.5. More precisely, the linear part corresponds to the cases where the minimal distance between design points remains the same (see Fig. 2.4 bottom) while the jump is due to a change in this distance. For example, focusing on  $j = 4$ , the jump at  $N = 290$  corresponds to a distance varying from  $2^{-j}$  to  $\sqrt{2}2^{-j}$  while the next one at  $N = 544$  is due to a change from  $\sqrt{2}2^{-j}$  to  $2^{-(j+1)}$ . When an artificial error variance is introduced, the behaviour is fully linear since there is no more dependency on  $j$  (Proposition 2.2.4).

## Stabilization procedure

According to Proposition 2.2.4, an artificial error variance term on the diagonal of the covariance matrix reduces the corresponding condition number. However, as mentioned in Sect. 2.2.2, it implies that the observations are not the true values of the phenomenon under study. As a result, the reconstructed surface is no more interpolating and a too large value can lead to a strong modification of the initial problem. Therefore, our stabilization procedure is based on the introduction of an error variance that remains negligible compared to  $C(0)$ . The DoE procedure described by Algorithm 2.2.3 and integrating this stabilization then reads :

### Algorithm 2.2.4

From the DoE  $X^{k_0}$ , collect the observations of the phenomenon  $Y^{k_0}$  measured on  $X^{k_0}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{For } k = k_0 \dots N, \\ \text{Define the error variance } c_0 = \epsilon C(0) \text{ and replace } \Sigma^{X^k} \text{ by } \Sigma^{X^k} + c_0 I_{k \times k}, \\ \text{Find } x^* \text{ such that } x^* = \underset{x \in \mathcal{X}^L}{\operatorname{arg\,min}} \left( \operatorname{IMSE}_{w,L}^{X^k \cup \{x\}} \right) \text{ where } \operatorname{IMSE}_{w,L}^{X^k \cup \{x\}} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \operatorname{MSE}_w^{X^k \cup \{x\}}(x_i) \\ \text{and } \operatorname{MSE}_w^{X^k \cup \{x\}}(x_i) \text{ is computed from the updating formula.} \\ \text{Evaluate the new observation } y^* \text{ at } x^*, \\ \text{Update the DoE, } X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\} \text{ and the set of observations } Y^{k+1} = Y^k \cup \{y^*\}. \end{array} \right.$$

In our work, the parameter  $\epsilon$  is heuristically set to 0.001. In a recent work (Ranjan et al., 2011), the authors propose a lower bound of  $c_0$  that minimizes the over-smoothing of the data.

In the next section, we focus on the reduction of the computational cost associated with the previous algorithm. Even if the use of the updating formula is a first step towards this reduction, there still remains a large number of kriging estimations to perform. Therefore, to circumvent this limitation, we propose in what follows to integrate a cost reduction strategy for industrial applications.

## 2.2.5 Cost reduction strategies for DoE construction

Since the point that maximizes the MSE is usually located near the one that minimizes the IMSE, we propose to combine Criteria (2.16) and (2.17) to avoid a computationally costly numerical treatment.

### Strategy 1 : optimization of a low cost function

The direct minimization of  $\operatorname{IMSE}_w$  over the whole domain  $\mathcal{D}$  which is involved in Algorithm 2.2.3 is here replaced by a two-step procedure fully specified in the next proposition for bivariate DoEs.

**Proposition 2.2.6**

If  $D(x, r)$  stands for the disk centered on  $x$  and of radius  $r$ , the DoE  $X^{k+1}$  is obtained as follows :

- 1) Find  $\tilde{x} = \underset{x \in \mathcal{X}^L}{\operatorname{arg\,max}} \left( \operatorname{MSE}_w^{X^k}(x) \right)$  and choose  $r^{\tilde{x}}$  such that  $D(\tilde{x}, r^{\tilde{x}})$  defines a neighbourhood of  $\tilde{x}$  containing the candidates for the new point to add,
- 2) Construct  $X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\}$  such that  $x^* = \underset{x \in D(\tilde{x}, r^{\tilde{x}})}{\operatorname{arg\,min}} \left( \operatorname{IMSE}_{w,L}^{X^k \cup \{x\}} \right)$ .

In this case, the candidates of the IMSE minimization problem do not belong to the whole grid (of size  $L$ ) but to a neighbourhood of the maximum of the MSE which is specified by the user. For simplicity, Figure 2.5 displays this two-step procedure starting from a uniform DoE. It should be noted that this strategy can be applied for any arbitrary configuration of experimental locations.

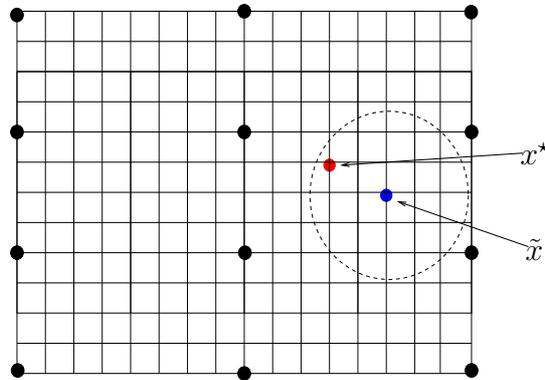


FIGURE 2.5 – Two-step procedure for the construction of adaptive DoE. The circle in dashed line stands for the neighbourhood  $D(\tilde{x}, r^{\tilde{x}})$ .

However, Step 2 requires a numerical integration over the whole domain  $\mathcal{D}$  which can be computationally costly in practice. Therefore, in the sequel, a second strategy is constructed. It is based on a local integration and requires to modify the criterion IMSE to optimize.

**Strategy 2 : local integration**

According to Proposition 2.2.1, the updating formula for variance allows one to evaluate the effect of a new point,  $x^*$ , in the design  $X^k$  on the weighted IMSE improvement. More precisely, combining expressions (2.17) and (2.20)

$$\begin{aligned}
\text{IMSE}_w^{X^k \cup \{x^*\}} - \text{IMSE}_w^{X^k} &= \int_{\mathcal{D}} \left( \text{MSE}^{X^k \cup \{x^*\}}(x) - \text{MSE}^{X^k}(x) \right) W_{\mathcal{A}}(x) dx \\
&= - \int_{\mathcal{D}} \frac{\mathcal{K}_k^2(x, x^*)}{\text{MSE}^{X^k}(x^*)} W_{\mathcal{A}}(x) dx. \tag{2.28}
\end{aligned}$$

It has been shown in Emery (2009) that the coefficient  $\frac{\mathcal{K}_k(x, x^*)}{\text{MSE}^{X^k}(x^*)}$  can be seen as the last component of the vector of kriging weights  $\Lambda^{X^k \cup \{x^*\}}(x)$ . Therefore, since for large enough distance  $\|x^* - x\|_2$ , the contribution of  $x^*$  to  $\text{MSE}(x)$  is very small, the weighted IMSE improvement is also negligible outside a neighbourhood of  $x^*$ . This neighbourhood is fixed, in practice and for the class of semi-variogram models  $\mathcal{V}$ , to the disk of radius  $h_c$  since the corresponding covariance function is (close to) zero for  $h \geq h_c$  (Fig. 2.6).

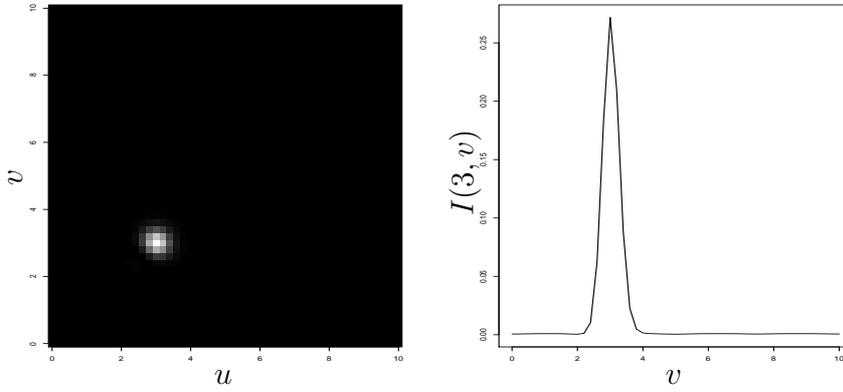


FIGURE 2.6 –  $I(u, v) = |\text{MSE}^{X^k \cup \{x^*\}}(u, v) - \text{MSE}^{X^k}(u, v)|$ ,  $(u, v) \in [0, 10]^2$ .  $X^k$  is a  $9 \times 9$  uniform grid of  $[0, 10] \times [0, 10]$ ,  $x^*$  is located at  $(3, 3)$ ; the semi-variogram model is of exponential type  $\gamma(h) = 1 - e^{-2h}$ . Left, 2D-representation of  $I(u, v)$  (from black to white, the values are increasing), right, cut along  $u = 3$ .

Exploiting this result, it is then possible to reduce the computational cost of the quadrature formula in the second step of Proposition 2.2.6 by working with  $\text{IMSE}_{w,L}^{X^k \cup \{x\}} - \text{IMSE}_{w,L}^{X^k}$  instead of  $\text{IMSE}_{w,L}^{X^k \cup \{x\}}$  and restricting the estimation of this improvement to a neighbourhood of  $x$  depending on the critical distance associated with the semi-variogram model. The final two-step procedure reads :

**Proposition 2.2.7**

*If  $h_c$  denotes the critical distance associated with the identified semi-variogram belonging to the class  $\mathcal{V}$ , then the DoE  $X^{k+1}$  is obtained as follows :*

- 1) Find  $\tilde{x} = \underset{x \in \mathcal{X}^L}{\arg \max} \left( \text{MSE}_w^{X^k}(x) \right)$  and choose  $r^{\tilde{x}}$  such that  $D(\tilde{x}, r^{\tilde{x}})$  defines a neighbourhood of  $\tilde{x}$  containing the candidates for the new point to add,
- 2) Construct  $X^{k+1} = X^k \cup \{x^*\}$  such that

$$x^* = \underset{x \in D(\tilde{x}, r^{\tilde{x}})}{\arg \max} \left( \frac{1}{|D(x, h_c)|} \sum_{x_i \in D(x, h_c)} \left| \text{MSE}_w^{X^k \cup \{x\}}(x_i) - \text{MSE}_w^{X^k}(x_i) \right| \right), \quad (2.29)$$

where  $|D(x, h_c)|$  is the number of grid points belonging to the disk  $D(x, h_c)$ .

Since the radius in Step 2 depends on  $h_c$ , a fast decreasing covariance leads to a very small amount of candidates.

It is interesting to evaluate the complexity of the two-step procedures described by Propositions 2.2.6 and 2.2.7. Let us first notice that the computation of the kriging variance on the grid  $\{x_i\}_{i=1, \dots, L}$  from  $k+1$  observations using the update formulas (recalled by Proposition 2.2.1) requires  $O(k^3 + k^2 + Lk)$  operations (see Chevalier et al., 2012 for further details). Therefore, for a set of  $M$  candidates,  $O(k^3 + M(k^2 + Lk))$  operations are performed. It is then straightforward to derive the complexity of our two-step procedures which is provided by Table 2.1 and compared to the complexity of the classical approach based on the direct minimization of  $\text{IMSE}_w$  involved in Algorithm 2.2.3. For sake of clarity, the two neighbourhoods involved in our methodology are written  $|D(x, r^x)| = \alpha L$  and  $|D(x, h_c)| = \beta L$ .

Procedure	Strategy 1	Strategy 2	Classical
Complexity	$O(k^3 + Lk^2 + \alpha(Lk^2 + L^2k))$	$O(k^3 + Lk^2 + \alpha(Lk^2 + \beta L^2k))$	$O(k^3 + Lk^2 + L^2k)$

TABLE 2.1 – Complexity of the two-step procedures and the classical approach based on the direct minimization of  $\text{IMSE}_w$ .

Let us first note that both strategies 1 and 2 strongly reduce the complexity of the DoE construction procedure compared to the classical one. Moreover, the second strategy leads to the best improvement. The difference between the two strategies depends on  $L$  and is more significant when  $L$  is large. The strong reduction of the computational cost is due to the third term in the complexity where  $L$  has been replaced by  $\beta L$  which is related to the critical distance of the identified covariance function.

## 2.2.6 Numerical tests

### Application to a simplified test case

Our goal is here to numerically study the DoE construction procedure described by Algorithm 2.2.3 integrating the weights (2.18) or (2.19). A special attention is devoted to the improvement, in term of computational cost reduction, of the two strategies proposed in the previous section. The test function is the Branin function (Fig. 2.7, left) restricted to  $[0, 1]^2$  and defined  $\forall (u, v) \in [0, 1]^2$  by

$$f(u, v) = \left( 15v - \frac{5}{4\pi^2}(15u - 5)^2 + \frac{5}{\pi}(15u - 5) - 6 \right)^2 + 10 \left( 1 - \frac{1}{8\pi} \right) \cos(15u - 5) + 1 \quad (2.30)$$

(2.31)

The procedure is characterized by (Definition 2.2.2) :

- an initial sequence of points corresponding to a  $4 \times 4$  uniform grid of  $[0, 1] \times [0, 1]$ . The total number of additional points is 29,
- the target regions are characterized by two types of assertions :

$\mathcal{A}_1 = \{\text{the value of the Branin function exceeds the threshold } 140\}$ ,

Assuming that the values of the Branin function stand for measurements on the square territory  $[0, 1] \times [0, 1]$ ,  $\mathcal{A}_2 = \{\text{The area is inhabited}\}$ . This assertion requires to have information about population. In this test case, the population density is given by a mixture of two Gaussian functions representing two local inhabited areas (Fig. 2.7, right). This mixture is defined  $\forall (u, v) \in [0, 1]^2$  by

$$g(u, v) = \frac{10}{\sqrt{2\pi}0.05} e^{-200\|(u,v)-(0.3,0.3)\|_2^2} + \frac{10}{\sqrt{2\pi}0.05} e^{-200\|(u,v)-(0.7,0.7)\|_2^2}, \quad (2.32)$$

- a kriging modelling based on a Gaussian semi-variogram of parameters  $(0.5, 0.5)$  is identified after a fit of the experimental semi-variogram computed from the initial data following Eq. (2.3).

The size of the uniform grid for the estimation of  $\text{IMSE}_w$  is  $L = 4900$ .

We first provide on Figure 2.8 the adaptive DoEs constructed by our procedure for Assertions  $\mathcal{A}_1$  and  $\mathcal{A}_2$  and compare them with a random one. As expected, the additional points are located in the target region leading to a significant improvement of the accuracy for the interpolation in these regions.

Figures 2.9 and 2.10 display, in the case of the  $\mathcal{A}_2$ -assertion, the computational cost (CPU time) of this DoE construction following Propositions 2.2.6 and 2.2.7 as well as the condition number of the covariance matrices with

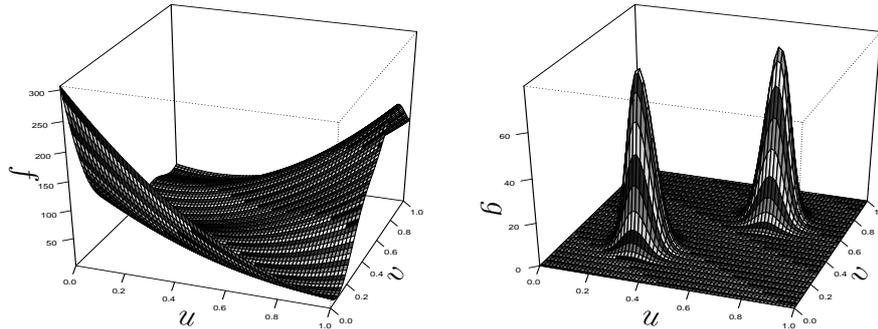


FIGURE 2.7 – Branin function (left) and simplified population density (right).

respect to the number of added points. It appears that the computational cost is reduced when following Strategy 2 with a gain of a factor 2 for  $k = 45$  for example keeping in mind that in this case  $h_c = 0.86$  leading to a large neighbourhood. Since this reduction is all the more important as the number of points increases, Strategy 2 leads to a significant improvement for industrial applications where  $k > 200$  (we refer to the next section for an example of applications). Concerning the condition number, it is also interesting to notice that for large  $k$ , Figure 2.10 exhibits a parabolic-shape behaviour when no error variance is considered while linear-type after the introduction of an error variance. This corresponds to the asymptotical behaviour of the perturbation term provided in Sect. 2.2.4.

For a full evaluation of the capabilities of our approach, the remaining of the numerical tests is devoted to the comparison between our DoE construction procedure following Strategy 2 and a simulated annealing method, as in Pardo-Iguzquiza (1998), which is a classical approach to solve DoE problems, using the R Package GenSA (Gubian et al., 2012). We focus on the behaviour of both approaches in terms of CPU time to add the same number of points in the DoE and optimality of the solution associated with the minimization problem as well.

We did not add on Figure 2.9 the computational cost associated with the algorithm based on simulated annealing since it takes too much time for  $k > 10$ . However, the comparison with our method can be performed for a smaller design. Table 2.2 provides the computational time for both approaches with respect to the number of new points for a fixed minimum of  $\text{IMSE}_w$  to reach.

It comes out that in this test, the two-step algorithm outperforms the simulated annealing in term of computational cost reduction with a factor increasing from 1.25 to 380 when moving from 2 to 10 new points.

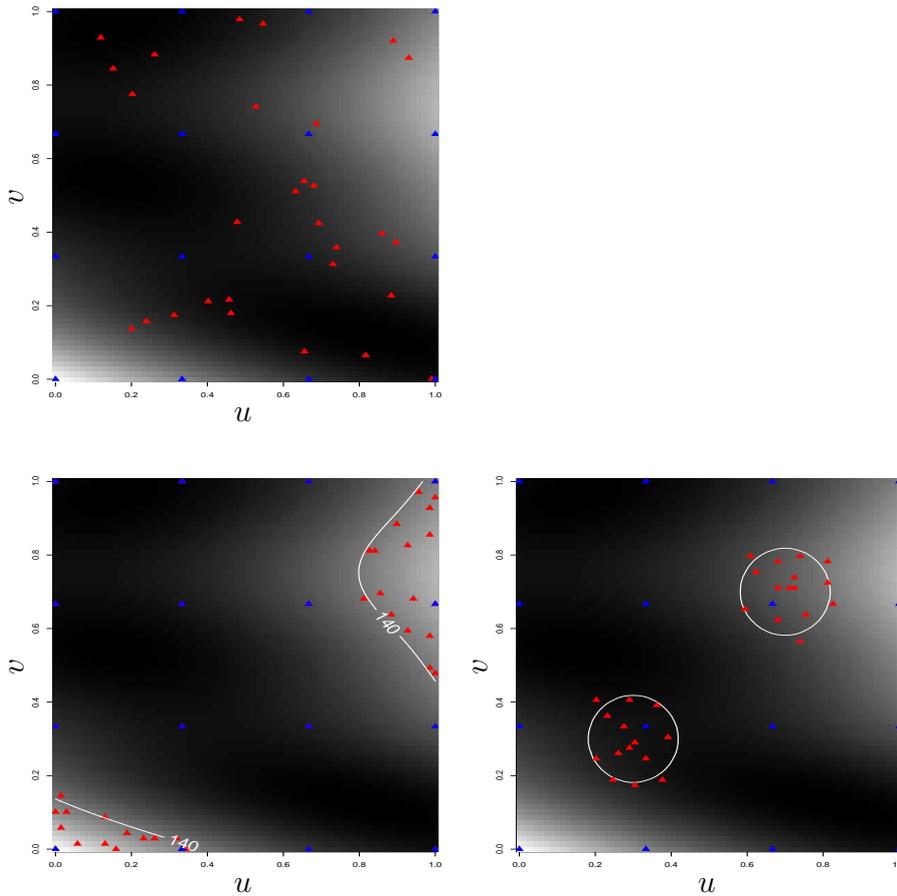


FIGURE 2.8 – Refinement of the 16-point DoE. The blue (resp. red) points stand for the initial (resp. additional) points. Top, random refinement. Bottom, adaptive refinement left, Assertion  $\mathcal{A}_1$ , right, Assertion  $\mathcal{A}_2$ . The background colors stand for the value of the Branin’s function (from black to white, the value of  $f$  is increasing).

Finally, as for the question of optimality of the solution, we focus on the case of eight new points and compute the near-optimal  $\text{IMSE}_w$  reached by the simulated annealing approach. In order to be close to the optimal solution, 12 runs corresponding to different seeds for the random selection of the initial guess have been performed. Table 2.3 provides the minimum of the  $\text{IMSE}_w$  among all runs. It required 227269 calls to the objective function. We also give in this table the result coming from our two-step approach.

It appears that the minimum of  $\text{IMSE}_w$  coming from our algorithm is very close to the near-optimal solution provided by the simulated annealing approach. It is also important to keep in mind that it could be reached by reducing the number of calls to the objective function of a factor 2800.

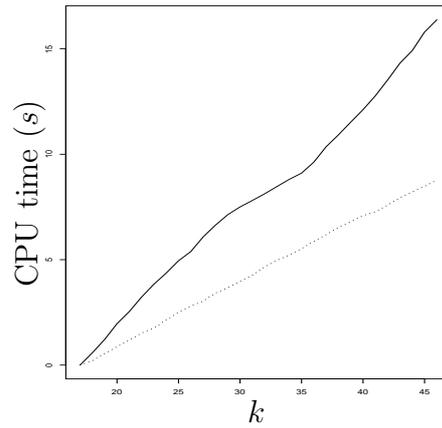


FIGURE 2.9 – Computational time with the respect to the number of points in the design ( $\mathcal{A}_2$ -assertion). In solid line, strategy 1, in dashed line, strategy 2.

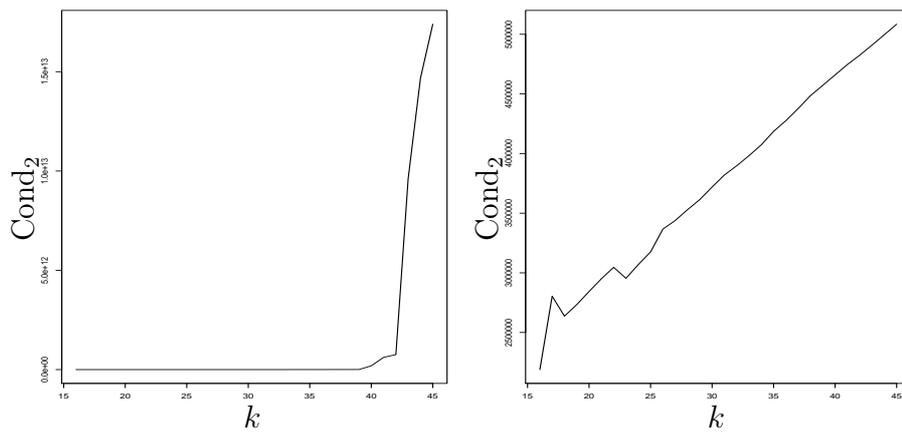


FIGURE 2.10 – Condition number ( $\text{Cond}_2$ ) of the covariance matrices with respect to the number of points in the design ( $\mathcal{A}_2$ -assertion). Left, without error variance, right, with error variance ( $c_0 = 0.001$ ).

### Application to environmental risk analysis

Algorithm 2.2.3 integrating the two-step procedure defined by Proposition 2.2.7 is here used in the frame of IRSN environmental studies.

(Nb, Min $\text{IMSE}_w$ )	Simulated annealing	Two-step algorithm
(2, $1.18 \times 10^{-3}$ )	1.5	1.2
(4, $8.63 \times 10^{-5}$ )	14	1.2
(6, $1.64 \times 10^{-5}$ )	547.7	1.8
(8, $5.58 \times 10^{-6}$ )	816.4	2.5
(10, $1.51 \times 10^{-6}$ )	1175	3.1
(29, $5.26 \times 10^{-11}$ )	–	8.8

TABLE 2.2 – Computational time (in second) for both algorithms (simulated annealing and two-step approach following Strategy 2) with respect to the number of new points in the design (Nb) for a fixed minimum of  $\text{IMSE}_w$  to reach.

	Simulated annealing	Two-step algorithm
Min $\text{IMSE}_w$	$4.98 \times 10^{-6}$	$5.58 \times 10^{-6}$
Nb calls	227269	81

TABLE 2.3 – Near-optimal minimum of  $\text{IMSE}_w$  and number of calls to the objective function to reach it for the simulated annealing algorithm. The third column recalls the corresponding results associated with our two-step approach following Strategy 2.

### Case study

This case study is related to environmental monitoring. IRSN is in charge of this monitoring in order to rapidly detect and characterize any increase in radioactivity that might be the result of an incident or accident occurring at a nuclear facility. It also provides useful information to verify that nuclear activities are undertaken in adherence with the relevant regulations and to ensure that the various compartments of the environment are in a satisfactory radiological state all over the territory. This monitoring is performed by collecting continuous measurements that are real-time transmitted to the supervising center where experts analyse the results and detect even a minor change. We focus on equivalent dose rate measurements coming from 164 probes (the Teleray network) spread all over France (blue circles on Fig. 2.11, bottom). Figure 2.11, top, left, displays the Gaussian-shape histogram

of the test data<sup>1</sup>. In this study, we restrict our analysis to the question of implantation of new probes. More precisely, it is now intended to increase this network for a better environmental monitoring up to 400 probes. The strategy for such an extension depends on the target regions where the accuracy of the prediction is of prime importance; from a methodological point of view, it is therefore a problem of construction of adaptive DoEs. One of the requirements of the new network is to ensure an efficient coverage of inhabited area. We propose in what follows to integrate the population density (Fig. 2.11, bottom) in our two-step methodology to extend the initial Teleray network.

## Numerical results

The construction of the DoE first requires to identify the spatial structure of the data that characterizes the kriging model.

This identification is performed with the statistical SUNSET software developed by IRSN (Chojnacki and Ounsy, 1996). It is based on the estimation, once and for all from the initial data, of the experimental semi-variogram provided by expression (2.3) and displayed by the cross signs on Figure 2.11, top,right. It clearly indicates a spatial dependence that decreases with respect to the distance.

Two theoretical semi-variogram models (Gaussian and exponential) have been tested to represent this spatial structure and their parameters have been estimated by average least square method. The selection of the model has been performed by cross-validation (Cressie, 1993) and an exponential model of parameters ( $9 \times 10^4, 0.001$ ) has been identified (Fig. 2.11, top,right, solid line).

The criteria to optimize is constructed from the combination between the kriging estimation variance and the population density. This density comes from the IGN geographic data base BD CARTO® and has been projected on a uniform grid with a space step of  $5km$ . It corresponds to 22820 points. To avoid reducing the information related to the population density, this fine grid is used to estimate  $IMSE_w$ .

Starting from the current network of 164 probes and for sake of clarity in the results, our algorithm is applied to iteratively increase the design of 20 extra points (red circles on Fig. 2.11, bottom). It appears that the additional probes are located in the vicinity of inhabited area where few measurements have been already performed (see in the North or in the South-West of France

---

1. One measurement is above  $0.25 \mu Gy/h$ . This can be explained by the effect of the altitude

for example). As a consequence, no extra probes is added in the Rhone Valley since this area is widely covered due to nuclear installations.

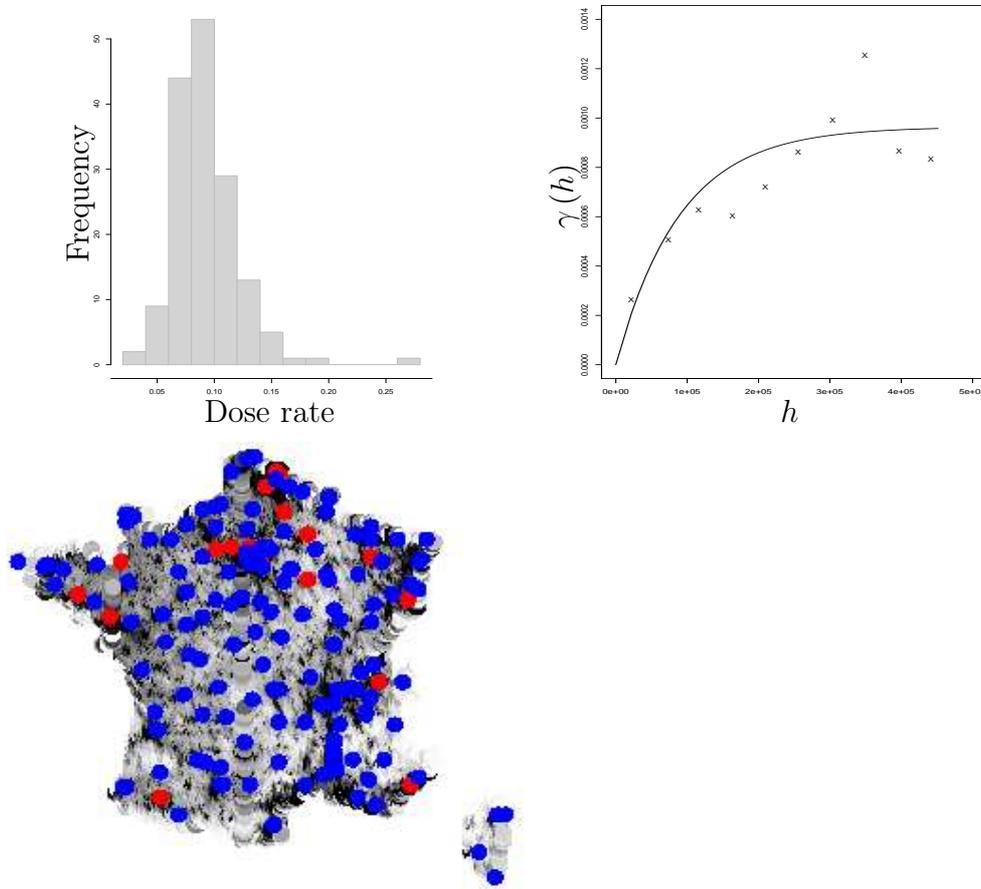


FIGURE 2.11 – Adaptive DoE integrating the population density. From top, left to bottom, left : histogram of the data, experimental and adjusted semi-variograms (the unit of the  $x$ -axis is  $m$ ), current network of 164 probes (in blue) and the 20 added probes (in red). The background colors stand for the population density (from white to black, the population density is increasing).

## 2.2.7 Conclusions

A new methodology for the construction of adaptive objective-based design of experiments has been proposed. It couples kriging theory with design of experiment optimization techniques. Its originality stands in the flexibility in the choice of the criterion to optimize that drives the process for additional points. This criterion is a weighted (Integrated) Mean Square Error defined

according to the analyst's objectives (e.g. increase the accuracy of the prediction in target regions). The question related to the stability of the underlying kriging problems has been addressed. It appeared that the covariance matrices to invert quickly become ill-conditioned due to the local refinement of the DoE in some critical regions. However, the introduction of an error variance term on their diagonal drastically reduces their condition number and therefore can be considered in the whole DoE construction procedure to ensure its stability. For industrial applications, the new procedure also integrates a computational cost saving strategy and two strategies based on the combination of the MSE and IMSE estimation have been proposed. It has then been tested on a simplified problem in order to evaluate its capability in comparison with classical approach. The results pointed out a significant decrease of the complexity of the associated algorithm. Finally, it has been successfully applied in the frame of IRSN safety studies to extend over the French territory a network of probes for environmental monitoring. Thanks to the cost reduction strategy, this study has been performed with an affordable computational cost, which was not the case with classical approach based on an optimization over the whole domain.

## Acknowledgements

The authors want to thank G. Manificat, C. Debayle and J.M. Métivier from the radiological department of IRSN for providing the data related to the equivalent dose rate and to the population density.

## Appendix. Asymptotical behavior of the condition number

For sake of simplicity in the proofs, we introduce the notations  $\forall(i, j)$ ,  $C_i^j = C(\|x_j - x_i\|_2)$  and  $C_i^* = C(\|x^* - x_i\|_2)$ . Moreover,  $\Sigma^{X^k}$  is replaced by  $\Sigma_k$ . Finally, in order to separate the influence of the number of points  $k$  and of the distance associated with the new point, the perturbation term is written as  $\tilde{V} = (k+1)\tilde{U}$ .

### A Proof of Proposition 2.2.2

$\Sigma_{k+1}$  can be written as

$$\Sigma_{k+1} = \begin{bmatrix} \Sigma_k & \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \\ \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T & C(0) \end{bmatrix}. \quad (2.33)$$

Introducing the Schur complement  $\alpha_k = C(0) - \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T \Sigma_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)$  and according to a classical result of matrix calculus,  $\Sigma_{k+1}^{-1}$  is given by

$$\Sigma_{k+1}^{-1} = \begin{bmatrix} \Sigma_k^{-1} \left( I_k + \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \alpha_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T \Sigma_k^{-1} \right) & -\Sigma_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \alpha_k^{-1} \\ -\alpha_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T \Sigma_k^{-1} & \alpha_k^{-1} \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

Combining (2.33), (2.34) and (2.24), we find

$$\begin{aligned} \text{Cond}_F^2(\Sigma_{k+1}^{1/2}) &= (C(0) + \text{Tr}(\Sigma_k)) \left( \text{Tr}(\Sigma_k^{-1}) + \text{Tr} \left( \Sigma_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \alpha_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T \Sigma_k^{-1} \right) + \alpha_k^{-1} \right), \\ &= \frac{k+1}{k} \text{Tr}(\Sigma_k) \left( \text{Tr}(\Sigma_k^{-1}) + \alpha_k^{-1} \left( \text{Tr} \left( \Sigma_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*) \mathcal{C}^{X^k}(x^*)^T \Sigma_k^{-1} \right) + 1 \right) \right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Noticing that  $\beta_k = \Sigma_k^{-1} \mathcal{C}^{X^k}(x^*)$  and  $\text{Tr}(\Sigma_k) = k C(0)$ , the previous expression leads to the expected result.

### B Proof of Proposition 2.2.3

The proof relies on the asymptotical decomposition of  $\tilde{U}$  for large  $l$ .

Let us first notice that for any semi-variogram models of  $\mathcal{V}$ , there exists  $K_{\mathcal{V}}$  such that, for any  $x_i$  and  $\mathcal{L} \geq K_{\mathcal{V}}$

$$C_i^* = C_i^1 + \sum_{n=K_{\mathcal{V}}}^{\mathcal{L}} a_{n,i}^{\mathcal{V}} \frac{1}{2^{nl}} + o\left(\frac{1}{2^{\mathcal{L}l}}\right), \quad (2.36)$$

where  $\{a_{n,i}^{\mathcal{V}}\}_{n \in \{K_{\mathcal{V}}, \dots, \mathcal{L}\}}$  is a set of real numbers. Coming back to the expression of the perturbation term (2.26), we first focus on the asymptotical behaviour of  $\alpha_k$ .

– Term  $\alpha_k$  :

From expression (2.36),  $\alpha_k$  can be written

$$\alpha_k = C(0) - \left( A_0 + \sum_{n=K_{\mathcal{V}}}^{\mathcal{L}} A_n + A_{\mathcal{L}+1} \right)^T \Sigma_k^{-1} \left( A_0 + \sum_{n=K_{\mathcal{V}}}^{\mathcal{L}} A_n + A_{\mathcal{L}+1} \right), \quad (2.37)$$

where

$$A_0 = (C_i^1, \dots, C_k^1)^T, \quad (2.38)$$

$$A_n = \left( a_{n,1}^{\mathcal{V}} \frac{1}{2^{nl}}, \dots, a_{n,k}^{\mathcal{V}} \frac{1}{2^{nl}} \right)^T, \quad (2.39)$$

and with  $\|A_{\mathcal{L}+1}\|_2 = o\left(\frac{1}{2^{\mathcal{L}l}}\right)$ . Expression (2.37) can be reformulated as

$$\alpha_k = (C(0) - A_0^T \Sigma_k^{-1} A_0) - \sum_{(i,j) \in \{0, K_{\mathcal{V}}, \dots, \mathcal{L}+1\}, i+j \geq K_{\mathcal{V}}} A_i^T \Sigma_k^{-1} A_j. \quad (2.40)$$

Noticing that  $\Sigma_k^{-1} A_0$  corresponds to the weights computed from a simple kriging at  $x_1$ ,  $\Sigma_k^{-1} A_0 = (1, 0, \dots, 0)^T$  since kriging interpolation is exact at any point of the DoE  $\{x_i\}_{i=1, \dots, k}$ . Therefore

$$A_0^T \Sigma_k^{-1} A_0 = C_1^1 = C(0), \quad (2.41)$$

and the first term of (2.40) is equal to zero.

As for the second term, since  $\alpha_k \neq 0$  (invertibility of  $\Sigma_{k+1}$ ), there exists an integer  $p_{\mathcal{V}} \geq K_{\mathcal{V}}^2$  such that

---

2.  $p_{\mathcal{V}} > K_{\mathcal{V}}$  when the first term of the sum vanishes (see the example of a Gaussian semi-variogram at the end of the section).

$$\sum_{(i,j) \in \{K_\nu, \dots, \mathcal{L}+1\}, i+j \geq K_\nu} A_i^T \Sigma_k^{-1} A_j = g_{p_\nu} \frac{1}{2^{p_\nu l}} + o\left(\frac{1}{2^{p_\nu l}}\right), \quad (2.42)$$

with  $g_{p_\nu} \neq 0$ . Therefore, the previous expression leads to the final estimation of  $\alpha_k$  that reads

$$\alpha_k = -g_{p_\nu} \frac{1}{2^{p_\nu l}} + o\left(\frac{1}{2^{p_\nu l}}\right), \quad (2.43)$$

– Perturbation term :

From (2.43) and noticing after a matricial calculus that, for large  $l$ ,  $1 + \text{Tr}(\beta_k \beta_k^T) = 1 + o(1)$ , it is straightforward that

$$\tilde{U} \sim 2^{p_\nu l}, \quad (2.44)$$

that concludes the proof.

## C Proof of Proposition 2.2.4

Similarly to the proof of Proposition 2.2.5, the key point is the asymptotical decomposition of  $\alpha_k$ . The difference is that in expression (2.40), the first term is no more equal to 0 since a simple kriging with error variance is no more exact for the points of the DoE  $\{x_i\}_{i=1, \dots, k}$ . As a result, for large enough  $l$ ,  $\alpha_k \sim 1$ .

## D Proof of Proposition 2.2.5

Similarly to Proposition 2.2.3, the proof relies of the asymptotical decomposition of  $\alpha_k$  for large  $l$ .

According to Figure 2.2, it is straightforward that

$$\|x_1 - x^*\|_2 = \frac{\sqrt{2}}{2^l}, \quad (2.45)$$

$$\|x_2 - x^*\|_2 = \|x_3 - x^*\|_2 = \sqrt{\frac{1}{2^{2l}} + \left(1 - \frac{1}{2^l}\right)^2}, \quad (2.46)$$

$$\|x_4 - x^*\|_2 = \sqrt{2} \left(1 - \frac{1}{2^l}\right). \quad (2.47)$$

Let us first focus on Gaussian semi-variograms :

– Gaussian semi-variogram :

According to the asymptotical development (i.e. for small distance  $h$ ) of the semi-variogram models, it comes in this case

$$C_1^* = c \left( 1 - \frac{2}{a^2 2^{2l}} \right) + o \left( \frac{1}{2^{2l}} \right), \quad (2.48)$$

$$C_2^* = C_3^* = c e^{-\frac{1}{a^2}} \left( 1 + \frac{2}{a^2 2^{2l}} + \frac{2}{2^{2l}} \left( \frac{1}{a^4} - \frac{1}{a^2} \right) \right) + o \left( \frac{1}{2^{2l}} \right), \quad (2.49)$$

$$C_4^* = c e^{-\frac{2}{a^2}} \left( 1 + \frac{4}{a^2 2^{2l}} + \frac{2}{2^{2l}} \left( \frac{4}{a^4} - \frac{1}{a^2} \right) \right) + o \left( \frac{1}{2^{2l}} \right). \quad (2.50)$$

Note that the previous expressions are of type (2.36) with  $(K_\nu, \mathcal{L}) = (1, 2)$ . According to (2.41)

$$\alpha_k = - \sum_{(i,j) \in \{0,1,2,3\}, i+j \geq 1} A_i^T \Sigma_4^{-1} A_j, \quad (2.51)$$

where

$$A_0 = \left( c, c e^{-\frac{1}{a^2}}, c e^{-\frac{1}{a^2}}, c e^{-\frac{2}{a^2}} \right)^T, \quad (2.52)$$

$$A_1 = \left( 0, c e^{-\frac{1}{a^2}} \frac{2}{a^2 2^{2l}}, c e^{-\frac{1}{a^2}} \frac{2}{a^2 2^{2l}}, c e^{-\frac{2}{a^2}} \frac{4}{a^2 2^{2l}} \right)^T, \quad (2.53)$$

$$A_2 = \left( -c \frac{2}{a^4 2^{2l}}, c e^{-\frac{1}{a^2}} \frac{2}{2^{2l}} \left( \frac{1}{a^4} - \frac{1}{a^2} \right), c e^{-\frac{1}{a^2}} \frac{2}{2^{2l}} \left( \frac{1}{a^4} - \frac{1}{a^2} \right), c e^{-\frac{2}{a^2}} \frac{2}{2^{2l}} \left( \frac{4}{a^4} - \frac{1}{a^2} \right) \right)^T, \quad (2.54)$$

and with  $\|A_3\|_2 = o \left( \frac{1}{2^{2l}} \right)$ . Splitting the sum in expression (2.51) with respect to the power of  $\frac{1}{2^l}$ , it remains to evaluate each term. This is performed in what follows.

**Term**  $\sum_{(i,j) \in \{0,1,2,3\}, i+j=1} A_i^T \Sigma_4^{-1} A_j$  :

Since  $\Sigma_4^{-1} A_0 = (1, 0, \dots, 0)^T$ , it comes using the expression of  $A_1$

$$A_1^T \Sigma_4^{-1} A_0 = 0. \quad (2.55)$$

Moreover, by definition the vector  $(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)^T = \Sigma_4^{-1} A_1$  satisfies :  $c\lambda_0 + c e^{-\frac{1}{a^2}} \lambda_1 + c e^{-\frac{1}{a^2}} \lambda_2 + e^{-\frac{2}{a^2}} \lambda_3 = 0$ . Therefore

$$A_0^T \Sigma_4^{-1} A_1 = 0. \quad (2.56)$$

**Term**  $\sum_{(i,j) \in \{0,1,2,3\}, i+j=2} A_i^T \Sigma_4^{-1} A_j$  :

With the same kind of calculation, one can find

$$A_0^T \Sigma_4^{-1} A_2 = A_2^T \Sigma_4^{-1} A_0 = -c \frac{2}{a^2 2^{2l}}. \quad (2.57)$$

For the term  $A_1^T \Sigma_4^{-1} A_1$ , a direct calculation using the software Mathematica for example shows that  $A_1^T \Sigma_4^{-1} A_1 \neq c \frac{4}{a^2 2^{2l}}$  which implies that

$$\sum_{(i,j) \in \{0,1,2,3\}, i+j=2} A_i^T \Sigma_4^{-1} A_j = K \frac{1}{2^{2l}}, \quad (2.58)$$

where  $K$  does not depend on  $l$ . Combining (2.55), (2.56) and (2.58), we finally find

$$\alpha_k = -\frac{K}{2^{2l}} + o\left(\frac{1}{2^{2l}}\right). \quad (2.59)$$

– Exponential semi-variogram :

The proof mimics the previous one and is therefore not fully described in the sequel. The starting point is again the asymptotical development of the exponential semi-variogram model which gives

$$C_1^* = c \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{a 2^l}\right) + o\left(\frac{1}{2^l}\right), \quad (2.60)$$

$$C_2^* = C_3^* = c e^{-\frac{1}{a}} \left(1 + \frac{1}{a 2^l}\right) + o\left(\frac{1}{2^l}\right), \quad (2.61)$$

$$C_4^* = c e^{-\frac{\sqrt{2}}{a}} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{a 2^l}\right) + o\left(\frac{1}{2^l}\right). \quad (2.62)$$

Note that in this case,  $(K_{\mathcal{V}}, \mathcal{L}) = (1, 1)$ . It leads to

$$\alpha_k = - \sum_{(i,j) \in \{0,1,2\}, i+j \geq 1} A_i^T \Sigma_4^{-1} A_j \quad (2.63)$$

where

$$A_0 = \left(c, c e^{-\frac{1}{a}}, c e^{-\frac{1}{a}}, c e^{-\frac{\sqrt{2}}{a}}\right)^T, A_1 = \left(-c \frac{\sqrt{2}}{a 2^l}, c e^{-\frac{1}{a}} \frac{2}{a 2^l}, c e^{-\frac{1}{a}} \frac{2}{a 2^l}, c e^{-\frac{\sqrt{2}}{a}} \frac{\sqrt{2}}{a 2^l}\right)^T, \quad (2.64)$$

and with  $\|A_2\|_2 = o\left(\frac{1}{2^l}\right)$ . By direct calculation, one can find

$$\sum_{(i,j) \in \{0,1,2\}, i+j=1} A_i^T \Sigma^{-1} A_j = -\frac{2\sqrt{2}c}{a} \frac{1}{2^l}, \quad (2.65)$$

therefore

$$\alpha_k = \frac{2\sqrt{2}c}{a} \frac{1}{2^l} + o\left(\frac{1}{2^l}\right). \quad (2.66)$$

That concludes the proof.

## 2.3 Application à l'étude de la fissuration mécanique

Nous terminons ce chapitre en présentant une seconde application de la méthode de planification adaptative dans le cadre de la sûreté des réacteurs nucléaires. L'objectif est ici de reconstruire le comportement local de la réponse d'un code de calcul quand nous faisons varier ses paramètres d'entrée dans leur gamme d'incertitude.

### 2.3.1 Description du contexte de l'étude

En sûreté nucléaire, les longs tubes de gainage qui entourent la matière fissile (oxyde d'Uranium) au coeur des centrales nucléaires sont des gaines de combustible. Lors d'un hypothétique accident nucléaire, ces gaines représentent la première barrière de protection contre la dispersion du combustible. Au cours du temps, de nombreux phénomènes peuvent fragiliser le matériau constituant ces gaines de combustible (irradiation, corrosion, hydruration). Il arrive que ces fragilisations provoquent une fissuration de la gaine (Figure 2.12, gauche).

Nous nous plaçons ici dans un cas simplifié en considérant un matériau ayant une microstructure composée d'une matrice métallique avec une inclusion rectangulaire (Figure 2.12, droite). Le code de calcul utilisé pour simuler la propagation de fissures est le logiciel Xper (Perales et al., 2010) développé à l'IRSN. La réponse d'intérêt est l'énergie de rupture notée  $E_{fr}$ . Pour une longueur d'inclusion  $L$  fixée, celle-ci dépend d'un paramètre incertain  $Log(r)$  où  $r$  désigne le ratio entre l'énergie de l'interface inclusion/matrice  $W_{interface}$  et l'énergie de l'inclusion  $W_{inclusion}$ . L'incertitude associée se résume à l'intervalle de variation  $[-3, 3]$ .



FIGURE 2.12 – Fissuration mécanique. A gauche, image en coupe d’une gaine de combustible avec présence de fissures, à droite, cas test simplifié (le segment blanc représente une initiation de fissure).

La durée d’une simulation sur ce cas simplifié est de quelques heures (elle peut dépasser la semaine pour le cas de la gaine). 97 simulations sur une grille régulière ont donc pu être réalisées à l’aide de Xper. Elles sont fournies sur la figure 2.13, celles-ci serviront de base de comparaison pour mesurer la qualité de la reconstruction de l’énergie de rupture à l’aide de notre plan d’expériences adaptatif. Les variations de la réponse en fonction du paramètre incertain présentent clairement deux comportements distincts. L’énergie de rupture varie très peu dans les intervalles  $[-3, -2]$  et  $[0, 3]$  qui correspondent respectivement au cas où la fissure contourne l’inclusion ou la traverse de part en part. Elle a un comportement beaucoup moins régulier dans  $[-2, 0]$  qui est une zone de transition entre 2 états où plusieurs mécanismes rentrent en compétition.

L’objectif est de capturer ces comportements locaux avec un budget de calcul limité. Nous chercherons alors à rajouter de l’information dans la zone de transition et un plan d’expériences adaptatif est approprié pour ce type de raffinement local.

### 2.3.2 Construction du plan d’expériences adaptatif

Dans cette étude, nous découplons le problème d’estimation de la structure de corrélation spatiale des données de celui de planification. A cet effet, un semi-variogramme est identifié une fois pour toute à partir des 97 simulations. La figure 2.13, droite, fournit le semi-variogramme expérimental ainsi que le modèle théorique Gaussien de paramètre  $(c, a) = (1.45e9, 2.5)$  ajusté.

La première étape dans l’application de l’algorithme de planification 2.2.2 est le choix du critère à optimiser. La zone de transition étant caractérisée par un fort gradient dans l’énergie de rupture, nous définissons un critère basé sur une MSE pondérée intégrant la dérivée estimée par Krigeage (Remarque

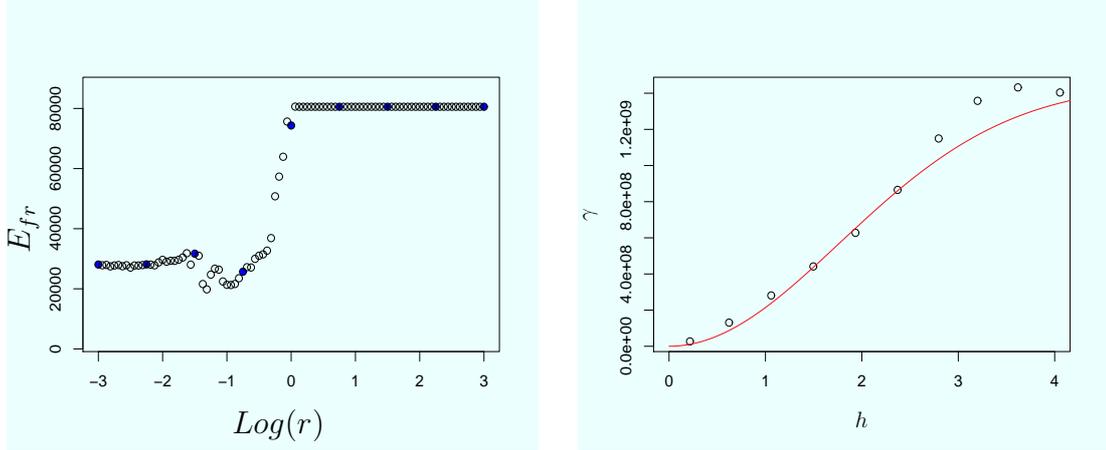


FIGURE 2.13 – Identification de la structure de corrélation spatiale des données. A gauche, le plan d’expériences initial (points bleus) et la grille de discrétisation (cercles noirs). A droite, le semi-variogramme expérimental correspondant au plan d’expériences initial (cercles noirs) ainsi que le modèle théorique ajusté (en rouge).

1.1.4) de la forme :

$$\text{MSE}_w^{X^k}(x) = \text{MSE}^{X^k}(x) (\mathcal{P}(\mathcal{Y}^{(1)}, x|X^k, Y^k))^2 \quad (2.67)$$

La figure 2.14 illustre ce critère pour un plan d’expériences à 9 points issu d’une discrétisation uniforme de  $[-3, 3]$  et qui servira à initialiser notre algorithme.

Notons que la MSE est maximale sur les bords du domaine, une planification basée uniquement sur celle-ci conduirait donc à un raffinement sur les extrémités du domaine ce qui n’est pas satisfaisant. Nous retrouvons deux pics aux extrémités de l’intervalle dans le critère  $\text{MSE}_w$ , toutefois, ils sont pondérés par la prise en compte de la dérivée qui a pour effet d’en atténuer un et de faire ressortir la zone à fort gradient. En combinant MSE et IMSE pondérées, 15 points supplémentaires sont rajoutés de façon adaptative au plan d’expériences à 9 points. La matrice de krigeage n’étant plus numériquement inversible (à cause du mauvais conditionnement) à partir du 5ième point ajouté, nous introduisons une stabilisation à l’aide d’une variance d’erreur de 1 soit  $\epsilon \sim 1e - 9$  dans l’algorithme 2.2.4.

La figure 2.15 fournit le plan d’expériences obtenu ainsi que celui associé à une planification basée sur la MSE (2.8). Comme attendu, avec notre procédure, les points sont bien rajoutés dans la zone de transition alors que la MSE conduit à une planification plus uniforme.

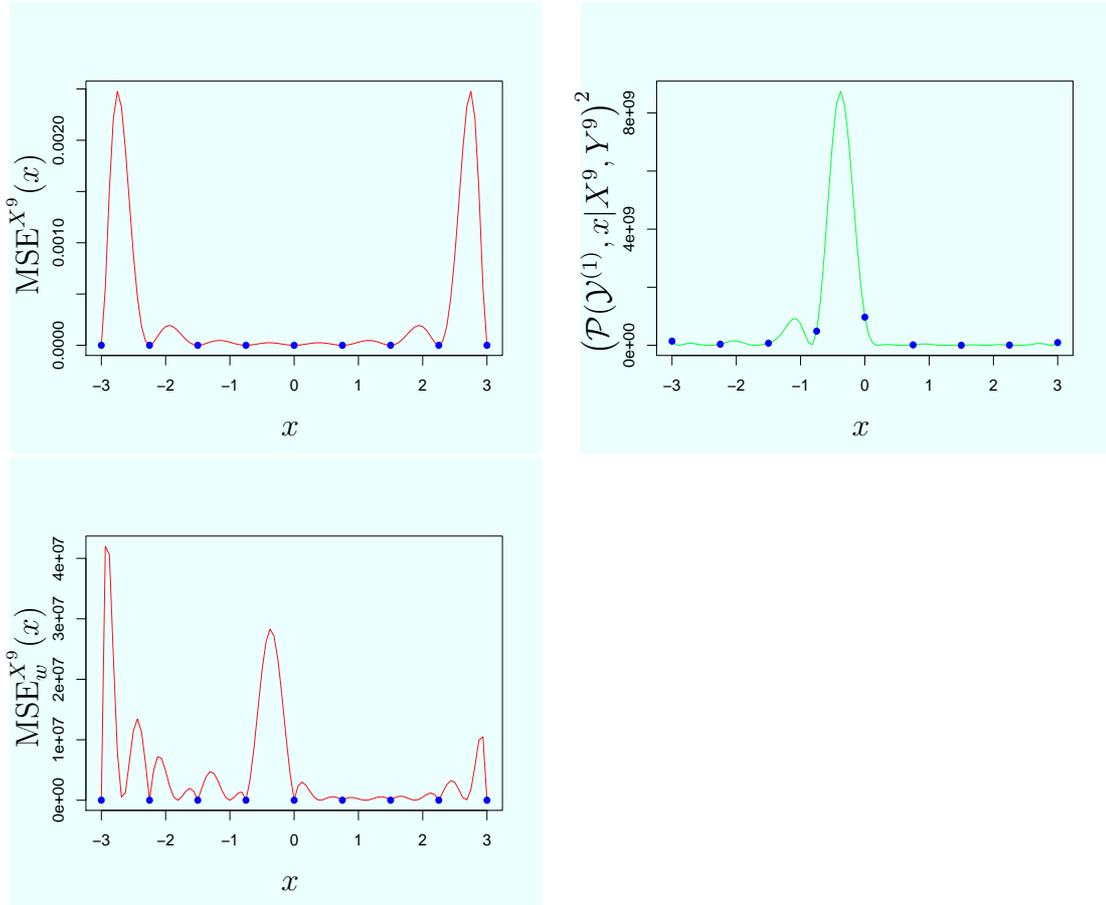


FIGURE 2.14 – Krigeage ordinaire. Les sites d'observations sont représentés par des points bleus. En haut, à gauche la  $MSE^{X^9}$  obtenue par Krigeage ordinaire, à droite,  $W$ , le carré de l'estimation de la dérivée obtenue elle aussi par Krigeage ordinaire. En bas, le critère de planification utilisé,  $MSE_w^{X^9}$ .

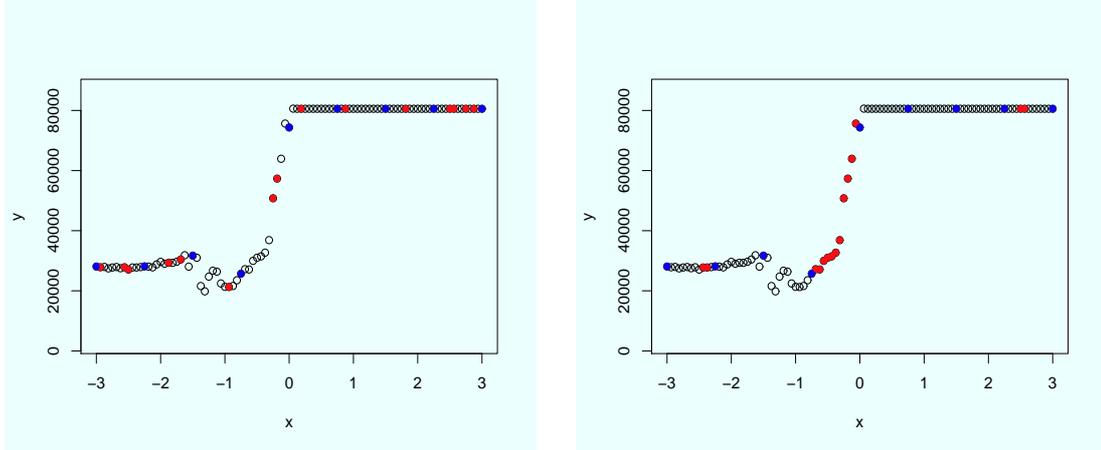


FIGURE 2.15 – Ajout de 15 points dans le plan d’expérience initial à 9 points. A gauche, planification adaptative intégrant la dérivée (avec une variance d’erreur de 1), à droite, planification basée sur la MSE. Le plan d’expériences initial à 9 points est représenté par les points bleus et les 15 nouveaux points sont en rouge.

A partir de ces deux plans d’expériences, une reconstruction par krigeage ordinaire de l’énergie de rupture est réalisée sur la grille à 97 points pour laquelle nous avons les simulations du logiciel Xper. Le tableau 2.4 fournit les erreurs associées aux deux plans ainsi qu’au plan initial à 9 points d’abord sur tout le domaine puis sur la région qui nous intéresse, c’est-à-dire la zone de transition qui correspond à l’intervalle  $[-1.75; 0.25]$ . La planification basée sur la MSE conduit à une réduction de l’erreur sur tout le domaine de 60.03% par rapport au plan à 9 points tandis que la planification intégrant la dérivée réduit cette même erreur de 58.65%. Le caractère plus uniforme du plan obtenu en se basant sur la MSE permet une meilleure estimation sur tout le domaine bien que son erreur ne soit inférieure à celle liée au plan adaptatif que de 3.35%. Maintenant si nous nous restreignons à la zone de transition, nous constatons que la planification basée sur la MSE ne réduit l’erreur que de 13.48% par rapport au plan à 9 points alors que notre planification adaptative conduit à une diminution de l’erreur de 40.19% dans la zone d’intérêt. La planification proposée améliore l’estimation dans la zone d’intérêt en permettant une diminution de 30.87% de l’erreur liée au plan basé sur la MSE tout en proposant une erreur sur tout le domaine de seulement 3.46% supérieure à celle du plan basé sur la MSE. Toutefois, avec l’introduction d’une variance d’erreur nous perdons le caractère interpolant du Krigeage ce qui ne nous permet pas de réduire davantage l’erreur obtenue.

Pour finir nous appliquons les simulations Gaussiennes séquentielles à cet exemple de fissuration. Notre objectif était alors de simuler sur la grille ré-

Erreur	PEX initial à 9 points	PEX avec MSE à (9+15) points	PEX adaptatif à (9+15) points
sur tout le domaine	85003.21	33975.56	35151.78
dans la zone d'intérêt	37962.51	32846.04	22706.52

TABLE 2.4 – Erreur (en norme  $L^2$ ) calculée à partir de la grille de simulations disponible et des prédictions obtenues par Krigeage ordinaire pour trois plans d'expériences différents : le plan d'expériences initial à 9 points, le plan d'expériences basé sur la MSE à (9 + 15) points et le plan d'expériences adaptatif intégrant la dérivée à (9 + 15) points. Cette erreur est calculée sur tout le domaine puis uniquement sur la région d'intérêt  $x \in [-1.75; 0.25]$ .

gulière à 97 points. Pour cela, nous partons du plan d'expériences adaptatif à 24 points obtenu en intégrant la dérivée. Il vient alors que sans ajout de variance d'erreur, aucune simulation n'est possible en partant de ce plan d'expérience. Si nous cherchons à simuler à partir du plan d'expériences initial à 9 points, les problèmes d'inversibilité apparaissent en moyenne à partir du 15ième point en raison du conditionnement très élevé de la matrice de covariance qui est de l'ordre de  $10^{18}$ . La stratégie de stabilisation devient donc obligatoire ici. Toutefois, la valeur de la variance d'erreur doit être choisie de façon heuristique en fonction de la variance des données. De plus, même dans le cas d'une faible variance d'erreur, la reconstruction par Krigeage n'est plus interpolante et peut diminuer le gain en précision apporté par le plan d'expériences adaptatif. Nous proposons donc dans la partie suivante une nouvelle procédure de stabilisation basée sur la construction d'un préconditionneur à partir d'une représentation multi-échelles de la matrice de covariance.

## Deuxième partie

### Préconditionneur à base de schémas de subdivision



# Introduction de la partie II

Un point clef de la reconstruction de données par Krigeage est la résolution du système linéaire de Krigeage qui fournit les poids de la méthode au point d'estimation. Dans cette partie, nous nous limitons au problème du Krigeage simple qui fait intervenir la matrice de covariance notée pour simplifier  $\Sigma$  quand le plan d'expériences est fixe. Compte tenu de l'expression des modèles usuels de covariance, la matrice  $\Sigma$  décroît autour de sa diagonale. Son conditionnement dépend fortement de la distribution des points d'échantillonnage et, en particulier, sa plus petite valeur propre tend vers 0 quand deux points d'échantillonnage se rapprochent. Sans précaution particulière, il est alors paradoxal de constater que le rajout de points d'échantillonnage peut dégrader la qualité numérique de la prediction.

La forme de la matrice de covariance rapproche l'opérateur linéaire associé des opérateurs à noyaux  $f \mapsto \int C(x, y)f(y)dy$ . Sous certaines hypothèses de décroissance sur  $C$  et ses dérivées, les décompositions en ondelettes peuvent être utilisées pour factoriser ces opérateurs à noyaux et préconditionner les matrices qui leurs sont associées (Meyer (1990), Kahane and Lemarié (1995)).

Dans cette partie, nous proposons d'utiliser des schémas de subdivision (Dyn, 1992) pour préconditionner la matrice du système linéaire de Krigeage. Ces schémas sont plus flexibles que les algorithmes multi-échelles à base d'ondelettes biorthogonales et les décompositions multi-échelles de Harten (Harten, 1996) permettent de construire une structure hiérarchique compatible avec la grille d'échantillonnage de Krigeage. Nous introduisons donc un algorithme de préconditionnement multi-échelles pour le problème de Krigeage non contraint par la géométrie. Il est ensuite associé à une approche multi-grille pour l'approximation numérique des poids de Krigeage. Une analyse est effectuée en dimension 1 sur grille régulière puis des implémentations numériques sont effectuées pour évaluer l'efficacité du préconditionneur. Elles sont également étendues au cas de grilles non régulières. Enfin, une application au cas de la fissuration mécanique est réalisée.

# Rappels sur les méthodes de résolution itératives et multigrilles

Ce chapitre est consacré à un rappel sur les méthodes itératives et multigrilles qui seront utilisées dans la résolution du système de Krigeage préconditionné. Une attention particulière est portée au cas où le passage entre grilles se fait via des méthodes multi-échelles à base de schémas de subdivision.

## 2.4 Résolution de systèmes linéaires et méthodes itératives

La matrice  $A \in \mathcal{G}l(n)$  et le vecteur  $b \in \mathbb{R}^n$  étant donnés, une méthode itérative pour la résolution du système  $Ax = b$  consiste à construire une suite  $(x_k)$ ,  $k \in \mathbb{N}$  telle que  $\lim_{k \rightarrow +\infty} (x_k) = x$ .

Nous distinguons généralement deux familles de méthodes itératives :

1. Méthodes itératives de type point fixe :

Elles sont obtenues en remplaçant le problème  $Ax = b$  par un problème de point fixe linéaire, c'est-à-dire de la forme  $x = Bx + c$ . Nous appliquons alors les itérations de point fixe qui s'écrivent :  $x_{k+1} = Bx_k + c$ ,  $x_0$  étant choisi dans  $\mathbb{R}^n$ . La convergence de la méthode est directement liée à  $\rho(B)$ , le rayon spectral de la matrice  $B$  et  $\rho(B) < 1$  est une condition nécessaire et suffisante de convergence pour toute condition initiale  $x_0$ . La vitesse de convergence de la suite  $x_k$  vers sa limite  $x$  est d'autant plus rapide que  $\rho(B)$  est petit.

2. Méthodes itératives de type descente

Elles sont obtenues en identifiant la solution de  $Ax = b$  avec la solution d'un problème de minimisation d'une fonctionnelle  $J$  définie sur  $\mathbb{R}^n$ . La méthode de résolution consiste alors à construire une suite  $(x_k)$ ,  $k \in \mathbb{N}$  telle que  $J(x_k)$  décroît. Le point  $x_{k+1}$  est généralement construit à partir de  $x_k$  en choisissant une direction de descente  $p_k$  et un pas de descente  $\alpha_k$  :  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ . Nous retombons sur une équation de la forme  $x_{k+1} = B_k x_k + c_k$  mais la matrice d'itération  $B_k$  dépend

naturellement de l'indice d'itération. La convergence de la méthode dépend du produit  $\prod_{k \in \mathbb{N}} B_k$ .

Dans la suite de ce chapitre, nous nous concentrons sur la méthode de Richardson qui est une méthode itérative de descente. Elle s'écrit :

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k(b - Ax_k) \quad (2.68)$$

ce qui en fait une méthode appliquant une direction de descente colinéaire au résidu  $r_k = b - Ax_k$ , de pas  $\alpha_k$ .

La convergence de la méthode de Richardson est associée aux matrices  $B_k = (Id - \alpha_k A)$ , où  $Id$  est la matrice identité dans  $\mathbb{R}^n$  et à la norme de leur produit. Sachant que si  $\mathcal{L} \in Sp(A)$ , alors  $(1 - \alpha_k \mathcal{L}) \in Sp(B_k)$ , le rayon spectral de  $B_k$  s'étudie facilement à partir de celui de  $A$ .

Il est clair que  $\rho(Id - \alpha_k A) < 1$  n'est possible que si les valeurs propres de  $A$  sont toutes de même signe. Nous supposons donc, à partir de maintenant que les valeurs propres  $\mathcal{L}$  de  $A$  sont toutes positives et encadrées par  $\mathcal{L}_{max}$  et  $\mathcal{L}_{min}$ ,  $0 \leq \mathcal{L}_{min} \leq \mathcal{L} \leq \mathcal{L}_{max}$ . Si on souhaite minimiser  $|1 - \alpha_k \mathcal{L}|$  quand  $\mathcal{L}$  varie à l'intérieur de l'intervalle  $[\mathcal{L}_{min}, \mathcal{L}_{max}]$ , un calcul élémentaire montre que  $\max(|1 - \alpha_k \mathcal{L}|)$  est minimal pour  $\alpha_k = \frac{2}{\mathcal{L}_{min} + \mathcal{L}_{max}}$  et que ce maximum vaut alors  $\rho = \frac{\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}} - 1}{\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}} + 1}$ . Bien sûr,  $\rho < 1$  mais cette expression montre que  $\rho$  sera d'autant plus petit que le rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  sera proche de 1. Le rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  dépend de la matrice  $A$  (quand  $A$  est une matrice normale,  $\frac{\mathcal{L}_{min}}{\mathcal{L}_{max}} = cond_2(A)$ ). Quand ce rapport est très grand, la valeur optimale de  $\alpha_k$  conduit à un rayon spectral  $\rho$  proche de 1 et donc à une vitesse de convergence médiocre. Les stratégies multigrilles et de préconditionnement ont pour objectif, à chaque étape, de ramener ce rapport proche de 1 sans coût significatif de calcul supplémentaire.

Le principe des méthodes multigrilles est d'utiliser une méthode de résolution itérative sur une grille fine, de changer de niveau dès que la convergence stagne et de répéter ce procédé jusqu'à un niveau plus grossier pour lequel le système puisse être résolu.

La base des algorithmes multigrilles est un procédé à deux grilles appliqué récursivement. Nous allons donc détailler le procédé de résolution pour une méthode à deux grilles. Pour cela, en notant  $A_j x_j = b_j$  le système matriciel à résoudre sur la grille  $j$ , nous effectuons les étapes suivantes.

1. Effectuer  $k$  itérations de la méthode itérative de notre choix pour résoudre le système  $A_j x_j = b_j$ .

Nous obtenons  $\overline{x_j} = x_j^{[k]}$ ,

2. Calculer le résidu à l'itération  $k$  :

$$r_j = b_j - A_j \overline{x_j}$$

3. Projeter ce résidu sur la grille grossière  $j - 1$  en utilisant l'opérateur de restriction  $\mathcal{R}$  tel que :

$$r_{j-1} = \mathcal{R}r_j$$

L'opérateur de restriction permet de passer d'un vecteur fin à un vecteur grossier.

4. Résoudre sur la grille grossière, à l'aide d'une méthode directe, le système

$$A_{j-1}e_{j-1} = r_{j-1}$$

où pour tout  $j$ , l'erreur  $e_j$  représente la différence entre la solution courante  $\overline{x}_j$  du système et la solution exacte  $x_j$ .

5. Calculer l'erreur sur la grille fine  $j$  en utilisant l'opérateur de prolongement  $\mathcal{P}$  tel que :

$$e_j = \mathcal{P}e_{j-1}$$

L'opérateur de prolongement sert de passage d'un vecteur grossier à un vecteur fin.

6. Corriger la solution  $\overline{x}_j$  obtenue par résolution itérative sur la grille fine :

$$\overline{x}_j = \overline{x}_j + e_j$$

7. Effectuer  $k$  itérations de la méthode itérative choisie en prenant pour solution initiale  $\overline{x}_j$ .

Cette procédure peut être étendue au cas multigrilles (avec plus de deux grilles) en remplaçant la résolution sur la grille grossière, étape 4, par une nouvelle méthode sur deux grilles. Plus précisément, si la grille  $j - 1$  n'est pas suffisamment grossière pour permettre la résolution du système de l'étape 4 nous introduisons un nouveau cycle afin de réduire davantage la taille du système à résoudre. Ensuite si la taille du système le permet nous pouvons résoudre le système par une méthode directe ou poursuivre en introduisant un nouveau cycle.

Une méthode multigrille est dite en V-cycle (figure 2.16) lorsqu'en partant de la grille la plus fine, nous descendons jusqu'à la plus grossière pour résoudre directement le système de ce niveau puis nous remontons jusqu'à la grille la plus fine. En descendant les niveaux, le système traité est de plus en plus petit en terme de nombre d'inconnues. L'objectif est donc d'atteindre un niveau suffisamment grossier pour que le système correspondant soit résolu directement et de remonter en corrigeant la solution approchée de chaque niveau.

Il existe une extension de ces V-cycles à des cycles plus complexes. Les V-cycles se basent sur une unique correction qui provient de la résolution

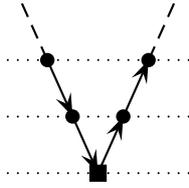


FIGURE 2.16 – V-cycle à trois grilles. Les disques noirs représentent l'utilisation d'une méthode itérative et le carré noir représente une résolution directe. Les niveaux correspondants aux trois différentes grilles sont représentés par des droites en pointillés.

directe effectuée sur le niveau le plus grossier alors que les W-cycles reposent sur plusieurs corrections séparées les unes des autres par une remontée sur un ou plusieurs niveaux. La figure 2.17 présente ce type de méthode multigrilles.

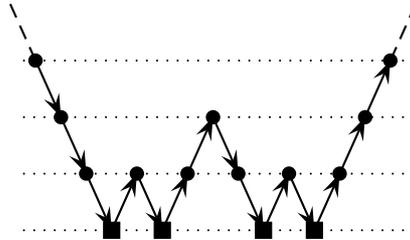


FIGURE 2.17 – W-cycle à quatre grilles. Un disque noir représente l'utilisation d'une méthode itérative et un carré noir représente une résolution directe. Les niveaux correspondants aux quatre différentes grilles sont représentés par des droites en pointillés.

Comme dans le cas d'un V-cycle, à chaque passage sur le niveau le plus grossier le système correspondant est résolu directement. Le W-cycle permet ainsi d'améliorer la correction remontée sur les niveaux les plus fins et donc de fournir une solution plus proche de la solution exacte du système initial. Cependant, l'amélioration de cette solution se fait au détriment du coût de calcul puisqu'un W-cycle fait davantage appel à la méthode itérative et ce sur des niveaux plus ou moins fins.

Les algorithmes multigrilles sont pilotés par deux opérateurs de restriction et de prolongement. Dans la section suivante, nous introduisons deux exemples de construction de ces opérateurs dans le cadre des méthodes multi-échelles.

Revenons maintenant à l'utilisation des méthodes itératives pour la résolution de système. Essentiellement, dans une méthode multigrille le coefficient  $\alpha_k$  (éq. 2.68) est optimisé à chaque étape  $k$  pour un intervalle  $[\mathcal{L}_{min,k}, \mathcal{L}_{max,k}]$  avec  $\frac{\mathcal{L}_{max,k}}{\mathcal{L}_{min,k}} < \frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  de façon à obtenir sur l'intervalle  $[\mathcal{L}_{min,k}, \mathcal{L}_{max,k}]$  une contraction maximale de l'erreur. Par projection sur une grille différente, l'intervalle de valeurs propres considérées se trouve modifié à chaque itération.

Dans une méthode de préconditionnement, certaines des valeurs propres du système initial sont renormalisées afin de réduire à nouveau le rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max,k}}{\mathcal{L}_{min,k}}$ .

Une vision particulièrement claire de ce jeu de découpage/changement de grille (base)/renormalisation est donnée quand une analyse multirésolution est utilisée.

## 2.5 Analyse multirésolution

Dans cette thèse, nous nous concentrons sur les analyses multirésolutions dyadiques, c'est-à-dire associées à un facteur de dilatation de la forme  $2^{-j}$ ,  $j \in \mathbb{Z}$ . Une analyse multirésolution (Harten (1996), Meyer (1990)) est définie par deux suites  $\{\mathcal{V}_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$  et  $\{P_{\mathcal{V}_j}\}_{j \in \mathbb{Z}}$  où les espaces  $\mathcal{V}_j$  sont des espaces fonctionnels et les opérateurs  $P_{\mathcal{V}_j}$  des opérateurs surjectifs définis d'un espace fonctionnel  $F$  dans  $\mathcal{V}_j$ . Ces suites satisfont les propriétés suivantes :

- Les espaces  $\mathcal{V}_j$  s'emboîtent les uns dans les autres :

$$\forall j \in \mathbb{Z}, \mathcal{V}_j \subset \mathcal{V}_{j+1}$$

- Un facteur de dilatation permet le passage entre deux niveaux successifs :

$$f(2^j x) \in \mathcal{V}_j \Rightarrow f(2^{j+1} x) \in \mathcal{V}_{j+1}$$

- Les opérateurs  $P_{\mathcal{V}_j}$ ,  $j \in \mathbb{Z}$  s'emboîtent :

$$\forall j \in \mathbb{Z}, P_{\mathcal{V}_j} f = 0 \Rightarrow P_{\mathcal{V}_{j-1}} f = 0$$

A partir d'une base de  $\mathcal{V}_j$  pour chaque  $j$ , une nouvelle suite  $\{V^j\}_{j \in \mathbb{Z}}$  d'espaces séparables en bijection avec  $\{\mathcal{V}_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$  est introduite. Elle correspond aux suites des coordonnées de  $P_{\mathcal{V}_j} f$ ,  $f \in F$  dans une base choisie. Cette nouvelle suite d'espaces permet de faire le lien entre le formalisme analyse multirésolution continu (Meyer, 1990) et le formalisme analyse multirésolution discret (Harten, 1996). Ainsi, de la même façon que nous avons défini un opérateur de projection connectant un espace fonctionnel  $F$  à  $\{\mathcal{V}_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$ , nous définissons une nouvelle suite d'opérateurs de discrétisation  $\{D_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$  reliant  $F$  à  $\{V^j\}_{j \in \mathbb{Z}}$  qui vérifie la propriété d'emboîtement des opérateurs énoncée plus haut. Pour caractériser complètement une analyse multi-échelles, il reste à

définir les deux opérateurs qui permettent de faire le lien entre deux espaces de niveaux successifs  $V^j$  et  $V^{j+1}$ . Le premier est un opérateur de décimation,  $D_{j+1}^j$ , et associe à tout élément de  $D_{j+1}f \in V^{j+1}$  l'élément  $D_j f \in V^j$  (le caractère d'emboîtement et la linéarité de l'opérateur  $D_j$  font que la définition de  $D_{j+1}^j$  est indépendante de l'opérateur de prolongement). Le second est un opérateur de prédiction,  $P_j^{j+1}$ , qui permet de passer de  $V^j$  à  $V^{j+1}$ . C'est un inverse à droite de  $D_{j+1}^j$  au sens où  $D_{j+1}^j P_j^{j+1} = Id_{V^j}$ , avec  $Id_{V^j}$  qui représente l'identité dans  $V^j$ . En général,  $P_j^{j+1} D_{j+1}^j \neq Id_{V^{j+1}}$  et nous définissons alors les détails de niveau  $j$  par  $df^j = D_{j+1}f - P_j^{j+1} D_j f$ . La connaissance de  $D_{j+1}f$  est alors équivalente à celle du couple  $(D_j f, df^j)$  qui constitue une décomposition sur deux échelles. En itérant cette décomposition sur plusieurs niveaux nous obtenons une décomposition multi-échelle.

Le formalisme en ondelettes (Meyer (1990), Daubechies (1992)) fournit une première famille de décompositions multi-échelles. Nous distinguons en particulier les analyses multirésolutions orthogonales et les analyse biorthogonales qui fournissent des bases orthogonales ou bi-orthogonales de la plupart des espaces fonctionnels. Ces bases sont généralement invariantes par translation. Les versions discrètes de ces décompositions correspondent à des paires de filtres en quadrature (QMF) (Vetterli, 1992). Même si les algorithmes à base d'ondelettes sont très utilisés, la contrainte d'invariance par translation est parfois très restrictive.

Les approches d'origine discrète (Harten, 1996) permettent de s'affranchir de cette contrainte. Ces approches sont fortement reliées aux schémas de subdivision dont les versions interpolantes font l'objet du paragraphe suivant.

### 2.5.1 Analyse multi-échelles et schémas de subdivision

Les schémas de subdivision sont des outils classiques utilisés dans le domaine du traitement du signal ou de la reconstruction de courbe (Dyn, 1992). Un schéma de subdivision,  $S$ , est défini de la façon suivante :

$$\{f_k\}_{k \in \mathbb{Z}} \in l^\infty(\mathbb{Z}) \mapsto \{(Sf)_k\}_{k \in \mathbb{Z}} \in l^\infty(\mathbb{Z}) \quad \text{avec} \quad (Sf)_k = \sum_{l \in \mathbb{Z}} a_{k-2l} f_l.$$

où  $\{a_m\}_{m \in \mathbb{Z}}$  représente le masque du schéma de subdivision.

Notons que si  $\{f_k\}_{k \in \mathbb{Z}} \in V^j$ , la relation précédente peut être utilisée pour relier deux niveaux de résolution successifs d'une analyse multi-échelles. Un schéma de subdivision est donc à rapprocher d'un opérateur de prédiction sans pour autant définir au préalable des espaces fonctionnels d'une analyse multirésolution comme nous l'avons fait dans le cadre du formalisme en ondelettes. Cette prédiction dépend uniquement du masque qui pourra être ajusté en fonction de la nature de la fonction à étudier.

Dans notre travail, nous nous concentrons sur un opérateur de discrétisation construit par valeur aux points c'est-à-dire

$$f \in C^0(\mathbb{R}) \mapsto \{(D_j f)_k\}_{k \in \mathbb{Z}} \in V^j \quad \text{avec} \quad (D_j f)_k = f_k^j = f(k2^{-j})$$

où  $X^j = \{k2^{-j}, k \in \mathbb{Z}\}$  représente une discrétisation dyadique de l'axe réel.

Il existe de nombreuses façons de construire le masque du schéma de subdivision (Arandiga et al. (1999a), Arandiga et al. (1999b), Amat et al. (2001), Baccou and Liandrat (2005), Baccou and Liandrat (2012)). Ici, nous nous plaçons dans le cas de schémas interpolants de Lagrange (Deslauriers and Dubuc, 1987) décrits par l'algorithme suivant :

**Algorithme 2.5.1**

Pour tout  $k \in \mathbb{Z}$ ,

$$\begin{cases} (Sf^j)_{2k} = f_k^j, \\ (Sf^j)_{2k+1} = \sum_{m=-l}^{r-1} L_m^{l,r}(-\frac{1}{2}) f_{k+m+1}^j. \end{cases}$$

avec

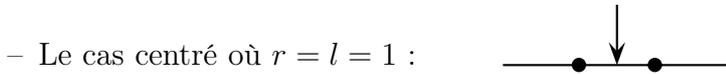
$$L_m^{l,r}(x) = \prod_{n=-l, n \neq m}^{r-1} \frac{x - n}{m - n}$$

où  $l$  et  $r$  désigne le nombre de points à gauche et à droite dans le stencil d'interpolation pour la prédiction en  $(2k + 1)2^{-j}$ .

Exemples de schémas de Lagrange

Nous décrivons, dans ce paragraphe, le calcul des coefficients du masque d'un schéma de Lagrange correspondant à des stencils à 2 et 4 points.

Nous commençons par un stencil à 2 points, où  $l + r = 2$ . Deux stencils sont alors envisageables :

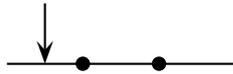


Dans ce cas, le schéma de subdivision  $S_{1,1}$  suit l'algorithme :

**Algorithme 2.5.2**

Pour tout  $k \in \mathbb{Z}$ ,

$$\begin{cases} (S_{1,1}f^j)_{2k} = f_k^j, \\ (S_{1,1}f^j)_{2k+1} = \frac{1}{2}f_k^j + \frac{1}{2}f_{k+1}^j. \end{cases}$$

- Le cas décentré où  $l = 0$  et  $r = 2$  :   
Le schéma de subdivision  $S_{0,2}$  peut se définir par l'algorithme :

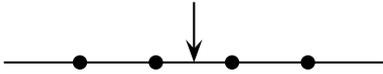
**Algorithme 2.5.3**

Pour tout  $k \in \mathbb{Z}$ ,

$$\begin{cases} (S_{0,2}f^j)_{2k} = f_k^j, \\ (S_{0,2}f^j)_{2k+1} = -\frac{1}{2}f_k^j + \frac{3}{2}f_{k+1}^j. \end{cases}$$

Si  $l = 2$  et  $r = 0$  il suffit de symétriser les valeurs des coefficients du masque, nous obtenons alors un masque qui vaut  $(-\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$  au lieu de  $(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2})$ .

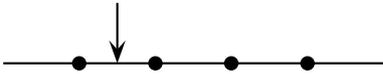
Nous décrivons maintenant le calcul des coefficients du masque d'un schéma de Lagrange correspondant à un stencil à 4 points, où  $l+r = 4$ . Nous distinguons trois différents stencils à considérer pour le calcul du masque :

- Le cas centré où  $r = l = 2$  :   
Dans ce cas, le schéma de subdivision  $S_{2,2}$  suit l'algorithme ci-après :

**Algorithme 2.5.4**

Pour tout  $k \in \mathbb{Z}$ ,

$$\begin{cases} (S_{2,2}f^j)_{2k} = f_k^j, \\ (S_{2,2}f^j)_{2k+1} = -\frac{1}{16}f_{k-1}^j + \frac{9}{16}f_k^j + \frac{9}{16}f_{k+1}^j - \frac{1}{16}f_{k+2}^j. \end{cases}$$

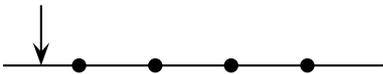
- Le cas décentré où  $l = 1$  et  $r = 3$  :   
Le schéma de subdivision  $S_{1,3}$  est alors défini par l'algorithme :

**Algorithme 2.5.5**

Pour tout  $k \in \mathbb{Z}$ ,

$$\begin{cases} (S_{1,3}f^j)_{2k} = f_k^j, \\ (S_{1,3}f^j)_{2k+1} = \frac{5}{16}f_k^j + \frac{15}{16}f_{k+1}^j - \frac{5}{16}f_{k+2}^j + \frac{1}{16}f_{k+3}^j. \end{cases}$$

Si nous avons  $l = 3$  et  $r = 1$  alors les valeurs des coefficients du masque sont symétrisées, c'est-à-dire nous avons un masque qui vaut  $(\frac{1}{16}, -\frac{5}{16}, \frac{15}{16}, \frac{5}{16})$  au lieu de  $(\frac{5}{16}, \frac{15}{16}, -\frac{5}{16}, \frac{1}{16})$ .

- Le cas extrapolé où  $l = 0$  et  $r = 4$  :   
Cette configuration nous conduit à l'algorithme de subdivision ci-dessous :

**Algorithme 2.5.6**

Pour tout  $k \in \mathbb{Z}$ ,

$$\begin{cases} (S_{0,4}f^j)_{2k} = f_k^j, \\ (S_{0,4}f^j)_{2k+1} = -\frac{5}{16}f_{k+1}^j + \frac{21}{16}f_{k+2}^j - \frac{35}{16}f_{k+3}^j + \frac{35}{16}f_{k+4}^j. \end{cases}$$

Si  $l = 4$  et  $r = 0$ , les coefficients du masque sont  $(\frac{35}{16}, -\frac{35}{16}, \frac{21}{16}, -\frac{5}{16})$ .

En définissant l'opérateur de décimation  $D_{j+1}^j$  comme  $\forall k \in \mathbb{Z}, (D_{j+1}^j f^{j+1})_k = f_k^j$  et en combinant avec l'algorithme précédent, nous pouvons alors définir une procédure de décomposition qui transforme  $f^{j+1} \in V^{j+1}$  en  $\{f^j, df^j\}$  avec  $\forall k \in \mathbb{Z}, df_k^j = f_{2k+1}^{j+1} - (Sf^j)_{2k+1}$ .

Cette décomposition revient à multiplier la séquence de points  $f^{j+1}$  par une matrice de passage construite à partir des coefficients du masque du schéma de subdivision. Plus précisément, si l'on part d'une discrétisation dyadique associée à  $j = 2$ , la décomposition de la séquence  $f^3$  à l'aide d'un schéma à 2 points revient à effectuer la multiplication matricielle  $\mathbf{P}f^3$  où

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Nous avons de même

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.69)$$

De même dans le cas d'un schéma à 4 points,

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{5}{16} & 1 & -\frac{15}{16} & 0 & \frac{5}{16} & 0 & -\frac{1}{16} & 0 & 0 \\ \frac{1}{16} & 0 & -\frac{9}{16} & 1 & -\frac{9}{16} & 0 & \frac{1}{16} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{16} & 0 & -\frac{9}{16} & 1 & -\frac{9}{16} & 0 & \frac{1}{16} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{16} & 0 & \frac{5}{16} & 0 & -\frac{15}{16} & 1 & -\frac{5}{16} \end{pmatrix}$$

La figure 2.18 illustre le processus de décomposition à l'aide des schémas de subdivision décrits précédemment. Il apparaît que les détails non négligeables sont localisés dans la zone à fort gradient de la fonction.

Afin de garantir la stabilité de la prédiction, une étape clé dans l'analyse théorique des schémas de subdivision est l'étude de leur convergence. La définition suivante revient sur cette notion importante.

**Définition 2.5.1** *Convergence d'un schéma de subdivision :*

Un schéma de subdivision  $S$  est dit  $L^\infty$  - convergent si pour toute séquence  $\{f_k^0\}_{k \in \mathbb{Z}}$ , il existe une fonction continue  $f$  telle que :

$$\forall \epsilon, \exists J \text{ t.q } \forall j \geq J :$$

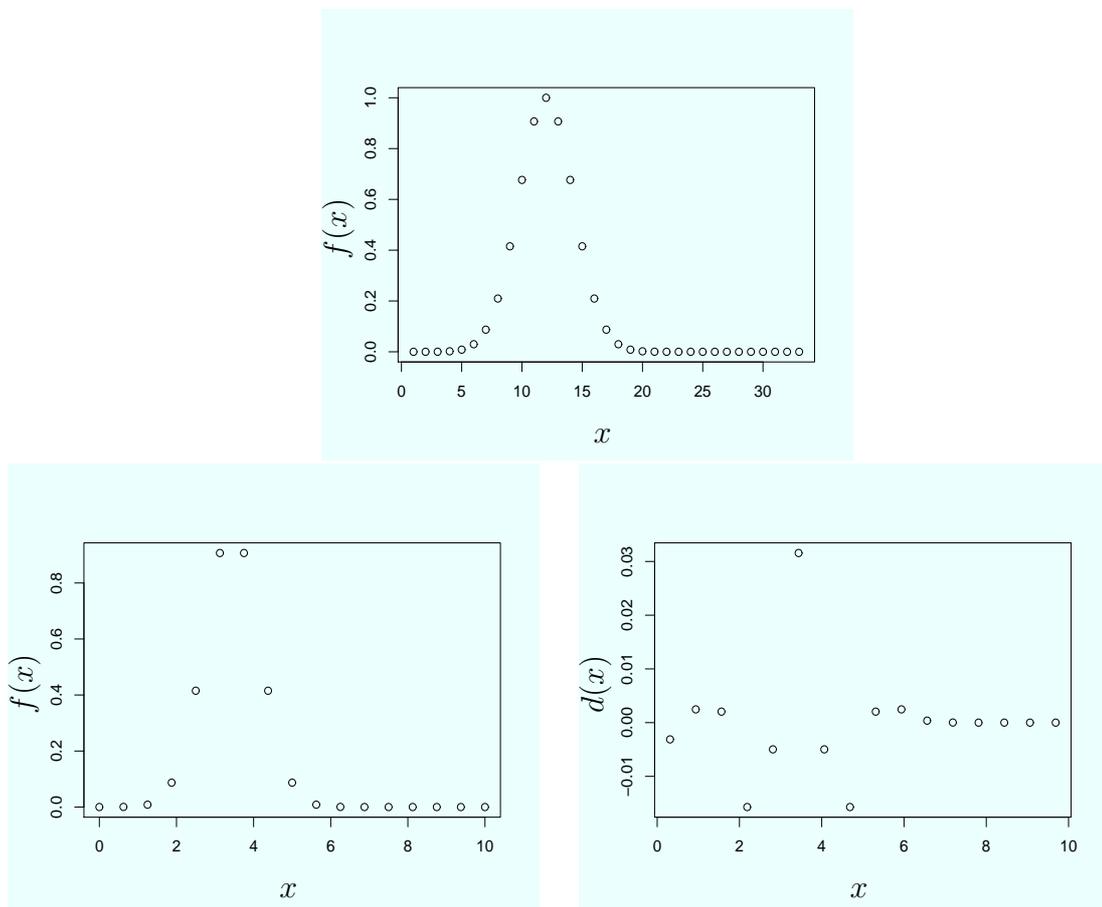


FIGURE 2.18 – Décomposition d’une fonction 1D à partir d’un schéma de subdivision. En haut, la fonction monodimensionnelle  $f$  à un niveau  $j + 1$ . En bas, la décomposition de  $f$  sur un niveau plus grossier. A gauche, la fonction  $f$  au niveau  $j$  et à droite, les détails associés.

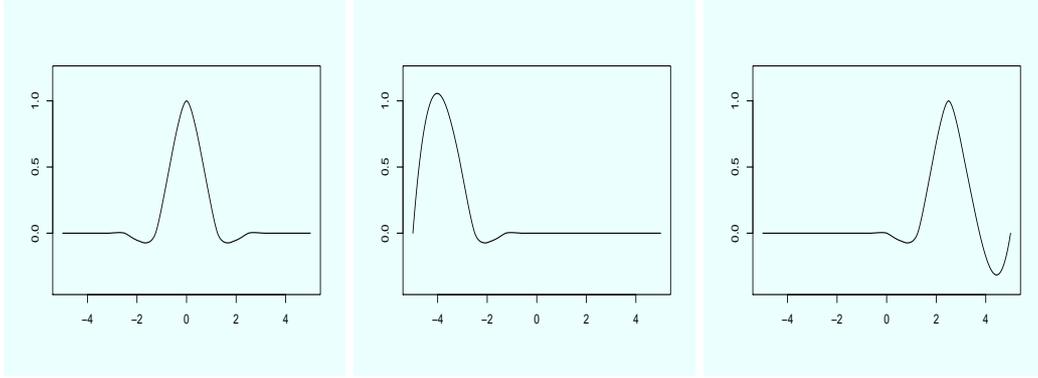


FIGURE 2.19 – Exemples de fonctions limites pour un schéma de Lagrange centré (figure de gauche), puis décentré (les deux figures de droite). Nous utilisons un stencil à 4 points.

$$\|S^j f_k^0 - f(\frac{\cdot}{2^j})\|_\infty \leq \epsilon,$$

où  $S^j$  représente le schéma de subdivision  $S$  appliqué  $j$  fois.

Cette dernière dans le cas des schémas de type Lagrange a fait l'objet de nombreux travaux et ne sera pas décrite ici. Nous nous référerons à Dyn (1992) pour plus de détails. Nous donnons simplement sur la figure 2.19 quelques exemples de fonctions limites obtenues à partir de la séquence initiale  $\{f_k^0 = \delta_{0,k}\}_{k \in \mathbb{Z}}$ . Muni d'un stencil à 4 points, nous utilisons un schéma de Lagrange centré pour la figure de gauche puis décentré pour les deux autres. Ces fonctions limites permettent alors de faire le lien entre le formalisme discret de Harten et le formalisme en ondelettes.

Nous abordons dans la section suivante le couplage entre l'algorithme multigrille introduit dans la section 2.4 et les méthodes multi-échelles à base de schémas de subdivision.

## 2.5.2 Couplage résolution multigrilles et méthodes multi-échelles

Pour les applications numériques, nous devons adapter les constructions décrites plus haut à des suites de longueur finie et à des fonctions à support sur un intervalle borné.

Nous commençons donc par préciser la construction multi-échelles que nous utiliserons :

1. L'espace  $F$  est l'espace des fonctions continues sur  $[0, 1]^3$ ,
2. Pour tout  $j \in \mathbb{Z}$  on appelle  $X^j$  la grille dyadique des réels de la forme  $k2^{-j}$ ,  $0 \leq k \leq 2^j - 1$ ,
3.  $\mathcal{V}_j$  désigne l'espace des fonctions continues et périodiques sur  $[0, 1]$ , à valeurs réelles, telles que leur restriction à chaque intervalle  $[k2^{-j}, (k+1)2^{-j}]$  est une fonction affine,
4.  $P_{\mathcal{V}_j}$  associe à toute fonction de  $F$  la fonction de  $\mathcal{V}_j$  qui l'interpole aux points de la grille  $X^j$ ,
5.  $D_j$  est l'opérateur d'échantillonnage sur la grille  $X^j$ ,
6.  $V^j$  est l'ensemble des suites  $\{(D_j f)_k\}_{k \in \{0, \dots, 2^j - 1\}}$ ,  $f \in F$ ,
7.  $D_{j+1}^j$  est l'opérateur de sous échantillonnage
8.  $P_j^{j+1}$  est un opérateur de subdivision

L'algorithme multigrille s'écrit alors :

1. Résolution partielle de  $A_j x_j = b_j$ 
  - (a) Appliquer la transformation de décomposition multi-échelles au vecteur  $x_j$  (on notera  $\tilde{x}_j = \mathbf{P}x_j$ ) et reformuler l'équation satisfaite par  $\tilde{x}_j$ ,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}A_j\mathbf{P}^{-1} \quad \mathbf{P}x_j &= \mathbf{P}b_j \\ \tilde{A}_j \quad \tilde{x}_j &= \tilde{b}_j \end{aligned} \tag{2.70}$$

En notant  $\{x_{j-1}, dx_{j-1}\}$  et  $\{b_{j-1}, db_{j-1}\}$  les décompositions de  $x_j$  et  $b_j$ , l'équation 2.70 s'écrit :

$$\begin{pmatrix} A_{j-1} & B_{j-1} \\ C_{j-1} & D_{j-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{j-1} \\ dx_{j-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{j-1} \\ db_{j-1} \end{pmatrix} \tag{2.71}$$

- (b) Effectuer  $k$  itérations de la méthode itérative de notre choix pour résoudre le système 2.71.

Nous obtenons  $\tilde{\tilde{x}}_j = \begin{pmatrix} x_{j-1}^{[k]} \\ dx_{j-1}^{[k]} \end{pmatrix}$

2. Calculer le résidu à l'itération  $k$  :

$$\tilde{r}_j = \tilde{b}_j - \tilde{A}_j \tilde{\tilde{x}}_j = \begin{pmatrix} b_{j-1} - A_{j-1}x_{j-1}^{[k]} - B_{j-1}dx_{j-1}^{[k]} \\ db_{j-1} - C_{j-1}x_{j-1}^{[k]} - D_{j-1}dx_{j-1}^{[k]} \end{pmatrix}$$

---

3. on suppose ici pour simplifier que l'on travaille sur l'intervalle  $[0, 1]$  mais les méthodes multi-échelles à base de schémas de subdivision sont applicables pour n'importe quel type d'intervalle.

3. Projeter ce résidu sur la grille grossière associée au niveau  $j - 1$  en utilisant l'opérateur de restriction  $\mathcal{R}$  tel que :

$$\begin{aligned} r_{j-1} &= \mathcal{R}\tilde{r}_j \\ &= b_{j-1} - A_{j-1}x_{j-1}^{[k]} - B_{j-1}dx_{j-1}^{[k]} \end{aligned}$$

4. Résoudre sur la grille grossière, à l'aide d'une méthode directe, le système

$$A_{j-1}e_{j-1} = r_{j-1}$$

$$\text{où } e_{j-1} = x_{j-1} - x_{j-1}^{[k]}$$

5. Calculer l'erreur sur la grille fine en utilisant l'opérateur de prolongement  $\mathcal{P}$  tel que :

$$\tilde{e}_j = \mathcal{P}e_{j-1} = \begin{pmatrix} e_{j-1} \\ 0 \end{pmatrix}$$

6. Corriger la solution  $\tilde{\tilde{x}}_j$  obtenue par résolution itérative sur la grille fine :

$$\tilde{\tilde{x}}_j = \tilde{\tilde{x}}_j + \tilde{e}_j$$

7. Effectuer  $k$  itérations de la méthode itérative choisie pour résoudre le système 2.71 en prenant  $\tilde{\tilde{x}}_j$  pour solution initiale.

$$\text{Nous obtenons } \tilde{\tilde{x}}_j' = \begin{pmatrix} x_{j-1}^{[k]}' \\ dx_{j-1}^{[k]}' \end{pmatrix}$$

8. Reconstruire la solution sur la grille fine :

$$\bar{x}_j = \mathbf{P}^{-1}\tilde{\tilde{x}}_j'$$

L'objectif est maintenant de faire le lien entre les opérateurs de restriction et de prolongement et les opérateurs de sous-échantillonnage  $D_j^{j-1}$  et de subdivision  $P_{j-1}^j$  des méthodes multi-échelles.

Après l'étape 1.b du précédent algorithme, en écrivant  $\bar{x}_j = \mathbf{P}^{-1}\tilde{\tilde{x}}_j$ , le résidu dans l'espace initial s'écrit  $r_j = b_j - A_j\bar{x}_j$ , ce qui donne  $\tilde{r}_j = \mathbf{P}r_j$ . L'étape 3 devient alors  $r_{j-1} = \mathcal{R}\tilde{r}_j = \mathcal{R}\mathbf{P}r_j = D_j^{j-1}r_j$ . Si on part de  $V^j$  la restriction du résidu revient donc à appliquer l'opérateur de sous-échantillonnage :

$$\forall u \in V^j, \quad D_j^{j-1}u = \mathcal{R}\mathbf{P}u$$

De même dans l'étape 6 nous avons :

$$\begin{aligned} \bar{x}_j &= \mathbf{P}^{-1}\tilde{\tilde{x}}_j \\ &= \mathbf{P}^{-1}(\tilde{\tilde{x}}_j + \tilde{e}_j) \\ &= \mathbf{P}^{-1}\tilde{\tilde{x}}_j + \mathbf{P}^{-1}\mathcal{P}e_{j-1} \\ &= \bar{x}_j + \mathbf{P}^{-1}\mathcal{P}e_{j-1} \end{aligned}$$

Le prolongement de  $e_{j-1}$  dans  $V^j$  revient donc à appliquer l'opérateur de subdivision :

$$\forall u \in V^{j-1}, \quad P_{j-1}^j u = \mathbf{P}^{-1} \mathcal{P} u$$

L'efficacité de l'algorithme multigrille détaillé précédemment dépend du conditionnement partiel (dans chaque espace de détails) de chacune des matrices d'itérations. Afin de diminuer ce conditionnement, il est possible de le combiner avec une méthode de préconditionnement multi-échelles. Cela revient à remplacer la matrice  $\tilde{A}_j$  par  $\mathbf{K}_j \tilde{A}_j \mathbf{K}_j$  où  $\mathbf{K}_j$  désigne le préconditionneur. L'objectif est que le conditionnement de  $K_j \tilde{A}_j K_j$  soit plus petit que celui de  $\tilde{A}_j$ . Si la matrice  $\tilde{A}_j$  est à diagonale dominante il est naturel de penser à construire  $K_j$  à partir de l'inverse de cette diagonale. Une fois  $K_j$  introduit, le système 2.70 se reformule de la façon suivante :

$$\mathbf{K}_j \tilde{A}_j \mathbf{K}_j \mathbf{K}_j^{-1} \tilde{x}_j = \mathbf{K}_j \tilde{b}_j \quad (2.72)$$

Ensuite, l'algorithme se déroule de la même manière jusqu'à l'étape 8 lors de laquelle la reconstruction de la solution est précédée par la multiplication par l'inverse du préconditionneur  $\mathbf{K}_j$  :

$$\bar{x}_j = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{K}_j^{-1} \tilde{x}_j'$$

Un des points clés de l'efficacité de la résolution réside donc dans la construction du préconditionneur. Dans la suite de ce travail, nous nous concentrons sur des préconditionneurs de type diagonaux, c'est-à-dire de la forme :

$$\mathbf{K}_j = \begin{pmatrix} I_{j-1} & \mathbf{0}_{j-1} \\ \mathbf{0}_{j-1} & \mathcal{D}_{j-1} \end{pmatrix} \quad (2.73)$$

où  $I_{j-1}$  (resp.  $\mathbf{0}_{j-1}$ ) est la matrice identité (resp. nulle) de taille  $2^{j-1} \times 2^{j-1}$  et  $\mathcal{D}_{j-1}$  est une matrice diagonale. La construction de cette dernière matrice dans le cas de covariances usuelles fait l'objet du chapitre suivant.

# Préconditionnement multi-échelles de la matrice de covariance et résolution du système de Krigeage

Ce chapitre est consacré à la construction d'un préconditionneur pour la matrice de covariance puis à son utilisation dans la résolution multigrilles du système de Krigeage simple. Comme mentionné dans le chapitre précédent, la construction de ce préconditionneur se base sur une représentation multi-échelles de la matrice obtenue par décomposition à l'aide de schémas de subdivision. Dans la section 2.6, nous détaillons la construction du préconditionneur dans le cas d'une grille de points d'observations régulière et dyadique. Dans cette situation en effet, il est possible d'utiliser fortement les transformations de Fourier et de justifier explicitement l'efficacité du préconditionneur proposé. La section 2.7 illustre tout d'abord (grille régulière) l'efficacité numérique du préconditionneur proposé. Dans une deuxième partie (grille non régulière), une proposition de préconditionneur basé sur l'inverse de la diagonale de la représentation multiéchelle de la matrice de covariance est testée numériquement. Enfin, on évaluera l'impact, en terme de temps de calcul, de ce nouveau préconditionneur sur la nouvelle procédure de résolution itérative multigrilles.

## 2.6 Construction théorique du préconditionneur dans le cas d'une grille régulière

La construction est donnée ici pour une décomposition (i.e. un niveau grossier et un niveau fin). Une simple itération de la procédure permettra d'aboutir au préconditionneur dans le cas où plusieurs décompositions seraient réalisées.

En revenant aux notations de la première partie et en les simplifiant

puisque le plan d'expériences est ici fixé et associé à une discrétisation dyadique i.e.  $k = 2^j - 1$ , l'équation (1.10) s'écrira  $\Sigma\Lambda = \mathcal{C}$  et nous aurons après décomposition sur un niveau de  $\Sigma$  :

$$\begin{pmatrix} A_0 & B_0 \\ C_0 & D_0 \end{pmatrix} \tilde{\Lambda} = \tilde{\mathcal{C}}$$

La construction du préconditionneur s'appuie sur une reformulation dans l'espace de Fourier du système de Krigeage simple et du système obtenu après décomposition multi-échelles de la matrice de covariance à l'aide de schémas de subdivision.

Nous introduisons ici nos notations pour la transformée de Fourier discrète et les liens qui existent entre celle-ci et la transformée de Fourier continue rappelée par la définition 1.1.7.

### Définition 2.6.1

Pour tout vecteur  $u = (u_m)_{m \in \{0, \dots, k-1\}} \in \mathbb{R}^k$ , sa transformée de Fourier discrète notée  $\hat{u}_n$  ( $n \in \{0, \dots, k-1\}$ ) s'écrit

$$\hat{u}_n = \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k-1} u_m e^{-2i\pi n \frac{m}{k}} \quad (2.74)$$

Pour une fonction  $U$  continue et de carré intégrable, nous pouvons nous intéresser à l'échantillonnage de sa transformée de Fourier, celle-ci étant une fonction continue. La formule sommatoire de Poisson relie cet échantillonnage à la périodisée de la fonction  $U$ . De façon plus précise, nous avons (Chui, 1992) :

### Théorème 2.6.1 Formule sommatoire de Poisson

Si  $U \in C^0(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$  est telle que les deux termes de l'égalité suivante convergent vers une fonction continue alors :

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} U(x+m) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{U}(m) e^{2i\pi m x}.$$

Pour une fonction  $U$  continue, de carré intégrable, périodique de période 1 on peut s'intéresser également à l'échantillonnage de la fonction sur les points  $n/k, n = 0, \dots, k-1$ . La transformée de Fourier discrète de la suite obtenue est reliée à la transformée de Fourier de  $U$  définie par  $\hat{U}(n) = \int U(x) e^{-2i\pi n x} dx$  par la formule d'aliasing suivante :

$$\hat{U}_n = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \hat{U}(n + km). \quad (2.75)$$

Le lien entre l'échantillonnage d'une fonction  $U$  continue et l'échantillonnage de sa transformée de Fourier s'écrit alors, via la transformée de Fourier discrète inverse comme :

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} U(n/k + m) = \sum_{s=0}^{k-1} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{U}(m + s) e^{2i\pi sn/k}$$

Ainsi, pour une fonction  $U$  qui décroît rapidement en dehors de l'intervalle  $[0, 1]$  et pour un entier  $k$  suffisamment grand compte tenu de la décroissance de  $\hat{U}$ , la relation précédente relie numériquement le vecteur  $U(m/k), 0 \leq m \leq k - 1$  et le vecteur  $\hat{U}(n), 0 \leq n \leq k - 1$ .

Nous commençons dans la section suivante par reformuler le système de Krigeage dans l'espace de Fourier. Ceci nous amènera ensuite à la construction de préconditionneurs pour quelques covariances usuelles.

### 2.6.1 Décomposition de la matrice de covariance et reformulation du système dans l'espace de Fourier

Nous nous concentrons d'abord (Proposition 2.6.1) sur le cas d'une décomposition à l'aide d'un schéma de subdivision à 2 points (Algorithme 2.5.2). Pour ne pas discriminer les points des bords et travailler avec des transformées de Fourier discrètes dans le cas de grilles régulières, ces schémas de subdivision sont implémentés avec des conditions aux bords périodiques. La généralisation à un schéma de subdivision à  $2r$  points (Algorithme 2.5.1 avec  $l = r$ ) est ensuite introduite dans la proposition 2.6.2. Plus précisément, à partir de l'équation (1.10), le système du Krigeage simple avant et après décomposition de la matrice de covariance peut alors être reformulé de la façon suivante :

**Proposition 2.6.1** *Reformulation dans l'espace de Fourier*  
Le système du Krigeage simple se réécrit

$$\hat{\Sigma} \hat{\Lambda} = \hat{\mathcal{C}} \quad (2.76)$$

où  $\hat{\Sigma}$  est la matrice diagonale de terme général  $\hat{F}(n) = k\hat{C}(n)$ ,  $n \in \{0, \dots, k - 1\}$  et  $\hat{\Lambda}$  (resp.  $\hat{\mathcal{C}}$ ) est le vecteur des composantes dans la base de Fourier de  $\Lambda$  (resp.  $\mathcal{C}$ ).

De plus, avec les mêmes conventions, le système après décomposition de la matrice de covariance devient :

$$\begin{pmatrix} \hat{A}_0 & \hat{B}_0 \\ \hat{C}_0 & \hat{D}_0 \end{pmatrix} \hat{\Lambda} = \hat{\mathcal{C}} \quad (2.77)$$

où  $\hat{A}_0, \hat{B}_0, \hat{C}_0$  et  $\hat{D}_0$  sont des matrices diagonales de taille  $\frac{k}{2} \times \frac{k}{2}$  telles que  $\forall n \in [0, \frac{k}{2} - 1]$ ,

$$\begin{aligned}\hat{A}_{0nn} &= F(n + \frac{k}{2}) + \frac{1}{2} \left( F(n) - F(n + \frac{k}{2}) \right) \left( 1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right) \right), \\ \hat{B}_{0nn} &= \frac{1}{2} e^{-2i\pi \frac{n}{k}} \left( F(n) - F(n + \frac{k}{2}) \right), \\ \hat{C}_{0nn} &= \frac{1}{2} e^{2i\pi \frac{n}{k}} \left( F(n) - F(n + \frac{k}{2}) \right) \sin^2\left(\frac{2\pi n}{k}\right), \\ \hat{D}_{0nn} &= F(n) - \frac{1}{2} \left( F(n) - F(n + \frac{k}{2}) \right) \left( 1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right) \right)\end{aligned}$$

**Preuve:**

D'après la forme de la matrice  $\Sigma$ , l'équation (1.10) s'écrit, dans le cas d'une grille régulière de pas  $h = \frac{1}{k}$  où  $x_i = \frac{i}{k}$  sous la forme d'une convolution discrète. En effet, si on définit  $C_n^k = C(\frac{n}{k})$  alors le terme général de la matrice  $\Sigma$  est  $\Sigma_{m,n}^k = C_{m-n}^k = C_{n-m}^k$ . L'équation (1.10) s'écrit, pour chaque ligne  $0 \leq m \leq k-1$ ,  $\sum_{n=0}^{k-1} C_{m-n}^k \lambda_n = C_m$ . Par transformation de Fourier discrète de taille  $k$ , on obtient pour tout  $0 \leq n \leq k-1$ ,  $k\widehat{C}_n^k \widehat{\Lambda}_n = \widehat{C}_n$ , où  $\widehat{C}_n^k$  est la  $n$ -ième composante de la transformée de Fourier discrète du vecteur  $(C(\frac{i}{k}))_{0 \leq i \leq k-1}$ . D'après la formule (2.75) pour des valeurs de  $k$  élevées et des covariances régulières, il est possible d'identifier numériquement  $\widehat{C}_n^k$  avec  $\hat{C}(n)$ . Dans ce cas on obtient alors la formule

$$k\hat{C}(n)\widehat{\Lambda}_n = \widehat{C}_n.$$

La décomposition multi-échelles apparaît en séparant les points d'indice pair (qui appartiennent aux deux grilles  $X^j$  et  $X^{j-1}$ ) des points d'indice impair. Pour  $0 \leq n \leq k/2 - 1$ , on écrit :

$$\begin{aligned}\hat{f}_n^j &= \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k-1} f_m^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k}}, \\ &= \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m}^j e^{-2i\pi n \frac{2m}{k}} + \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+1}^j e^{-2i\pi n \frac{2m+1}{k}}, \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}} + \frac{1}{k/2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+1}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}} \right), \\ &= \frac{1}{2} \left( f_n^{j-1} + e^{-\frac{2i\pi n}{k}} f_n^{j,o} \right).\end{aligned}\tag{2.78}$$

$$\text{où } \hat{f}^{j,o}_n = \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+1}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}}.$$

De même pour les détails,

$$\begin{aligned} df^{\hat{j}-1}_n &= \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} df_m^{j-1} e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}}, \\ &= \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+1}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}} - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}} + \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+2}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}} \right), \\ &= \hat{f}^{j,o}_n - \frac{1}{2} f^{\hat{j}-1}_n \left( 1 + e^{\frac{4i\pi n}{k}} \right). \end{aligned} \quad (2.79)$$

En combinant (2.78) et (2.79), il vient :

$$\begin{aligned} \hat{f}^j_n &= \frac{1}{2} f^{\hat{j}-1}_n + \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} \left( df^{\hat{j}-1}_n + \frac{1}{2} f^{\hat{j}-1}_n \left( 1 + e^{\frac{4i\pi n}{k}} \right) \right), \\ &= \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left( \frac{2\pi n}{k} \right) \right) f^{\hat{j}-1}_n + \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} df^{\hat{j}-1}_n \end{aligned} \quad (2.80)$$

Cette dernière expression donne donc dans l'espace de Fourier la relation de passage entre la représentation par valeurs aux points d'une fonction et sa décomposition sur un niveau. Dans la suite de cette preuve, nous nous intéressons à la relation inverse.

En suivant le même calcul que (2.78) :

$$\begin{aligned} \hat{f}^j_{n+\frac{k}{2}} &= \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k-1} f_m^j e^{-2i\pi(n+\frac{k}{2})\frac{m}{k}}, \\ &= \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k-1} f_m^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k}} e^{-i\pi m}, \\ &= \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m}^j e^{-2i\pi n \frac{2m}{k}} - \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+1}^j e^{-2i\pi n \frac{2m+1}{k}}, \\ &= \frac{1}{2} \left( f^{\hat{j}-1}_n - e^{-\frac{2i\pi n}{k}} \hat{f}^{j,o}_n \right). \end{aligned}$$

En combinant avec (2.78), on a

$$f^{\hat{j}-1}_n = \hat{f}^j_n + \hat{f}^j_{n+\frac{k}{2}}. \quad (2.81)$$

D'après (2.80) et (2.81),

$$\begin{aligned}
df^{\hat{j}-1}_n &= 2e^{\frac{2i\pi n}{k}} \hat{f}^j_n - e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) f^{\hat{j}-1}_n, \\
&= 2e^{\frac{2i\pi n}{k}} \hat{f}^j_n - e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \left(\hat{f}^j_n + \hat{f}^j_{n+\frac{k}{2}}\right), \\
&= e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \hat{f}^j_n - e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \hat{f}^j_{n+\frac{k}{2}}.
\end{aligned} \tag{2.82}$$

Reste alors à reformuler l'équation (2.76) à l'aide des relations de passage (2.80), (2.81) et (2.82). Puisqu'ici la matrice de covariance est décomposée qu'une seule fois, nous simplifions les notations en éliminant les exposants  $j-1$  et  $j$  et en introduisant  $\hat{\mathcal{C}} = (\hat{\mathcal{C}}^0, d\hat{\mathcal{C}}^0)^t$  et  $\hat{\Lambda} = (\hat{\Lambda}^0, d\hat{\Lambda}^0)^t$ . Il vient alors

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{C}}^0_n &= \hat{\mathcal{C}}_n + \hat{\mathcal{C}}_{n+\frac{k}{2}}, \\
&= F(n)\hat{\Lambda}_n + F\left(n+\frac{k}{2}\right)\hat{\Lambda}_{n+\frac{k}{2}}, \\
&= F\left(n+\frac{k}{2}\right)\hat{\Lambda}^0_n + \left(F(n) - F\left(n+\frac{k}{2}\right)\right)\hat{\Lambda}_n
\end{aligned}$$

En combinant l'expression précédente avec (2.80),

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{C}}^0_n &= F\left(n+\frac{k}{2}\right)\hat{\Lambda}^0_n + \left(F(n) - F\left(n+\frac{k}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right)\hat{\Lambda}^0_n \\
&+ \frac{1}{2}e^{-\frac{2i\pi n}{k}} \left(F(n) - F\left(n+\frac{k}{2}\right)\right) d\hat{\Lambda}^0_n, \\
&= \left(F\left(n+\frac{k}{2}\right) + \left(F(n) - F\left(n+\frac{k}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right)\right)\hat{\Lambda}^0_n \\
&+ \frac{1}{2}e^{-\frac{2i\pi n}{k}} \left(F(n) - F\left(n+\frac{k}{2}\right)\right) d\hat{\Lambda}^0_n,
\end{aligned} \tag{2.83}$$

Puisque  $d\hat{\mathcal{C}}^0_n = 2e^{\frac{2i\pi n}{k}} \hat{\mathcal{C}}_n - e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \hat{\mathcal{C}}^0_n$ , les expressions (2.80) et (2.83) conduisent à

$$\begin{aligned}
\hat{d}\mathcal{C}_n^0 &= 2e^{\frac{2i\pi n}{k}} F(n)\hat{\Lambda}_n - e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \hat{\mathcal{C}}_n^0, \\
&= 2e^{\frac{2i\pi n}{k}} F(n) \left( \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \hat{\Lambda}_n^0 + \frac{1}{2}e^{-\frac{2i\pi n}{k}} d\hat{\Lambda}_n^0 \right) \\
&\quad - e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \left( F\left(n + \frac{k}{2}\right) + \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \right) \hat{\Lambda}_n^0 \\
&\quad - \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) d\hat{\Lambda}_n^0, \\
&= e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right) \hat{\Lambda}_n^0 \\
&\quad + \left(F(n) - \frac{1}{2}\left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right)\right) d\hat{\Lambda}_n^0, \\
&= \frac{1}{2}e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) \sin^2\left(\frac{2\pi n}{k}\right) \hat{\Lambda}_n^0 \\
&\quad + \left(F(n) - \frac{1}{2}\left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi n}{k}\right)\right)\right) d\hat{\Lambda}_n^0.
\end{aligned}$$

Par identification avec l'équation (2.77), nous obtenons les expressions des termes généraux des 4 matrices issues de la décomposition de  $\Sigma$ . ■

L'expression du système décomposé (2.77) peut être généralisée au cas d'un stencil interpolant de Lagrange centré à  $2r$  points (Algorithme 2.5.1). Plus précisément :

**Proposition 2.6.2**

*Dans le cas d'un stencil interpolant de Lagrange centré à  $2r$  points, les matrices intervenant dans le système (2.77) sont diagonales et de terme général :*

$$\begin{aligned}
\hat{A}_{0nn} &= F\left(n + \frac{k}{2}\right) + \frac{1}{2} \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) (1 + 2T_k(n)), \\
\hat{B}_{0nn} &= \frac{1}{2}e^{-2i\pi\frac{n}{k}} \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right), \\
\hat{C}_{0nn} &= \frac{1}{2}e^{2i\pi\frac{n}{k}} \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) (1 - 4T_k^2(n)), \\
\hat{D}_{0nn} &= F(n) - \frac{1}{2} \left(F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right)\right) (1 + 2T_k(n))
\end{aligned}$$

où

$$T_k(x) = \sum_{m_1=0}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}\left(-\frac{1}{2}\right) \cos\left(2\pi x \frac{2m_1 + 1}{k}\right). \quad (2.84)$$

**Preuve:**

La preuve est similaire à celle de la proposition précédente. Les expressions (2.78) et (2.81) sont toujours valables ici. Par contre, la généralisation va modifier l'expression de la transformée de Fourier des détails, c'est-à-dire les expressions (2.79) et (2.82). En effet, ces derniers satisfont  $df_m^{j-1} = f_{2m+1}^j - \sum_{m_1=-r}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2})f_{2m+2(m_1+1)}^j$ . Il vient alors pour  $0 \leq n \leq k/2 - 1$ ,

$$\begin{aligned}
df_{\hat{j}-1}_n &= \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} d_m^{j-1} e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}}, \\
&= \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+1}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}} - \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} \left( \sum_{m_1=-r}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) f_{2m+2(m_1+1)}^j \right) e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}}, \\
&= f_{\hat{j},o}_n - \sum_{m_1=-r}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) \left( \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+2(m_1+1)}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}} \right), \\
&= f_{\hat{j},o}_n - f_{\hat{j}-1}_n \sum_{m_1=-r}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) e^{4i\pi n \frac{m_1+1}{k}}. \tag{2.85}
\end{aligned}$$

avec  $f_{\hat{j},o}_n = \frac{1}{k/2} \sum_{m=0}^{k/2-1} f_{2m+1}^j e^{-2i\pi n \frac{m}{k/2}}$ .

En combinant (2.78) et (2.85), on obtient :

$$\begin{aligned}
\hat{f}_n^j &= \frac{1}{2} f_{\hat{j}-1}_n + \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} \left( df_{\hat{j}-1}_n + f_{\hat{j}-1}_n \sum_{m_1=-r}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) e^{4i\pi n \frac{m_1+1}{k}} \right), \\
&= \frac{1}{2} f_{\hat{j}-1}_n \left( 1 + \sum_{m_1=-r}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) e^{2i\pi n \frac{2m_1+1}{k}} \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} df_{\hat{j}-1}_n.
\end{aligned}$$

En utilisant la symétrie du stencil centré à  $2r$  points,  $\forall m_1 \in \{-r, \dots, r-1\}$ ,  $L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) = L_{-m_1-1}^{r,r}(-\frac{1}{2})$ , l'expression précédente devient

$$\begin{aligned}
\hat{f}_n^j &= \frac{1}{2} f_{\hat{j}-1}_n \left( 1 + \sum_{m_1=0}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) \left( e^{2i\pi n \frac{2m_1+1}{k}} + e^{-2i\pi n \frac{2m_1+1}{k}} \right) \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} df_{\hat{j}-1}_n, \\
&= \frac{1}{2} f_{\hat{j}-1}_n \left( 1 + 2 \sum_{m_1=0}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) \cos \left( 2\pi n \frac{2m_1+1}{k} \right) \right) + \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} df_{\hat{j}-1}_n, \\
&= \frac{1}{2} f_{\hat{j}-1}_n (1 + 2T_k(n)) + \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} df_{\hat{j}-1}_n, \tag{2.86}
\end{aligned}$$

où  $T_k(n) = \sum_{m_1=0}^{r-1} L_{m_1}^{r,r}(-\frac{1}{2}) \cos(2\pi n \frac{2m_1+1}{k})$ .

En combinant (2.81) et (2.86), on a

$$\hat{d}f_n^j = e^{\frac{2i\pi n}{k}} (1 - 2T_k(n)) \hat{f}_n^j - e^{\frac{2i\pi n}{k}} (1 + 2T_k(n)) \hat{f}_{n+\frac{k}{2}}^j.$$

Nous aboutissons alors aux relations suivantes

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{C}}_n^0 &= \left( F\left(n + \frac{k}{2}\right) + \frac{1}{2} \left( F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right) \right) (1 + 2T_k(n)) \right) \hat{\Lambda}_n^0 \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\frac{2i\pi n}{k}} \left( F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right) \right) \hat{d}\Lambda_n^0, \end{aligned} \quad (2.87)$$

et

$$\begin{aligned} \hat{d}\hat{\mathcal{C}}_n^0 &= \frac{1}{2} e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left( F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right) \right) (1 + 2T_k(n)) (1 - 2T_k(n)) \hat{\Lambda}_n^0 \\ &+ \left( F(n) - \frac{1}{2} \left( F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right) \right) (1 + 2T_k(n)) \right) \hat{d}\Lambda_n^0, \\ &= \frac{1}{2} e^{\frac{2i\pi n}{k}} \left( F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right) \right) (1 - 4T_{m_1}^2(n)) \hat{\Lambda}_n^0 \\ &+ \left( F(n) - \frac{1}{2} \left( F(n) - F\left(n + \frac{k}{2}\right) \right) (1 + 2T_k(n)) \right) \hat{d}\Lambda_n^0. \end{aligned}$$

■

## 2.6.2 Construction d'un préconditionneur pour quelques covariances usuelles

En se basant sur les deux propositions précédentes, cette section est dédiée à la construction d'un préconditionneur pour les covariances suivantes dont nous rappelons les expressions ainsi que la forme des transformées de Fourier associées :  $\forall(x, \omega) \in \mathbb{R}^2$ ,

- Exponentiel :  $C(x) = ce^{-\frac{|x|}{a}}$ ,  $\hat{C}(\omega) = \frac{\mathcal{K}_1}{1+4\pi^2 a^2 \omega^2}$ ,
- Gaussien :  $C(x) = ce^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2}$ ,  $\hat{C}(\omega) = \mathcal{K}_1 e^{-\pi^2 a^2 \omega^2}$ ,
- Matern- $\frac{3}{2}$  :  $C(x) = c \left(1 + \frac{|x|}{a}\right) e^{-\frac{|x|}{a}}$ ,  $\hat{C}(\omega) = \frac{\mathcal{K}_1}{(1+4\pi^2 a^2 \omega^2)^2}$ ,

$\mathcal{K}_1$  désignant une constante générique qui peut-être différente d'un modèle à l'autre.

La construction d'un préconditionneur se base sur l'étude numérique du comportement des matrices  $\hat{C}_0$  et  $\hat{D}_0$  fournies par les propositions 2.6.1 et 2.6.2. Notons d'abord que, puisque par définition,  $F(n) = k\hat{C}(n)$ , il suffit donc pour simplifier de travailler sur le préconditionnement de la décomposition de  $\frac{1}{k}\hat{\Sigma}$ , c'est-à-dire sur l'étude du comportement de  $\frac{1}{k}\hat{C}_0$  et  $\frac{1}{k}\hat{D}_0$ , puisque le conditionnement ne change pas par multiplication par une constante. C'est précisément ce que nous faisons dans la suite.

### Covariance exponentielle

En introduisant les quantités

$$G_1(x) = \frac{1}{2}e^{2i\pi\frac{x}{k}} \left( \hat{C}(x) - \hat{C}\left(x + \frac{k}{2}\right) \right) \sin^2\left(\frac{2\pi x}{k}\right), \quad (2.88)$$

$$G_2(x) = \hat{C}(x) - \frac{1}{2} \left( \hat{C}(x) - \hat{C}\left(x + \frac{k}{2}\right) \right) \left( 1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{k}\right) \right), \quad (2.89)$$

qui sont les expressions génériques des coefficients des matrices  $\frac{1}{k}\hat{C}_0$  et  $\frac{1}{k}\hat{D}_0$ , la figure 2.20 représente l'évolution de leur module pour  $x \in [0, \frac{k}{2} - 1]$  dans le cas d'un modèle exponentiel et pour différentes valeurs du paramètre  $a$  (la constante  $\mathcal{K}_1$  a été fixée à 1).

Il apparaît que le minimum de  $|G_2(x)|$  est atteint pour  $x = \frac{k}{2} - 1$  alors que le maximum est atteint pour les faibles valeurs de  $x$ . La construction du préconditionneur se base alors sur l'élimination de la plus petite valeur du module. Pour cela, nous commençons par exprimer un équivalent pour  $k$  grand de  $|G_2(\frac{k}{2} - 1)|$ . Notons d'abord que  $|G_2(\frac{k}{2} - 1)| = G_2(\frac{k}{2} - 1)$  car

$$\begin{aligned} G_2(x) &= \hat{C}(x) - \frac{1}{2} \left( \hat{C}(x) - \hat{C}\left(x + \frac{k}{2}\right) \right) \left( 1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{k}\right) \right), \\ &\geq \hat{C}(x) - \frac{1}{2} \left( \hat{C}(x) - \hat{C}\left(x + \frac{k}{2}\right) \right) * 2, \\ &\geq \hat{C}\left(x + \frac{k}{2}\right), \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

Puisque,  $\hat{C}(\frac{k}{2} - 1) \sim \frac{4\mathcal{K}}{k^2}$ ,  $\hat{C}(k - 1) \sim \frac{\mathcal{K}}{k^2}$  ( $\mathcal{K}$  désigne une constante) et  $\cos\left(\pi - \frac{2\pi}{k}\right) \sim -1$ , il vient  $|G_2(\frac{k}{2} - 1)| \sim \frac{4\mathcal{K}}{k^2}$ . Nous proposons alors de choisir comme préconditionneur la matrice diagonale de taille  $k \times k$  et de terme général  $K_{nn} = 1$  pour  $n \in \{0, \dots, \frac{k}{2} - 1\}$  et  $K_{nn} = k$  pour  $n \in \{\frac{k}{2}, \dots, k - 1\}$ . La multiplication à gauche et à droite par cette matrice a pour effet de rendre constante la plus petite valeur de  $|G_2(x)|$  mais également sa valeur maximale

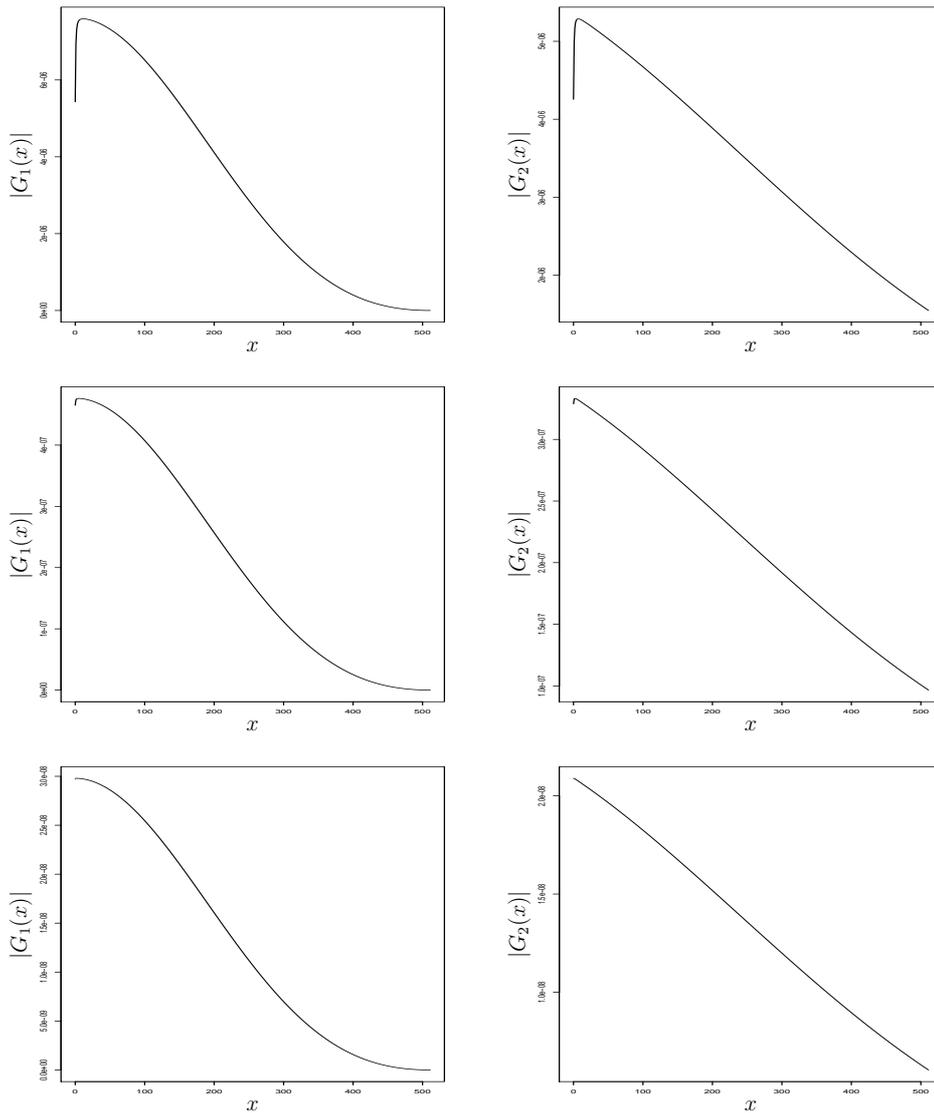


FIGURE 2.20 – Variations du module de  $G_1$  et de  $G_2$  pour différentes valeurs du paramètre  $a$  (de haut en bas,  $a = 0.25, 1, 4$ ) de la covariance exponentielle et  $k = 1024$ .

(Figure 2.21).

De plus, le module de  $k|G_1(x)|$  reste négligeable devant celui de  $k^2|G_2(x)|$ . Pour les 3 valeurs du paramètres  $a$  utilisées dans cette étude, le maximum du rapport  $\frac{k|G_1(x)|}{k^2|G_2(x)|}$  est de l'ordre de  $10^{-3}$ . La matrice décomposée préconditionnée est donc asymptotiquement triangulaire supérieure. Puisque le bloc en bas à droite est une diagonale de constante, les problèmes de mauvais conditionnement se reportent donc sur la matrice  $\hat{A}_0$  qui à son tour peut être

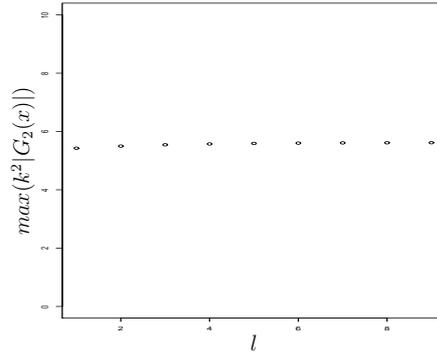


FIGURE 2.21 – Variations du maximum du module de  $k^2 G_2$  en fonction de  $k = 2^l * 256$  (covariance exponentielle,  $a = 0.25$ ).

décomposée et préconditionnée en suivant la même procédure.

### Covariance Gaussienne

La proposition de préconditionneur se base également sur une étude du comportement des fonctions  $G_1$  et  $G_2$  définies par les expressions (2.88) et (2.89). Cependant, un préconditionneur construit directement à partir du comportement asymptotique de la plus petite valeur du module de  $G_2$  ne permet pas de stabiliser la valeur maximale. La procédure de préconditionnement que nous proposons ici exploite la concentration de la matrice  $D_0$  sur sa diagonale : Plus précisément, nous proposons le préconditionneur suivant :

$$K = \begin{pmatrix} I_{k/2} & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}$$

où  $I_{k/2}$  est la matrice identité de taille  $\frac{k}{2} \times \frac{k}{2}$  et  $M$  est la matrice diagonale telle que  $\forall m \in \{0, \dots, \frac{k}{2} - 1\}$ ,  $M_{mm} = \frac{1}{\sqrt{D_{0,mm}}}$ . Ce résultat qui semble provenir de considérations heuristiques se base en fait sur la représentation diagonale des matrices de détails issues de la décomposition. Plus précisément, cette expression se justifie en deux étapes.

- Nous vérifions d’abord numériquement que  $\forall x \in [0, \frac{k}{2} - 1]$ , le ratio  $\frac{|G_1(x)|}{\sqrt{|G_2(x)|}}$  est négligeable devant 1 (Tableau 2.5)
- La décroissance autour de la diagonale de la matrice  $D_0$  résulte de deux propriétés : la première est la décroissance autour de sa diagonale de la matrice initiale  $\Sigma$  qui provient de la forme particulière du terme général de  $\Sigma$  ; la deuxième est directement liée à l’ordre d’approximation de

l'interpolation de Lagrange utilisée pour calculer les détails : dans le cas d'un stencil à  $2r$  points, l'utilisation d'interpolation de degrés  $2r - 1$  conduit à des détails de l'ordre de  $h^{2r}$  pour l'échantillonnage d'une fonction de classe au moins  $C^{2r+1}$ .

La matrice  $P\Sigma$  correspond à la décomposition sur un niveau de chaque colonne de la matrice  $\Sigma$ . A cause de la décroissance de  $\Sigma$  autour de sa diagonale et de la régularité de la covariance, la matrice  $P\Sigma$  est constituée de 2 matrices rectangulaires horizontales décroissantes autour de leur diagonale principale. La matrice  $P^{-1}$  (Expression (2.69)) est également la somme de 2 matrices rectangulaires verticales, celle de droite étant diagonale. Il s'en suit que la matrice  $D_0$ , provenant du produit  $P\Sigma P^{-1}$  est décroissante autour de sa diagonale.

**Remarque 2.6.1**

*Quand on utilise les schémas de subdivision issus de décompositions en ondelettes, la justification de la décroissance de  $D_0$  autour de sa diagonale est plus directe puisqu'alors  $P^{-1} = P^t$  et la multiplication  $P\Sigma P^{-1}$  correspond à la décomposition en ondelettes bidimensionnelle de la matrice  $\Sigma$  qui correspond à l'échantillonnage d'une fonction régulière et dont les forts gradients sont concentrés sur sa diagonale.*

$a$	0.25	1	4
$\max\left(\frac{ G_1(x) }{\sqrt{ G_2(x) }}\right)$	$4.5e - 3$	$4.4e - 5$	$1e - 37$

TABLE 2.5 – Maximum du rapport  $\frac{|G_1(x)|}{\sqrt{|G_2(x)|}}$  dans le cas d'une covariance Gaussienne pour différentes valeurs du paramètre  $a$  ( $k = 1024$ ).

Covariance Matern

Nous suivons ici la même démarche que pour la covariance exponentielle. Le minimum du module de  $G_2$  est atteint en  $x = \frac{k}{2} - 1$ , nous cherchons donc un équivalent pour  $k$  grand de  $|G_2\left(\frac{k}{2} - 1\right)|$ . Puisque  $\hat{C}\left(\frac{k}{2} - 1\right) \sim \frac{16\mathcal{K}}{k^4}$ ,  $\hat{C}(k - 1) \sim \frac{\mathcal{K}}{k^4}$  ( $\mathcal{K}$  désigne une constante), nous trouvons  $|G_2\left(\frac{k}{2} - 1\right)| \sim \frac{16\mathcal{K}}{k^4}$  et le préconditionneur est la matrice diagonale de taille  $k \times k$  et de terme général  $K_{nn} = 1$  pour  $n \in \{0, \dots, \frac{k}{2} - 1\}$  et  $K_{nn} = k^2$  pour  $n \in \{\frac{k}{2}, \dots, k - 1\}$ . Cependant, si ce préconditionneur rend constant la valeur minimale de  $|G_2(x)|$ , la valeur maximale augmente avec  $k$  comme le montre la seconde colonne du tableau 2.6.

Pour contourner cette difficulté, nous proposons de prendre un stencil plus large à 4 points. Dans ce cas, en suivant la proposition 2.6.2, nous introduisons :

$k$	$\max(k^4 G_2(x) )$ Stencil à 2 points	$\max(k^4 G_2(x) )$ Stencil à 4 points
256	$3.5e + 05$	48.9
512	$1.4e + 06$	49.6
1024	$5.8e + 06$	50
2048	$2.3e + 07$	50.3
4096	$9.4e + 07$	50.4
8192	$3.8e + 08$	50.5
16384	$1.5e + 09$	50.5

TABLE 2.6 – Valeur maximale de  $k^4|G_2(x)|$  en fonction de  $k$  pour la covariance de Matern- $\frac{3}{2}$  ( $a = 0.25$ ).

$$G_1(x) = \frac{1}{2}e^{2i\pi\frac{x}{k}} \left( \hat{C}(x) - \hat{C}(x + \frac{k}{2}) \right) \left( 1 - 4T_4^2\left(\frac{2\pi x}{k}\right) \right)$$

$$G_2(x) = \hat{C}(x) - \frac{1}{2} \left( \hat{C}(x) - \hat{C}(x + \frac{k}{2}) \right) \left( 1 + 2T_4\left(\frac{2\pi x}{k}\right) \right),$$

$$\text{avec } T_4(x) = \frac{9}{16}\cos\left(\frac{2\pi x}{k}\right) - \frac{1}{16}\cos\left(\frac{6\pi x}{k}\right).$$

Notons d'abord que  $\forall x \in [0, \frac{k}{2} - 1]$ ,  $T_4(x) \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ . En effet, en dérivant  $T_4$  et en cherchant ce qui annule  $T_4'$ , nous sommes ramenés après un rapide calcul à résoudre l'équation  $3\sin(u) = \sin(3u)$  où  $u = \frac{2\pi x}{k}$ . En développant  $\sin(3u)$ , il vient  $u = K\pi$  ( $K \in \mathbb{Z}$ ). Le résultat est alors immédiat puisque  $T_4(0) = \frac{1}{2}$  et  $T_4(\pi) = -\frac{1}{2}$ .

Comme dans le cas exponentiel, le module de  $G_2$  est minimal pour  $x = \frac{k}{2} - 1$  et nous avons toujours  $|G_2(\frac{k}{2} - 1)| = G_2(\frac{k}{2} - 1) \sim \frac{16K}{k^4}$  car  $T_4(\pi - \frac{2\pi}{k}) \sim -\frac{1}{2}$ . Le préconditionneur proposé rend donc constante la plus petite valeur de la nouvelle fonction  $k^4G_2(x)$  mais également la valeur maximale comme le montre la troisième colonne du tableau 2.6.

### Remarque 2.6.2

*Dans les cas exponentiel et Gaussien, un calcul ou un argument similaire à celui utilisé pour un stencil à 2 points montre que la forme du préconditionneur ne change pas si la matrice de covariance est décomposée à l'aide d'un schéma de subdivision à 4 points.*

## 2.7 Résultats numériques

Cette section est consacrée à l'étude numérique des performances du préconditionneur multiéchelle construit dans la section précédente. Pour ce faire, nous étudions d'abord le comportement du rapport entre la valeur propre maximale et la valeur propre minimale de la matrice de covariance avant et après préconditionnement puisque cette quantité contrôle la vitesse de convergence des méthodes itératives. Par souci d'exhaustivité, cette étude est réalisée pour plusieurs modèles de covariance et plusieurs longueurs du stencil centré associé au schéma de subdivision utilisé pour la décomposition. Elle aboutit également à une extension de la construction du préconditionneur au cas de grilles non régulières. Puis, nous évaluons l'apport de ce préconditionneur en terme de temps de calcul pour la procédure de résolution multigrilles.

### 2.7.1 Etude du rapport des valeurs propres de la matrice préconditionnée

#### Grille régulière

Considérons d'abord une covariance exponentielle de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  et un schéma de subdivision à 4 points.

Nous évaluons le rapport des valeurs propres en faisant varier la taille initiale de la matrice de covariance et en fixant l'échelle finale à atteindre après décompositions successives. Le tableau 2.7 fournit cette quantité quand le niveau grossier est  $j = 2$ . Nous constatons alors que quelque soit la taille de la matrice initiale, le préconditionneur multiéchelle nous ramène à des rapports  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  du même ordre de grandeur pour la matrice préconditionnée et une amélioration d'un facteur compris entre  $10^4$  et  $10^5$ .

Le même type de test est réalisé maintenant pour un modèle de covariance Gaussien de même paramètres que le modèle exponentiel. Le tableau 2.8 fournit une comparaison entre le rapport des valeurs propres associées aux matrices avec et sans préconditionnement quand le niveau à atteindre après décompositions est fixé à  $j = 2$ . Comme dans le cas précédent, nous observons une réduction significative dans le cas de la matrice préconditionnée.

Nous terminons l'étude sur grille régulière en analysant l'influence de la longueur du stencil du schéma de subdivision sur l'efficacité du préconditionneur. Pour cela, le modèle de Matern- $\frac{3}{2}$  de paramètres  $(1, 1)$  est choisi et nous donnons dans le tableau 2.9 l'évolution du rapport des valeurs propres dans le cas de stencils à 2 et 4 points. Nous retrouvons alors le résultat obtenu à

Taille de la matrice	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ matrice initiale	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ matrice préconditionnée
513 × 513	1.94 e + 06	9.98
257 × 257	4.85 e + 05	7.65
129 × 129	1.22 e + 05	5.43

TABLE 2.7 – Evolution du rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  en fonction du nombre de points du plan d’expériences et donc de la taille des matrices, pour la matrice de covariance exponentielle initiale de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  et la matrice à laquelle nous avons appliqué le préconditionneur multiéchelle sur 7, 6 et 5 niveaux.

Taille de la matrice	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ matrice initiale	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ matrice préconditionnée
513 × 513	-	7.58 e + 07
257 × 257	-	6.14 e + 06
129 × 129	-	4.33 e + 06

TABLE 2.8 – Evolution du rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  en fonction du nombre de points du plan d’expériences et donc de la taille des matrices, pour la matrice de covariance Gaussienne initiale de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  et la matrice à laquelle nous avons appliqué le préconditionneur multiéchelle. Le symbole “-” signifie que le rapport est trop grand pour disposer d’une estimation numérique fiable (plus grand que  $10^{20}$ ).

la section précédente puisque le stencil à 2 points ne permet pas de stabiliser le rapport des valeurs propres après pré-conditionnement.

### Grille non-régulière

Nous considérons ici des grilles non régulières. La construction du masque des schémas de subdivision s’étend naturellement à cette situation en intégrant dans le calcul de la fonction interpolatrice de Lagrange les positions non régulières des points d’observations. Comme dans le cas d’une grille régulière, il est donc possible de définir une décomposition de la matrice de covariance, l’opérateur de décimation consistant à ne garder qu’un point sur deux du niveau fin.

Taille de la matrice	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ Stencil à 2 points	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ Stencil à 4 points
$513 \times 513$	$5.61 e + 07$	$2.37 e + 04$
$257 \times 257$	$8.26 e + 06$	$3.57 e + 04$
$129 \times 129$	$2.04 e + 08$	$2.35 e + 04$

TABLE 2.9 – Evolution du rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  en fonction de la taille des matrices, pour la matrice de covariance de type Matern- $\frac{3}{2}$  de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  après préconditionnement et pour plusieurs longueurs de stencil.

Une fois la décomposition réalisée, l’analyse proposée dans la section 2.6 n’est pas applicable ici puisqu’elle utilisait fortement l’invariance par translation et les transformations de Fourier. Néanmoins, elle menait à un préconditionneur diagonal par bloc construit à partir de l’opérateur identité sur la grille grossière et de l’inverse de la matrice sur les détails (dont le calcul était très facile après transformation de Fourier puisque cette transformation la rendait diagonale). Le préconditionneur que nous introduisons ici est également construit en deux blocs. Un premier bloc identité sur la grille grossière et un deuxième bloc construit à partir de l’inverse de la diagonale de la matrice de covariance sur les détails. De façon plus précise, le préconditionneur s’écrit :

$$K = \begin{pmatrix} I_{k/2} & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}$$

où  $M$  est la matrice diagonale telle que  $\forall m \in \{0, \dots, \frac{k}{2}-1\}$ ,  $M_{mm} = \frac{1}{\sqrt{D_{0,mm}}}$ . La motivation de cette forme de préconditionnement est la forme quasi diagonale de la matrice de covariance après décomposition. Dans tous les tests qui suivent, le schéma de subdivision utilisé est “centré” à 4 points<sup>4</sup>.

Les grilles non régulières sont obtenues par raffinement local d’une discrétisation dyadique de  $[0, 1]$ . Plus précisément, partant d’une grille dyadique de pas  $2^{-p}$ , la grille 1 (Figure 2.22) correspond à un raffinement dans une unique zone  $z_1$  pour laquelle le pas devient  $2^{-(p+4)}$ . Pour la grille 2 (Figure 2.23), nous raffinons trois zones : une zone  $z_1$  dont le pas vaut  $2^{-(p+3)}$  et une autre, notée  $z_2$ , avec un pas de  $2^{-(p+2)}$  et un nouveau raffinement imbriqué

4. Le terme “centré” à 4 points signifie ici que la prédiction en un point est construite en prenant les 2 points d’observations à gauche et à droite les plus proches du point d’intérêt.

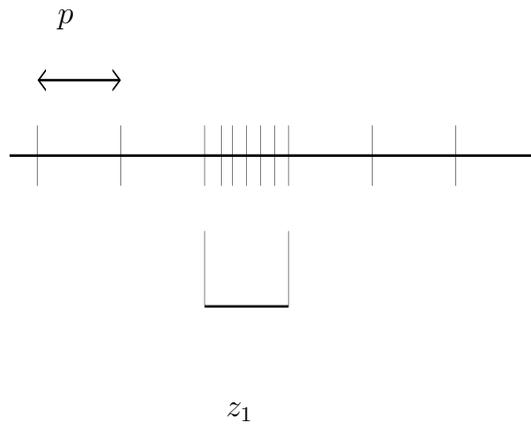


FIGURE 2.22 – Première grille non-régulière.

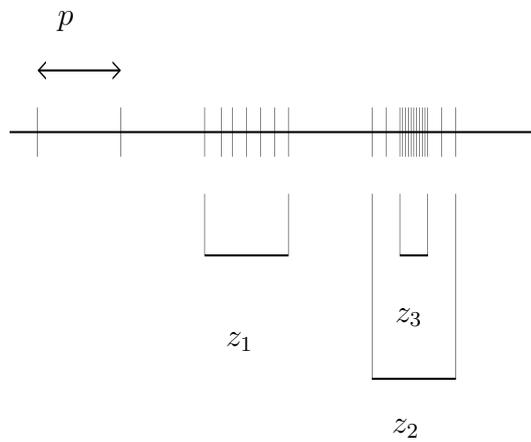


FIGURE 2.23 – Seconde grille non-régulière.

dans celle-ci pour former une troisième zone de raffinement  $z_3$  de pas  $2^{-(p+5)}$ .

Le tableau 2.10 donne un exemple du rapport des valeurs propres pour la première grille non régulière et dans le cas d'une covariance Gaussienne de même paramètre que précédemment. Il apparaît à nouveau que le préconditionneur permet de diminuer fortement cette quantité et de la stabiliser quand la taille de la matrice initiale change. Le caractère non régulier de la grille conduit à un rapport des valeurs propres supérieur à celui obtenu dans les tests associés à une grille régulière.

Le tableau 2.11 présente le rapport des valeurs propres maximale et minimale de la matrice préconditionnée de taille  $513 \times 513$  pour chacune des deux grilles non-régulières et pour les covariances exponentielle et Gaussienne de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$ . Ces résultats confirment l'efficacité du préconditionneur

mais également que le type de grille non régulière a peu d'influence ici.

Taille de la matrice	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ matrice initiale	Rapport $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$ matrice préconditionnée
513 × 513	-	7.36 e + 09
257 × 257	-	1.99 e + 09
129 × 129	-	1.05 e + 09

TABLE 2.10 – Evolution du rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  en fonction du nombre de points du plan d'expériences et donc de la taille des matrices, pour la matrice de covariance Gaussienne initiale de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  et la matrice à laquelle nous avons appliqué le préconditionneur multi-échelles, pour la première grille non-régulière. Le symbole “-” signifie que le rapport est trop grand pour disposer d'une estimation numérique fiable (plus grand que  $10^{20}$ )

	Covariance exponentielle	Covariance Gaussienne
Grille 1	1.56 e + 01	7.36 e + 09
Grille 2	1.28 e + 01	1.05 e + 09

TABLE 2.11 – Rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  des matrices préconditionnées pour les deux modèles de covariance, les deux grilles non-régulières et une taille de matrice fixée (513 × 513).

Nous terminons cette section en étudiant l'influence du stencil. Pour cela, nous comparons les résultats obtenus pour deux tailles de stencil (4 points et 6 points) pour une covariance exponentielle de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  (Tableau 2.12).

L'utilisation d'un stencil à 6 points nous conduit à un rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  de la matrice préconditionnée plus petit que pour un stencil à 4 points. En effet, dans le cas de modèles de covariance très réguliers, l'augmentation du nombre de points a pour effet d'accélérer la décroissance des détails issus de la décomposition et favorise ainsi l'apparition d'une structure diagonale dans la matrice  $D_0$ .

Taille de la matrice	Stencil à 4 points	Stencil à 6 points
$513 \times 513$	$1.56 e + 01$	9.74

TABLE 2.12 – Evolution du rapport  $\frac{\mathcal{L}_{max}}{\mathcal{L}_{min}}$  de la matrice à laquelle nous avons appliqué le préconditionneur multiéchelle, en fonction du nombre de points dans le stencil. Le modèle de covariance est de type exponentiel de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$ .

## 2.7.2 Résolution multigrille

Dans cette section, nous intégrons le préconditionneur dans l'algorithme de résolution multigrille introduit au chapitre précédent. Afin d'évaluer les performances de la nouvelle procédure, nous considérons d'abord un cas analytique puis une application au cas de la fissuration mécanique décrit dans le chapitre 2 est fournie.

### Cas analytique

Par souci d'exhaustivité dans l'évaluation des performances, nous considérons les 3 procédures de résolution suivantes :

- Résolution itérative du système de Krigeage à l'aide de la méthode de Richardson
- Résolution itérative en couplant méthode de Richardson et approche multigrille en V-cycles ou W-cycles
- Résolution itérative en couplant méthode de Richardson, approche multigrille en V-cycles ou W-cycles et préconditionnement multi-échelle.

Les matrices de covariance sont toujours de taille  $513 \times 513$  et un stencil centré à 4 points est utilisé pour réaliser les décompositions à l'aide de schémas de subdivision. En travaillant avec l'erreur relative en norme  $l^2$  i.e.

$$E_2 = \frac{\|b - A\bar{x}\|_2}{\|b\|_2}$$

avec  $\bar{x}$  la solution obtenue, le critère de comparaison est le nombre d'itérations pour atteindre une erreur donnée.

Le tableau 2.13 fournit le nombre d'itérations correspondant pour les 3 méthodes dans le cas d'une covariance exponentielle et une grille dyadique de  $[0, 1]$ . Il apparaît alors que la résolution itérative du système nécessite plus de 7 millions d'itérations pour obtenir une erreur de  $10^{-2}$  contre un peu

moins de 2 millions (diminution d'un facteur  $\sim 4$ ) pour une résolution en V/W-cycles et seulement 6200 (diminution d'un facteur 300 par rapport au cas sans préconditionnement) quand nous intégrons une étape de préconditionnement multi-échelles. En terme de temps de calcul<sup>5</sup>, nous remarquons une réduction du coût de calcul d'un facteur supérieur à 1000.

	Résolution par Richardson	Résolution par V-cycles	Résolution par notre procédé
$E_2$	$1.00 e - 02$	$8.56 e - 02$	$8.98 e - 03$
Temps CPU (en s)	112.67	37.67	$8.40 e - 02$
Nombre d'itérations totales	7128326	1850000	6200

TABLE 2.13 – Comparaison de trois méthodes de résolution de système : une résolution itérative du système initial, deux résolutions itératives multigrilles sans et avec préconditionnement multiéchelle, cas d'une matrice de covariance exponentielle de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  associée à une grille régulière de taille 513.

Nous envisageons maintenant le cas d'une grille non-régulière (tableau 2.14) en nous concentrant uniquement sur la comparaison entre résolution itérative et résolution en V/W cycles avec préconditionnement. Pour cela, le premier exemple de grille non-régulière présenté dans la section précédente est utilisé. A nouveau, nous retrouvons que la nouvelle approche permet de réduire considérablement le nombre d'itérations puisqu'une résolution itérative demande plus de 9 millions d'itérations pour atteindre une erreur de  $10^{-1}$  contre seulement 7260 par notre méthode de résolution pour une erreur 10 fois plus petite. Nous constatons également une réduction d'un facteur supérieur à 1800 du coût de calcul (en terme de temps CPU).

Nous considérons maintenant une covariance Gaussienne de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$ . Dans ce cas la matrice de covariance n'est pas numériquement inversible et le système initial n'est pas résoluble en raison du conditionnement trop élevé de  $\Sigma$  qui ne permet pas la convergence de la méthode de Richardson. En revanche, l'utilisation de notre procédure permet d'atteindre une erreur inférieure à  $10^{-1}$  en 12400 itérations, soit 2.78 secondes (tableau 2.15). Le tableau fournit également le résultat pour un stencil à 6 points. en

---

5. Les calculs ont été réalisés sur une machine Lenny de 64 bits et 4 gigas

	Résolution itérative système initial	Résolution par notre procédé
$E_2$	$1,00 e - 01$	$6.65 e - 02$
Temps CPU (en s)	176.55	$9.32 e - 02$
Nombre d'itérations totales	9116472	7260

TABLE 2.14 – Comparaison de deux méthodes de résolution de système : une résolution itérative du système initial et une résolution itérative multigrille avec préconditionneur multiéchelle, cas d'une matrice de covariance exponentielle de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  associée à une grille non-régulière de taille 513.

fixant le même W-cycle que celui utilisé pour le stencil à 4 points. Il en ressort que le stencil à 6 points conduit à une erreur plus faible en un temps plus court. Ceci s'explique par le fait qu'un stencil à 6 points donne des matrices décomposées dont les détails décroissent plus vite, ce qui améliore l'efficacité du préconditionneur et accélère la convergence de la méthode de Richardson.

Taille du stencil	4 points	6 points
$E_2$	$8.94 e - 02$	$6.23 e - 02$
Temps CPU (en s)	2.78	1.96
Nombre d'itérations totales	12400	12400

TABLE 2.15 – Influence de la taille du stencil sur les résultats issus de la résolution itérative multigrille avec préconditionnement, cas d'une matrice de covariance Gaussienne de paramètres  $(1, \frac{1}{4})$  associée à une grille régulière de taille 513 et pour deux tailles de stencil (à 4 et 6 points).

#### Cas réel de la fissuration mécanique

Nous revenons ici sur le cas mécanique de la fissuration décrit dans la section 2.3. Pour rappel, en raison du conditionnement trop élevé de la matrice de covariance, peu ou aucune simulation séquentielle Gaussienne n'avaient

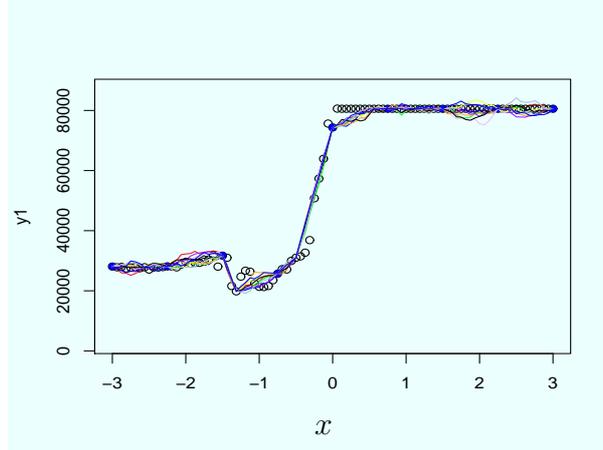


FIGURE 2.24 – Dix simulations séquentielles Gaussiennes. Le plan d'expériences initial est un plan régulier à 9 points (points bleus) et nous simulons sur la grille à 97 points (cercles noirs).

pu être réalisées en partant du plan d'expériences initial à 9 points (grille régulière) ou du plan d'expériences adaptatif à 24 points (grille non régulière). Ici, nous reprenons cette étude en remplaçant la résolution directe du système de Krigeage simple par la résolution couplant méthode de Richardson, V/W cycles et préconditionnement multi-échelles. Comme le montrent les figures 2.24 et 2.25, il apparaît que l'intégration du préconditionneur permet de stabiliser la résolution numérique du système de Krigeage (sans ajouter une variance d'erreur), rendant ainsi possible les simulations.

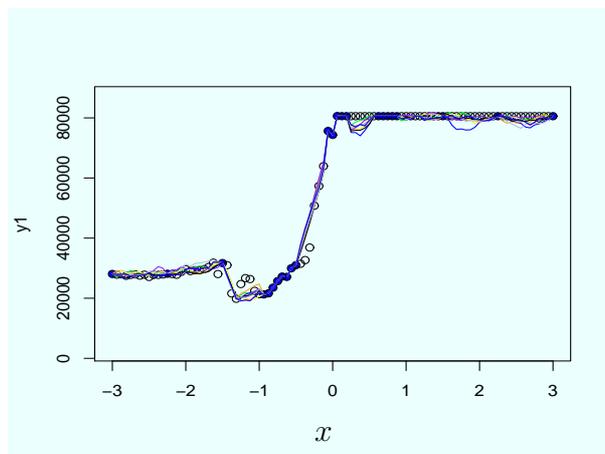


FIGURE 2.25 – Dix simulations séquentielles Gaussiennes. Le plan d'expériences initial est un plan non-régulier à 24 points (points bleus) et nous simulons sur la grille à 97 points (cercles noirs).

# Conclusion

De nouvelles techniques numériques pour la planification adaptative d'expériences ont été proposées dans cette thèse. Un critère générique de planification intégrant une modélisation des données par Krigeage a d'abord été introduit en étendant les travaux de Picheny et al. (2010) afin de permettre le raffinement local de plans en fonction des objectifs de l'analyste. Sa construction est de type IMSE pondérée et intègre, via une fonction poids, les régions d'intérêt où l'analyste souhaite rajouter de l'information. La stabilité de l'algorithme de planification a ensuite été analysée théoriquement : la relation entre le conditionnement de la matrice de covariance avant et après ajout de points a montré que cette dernière devient rapidement mal conditionnée. Pour contourner cette difficulté, une première procédure de stabilisation a été mise en oeuvre : elle a consisté à introduire une variance d'erreur sur la diagonale de la matrice de covariance. Dans ce cas, le conditionnement est indépendant de la distance minimale entre le point à prédire et les observations. Pour des applications industrielles, la nouvelle procédure de planification intègre également une stratégie de réduction de coût de calcul basée sur la combinaison entre MSE et IMSE. Une première série de tests a été réalisée sur un exemple analytique pour évaluer ses performances par rapport aux approches classiques. Les résultats obtenus ont montré l'efficacité du critère de planification qui a permis d'adapter la procédure de raffinement en fonction des objectifs de l'analyste ainsi qu'une réduction importante de la complexité de l'algorithme associé. Deux applications sur des cas tests issus des activités de l'IRSN dans le domaine de l'analyse de risques ont été considérées : la première concerne l'extension d'un réseau de capteurs de mesures, la seconde porte sur la prise en compte des incertitudes dans un code de mécanique de la fissuration. Dans ce dernier cas, il est apparu que la stabilisation du système de Krigeage est obligatoire si nous voulons être capable de réaliser des simulations conditionnelles pour estimer l'incertitude de modélisation. Toutefois, pour garantir la stabilisation, la valeur de la variance d'erreur doit être choisie en fonction de la variance des données. Dans le cas où le modèle de semi-variogramme (ou de fonction de covariance) est mis à jour à chaque ajout de nouveaux de points, il faut alors adapter de façon heuristique la variance d'erreur pour qu'elle reste toujours négligeable devant la variance. De plus, même dans le cas d'une faible variance d'erreur, la reconstruction

par Krigeage n'est plus interpolante et peut diminuer le gain en précision apporté par le plan d'expériences adaptatif.

Une nouvelle technique de stabilisation a alors été construite dans la seconde partie de la thèse. Elle s'appuie sur la construction d'un préconditionneur pour la matrice de covariance. En s'inspirant des travaux sur le préconditionnement en ondelettes des matrices associées à des opérateurs à noyaux, la matrice de covariance est d'abord décomposée à l'aide de schémas de subdivision et un préconditionneur diagonal est construit. Les principaux avantages de cette nouvelle technique se situent dans la simplicité de la forme du préconditionneur qui s'obtient pour des noyaux de covariance standards directement à partir de leur transformée de Fourier ou de leur représentation quasi-diagonale mais aussi dans la flexibilité qu'offrent les schémas de subdivision qui permet de travailler avec des plans d'expériences quelconques. Les tests réalisés ont montré une réduction significative du conditionnement des matrices en particulier dans le cas de covariances Gaussiennes qui conduisent rapidement à des problèmes d'inversibilité. Ce préconditionnement multi-échelles a ensuite été intégré dans une procédure de résolution itérative multigrilles du système de Krigeage. Il est apparu que le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre une erreur donnée est divisée d'un facteur supérieur à 1000 dans le cas d'une grille régulière, ce qui permet un gain de temps conséquent. Le cas de la fissuration mécanique a enfin été repris : il est désormais possible d'aller au bout des simulations conditionnelles sans ajouter de variance d'erreur, c'est à dire en préservant le caractère interpolant de la reconstruction.

Plusieurs directions d'investigations se dessinent clairement :

- Formalisation de la construction du préconditionneur : l'expression du terme général du préconditionneur est étroitement liée au comportement de la plus petite valeur propre quand le nombre de points dans le plan d'expériences est très grand mais également à celui de la plus grande valeur propre de l'un des blocs de détails dans la décomposition multi-échelles. Une analyse théorique de ces deux comportements permettrait de préciser le lien entre le comportement asymptotique de la transformée de Fourier de la covariance et le préconditionneur. Elle permettrait en outre de généraliser à une classe plus large de fonctions de covariances et d'explicitier l'influence du nombre de points dans le stencil d'interpolation du schéma de subdivision qui a été illustrée dans le manuscrit.
- Amélioration de la décomposition multi-échelles : l'efficacité de la décomposition dépend du schéma de subdivision utilisé qui va conduire à une représentation quasi-diagonale de certains blocs de détails. Les schémas de subdivision présentent une grande flexibilité dans le choix

de leur masque. Il serait alors intéressant de tester d'autres types de construction de schémas comme celles intégrant des approches non linéaires (Amat and Liandrat, 2005) ou à base de Krigeage (Baccou and Liandrat, 2012) voire proposer de nouveaux schémas adaptés au noyau de covariance.

- Extension de la procédure de stabilisation par préconditionnement multi-échelles : la construction du préconditionneur a été réalisée pour des grilles unidimensionnelles régulières et non régulières. Il s'agirait ici d'abord de généraliser au cas de grilles multi-dimensionnelles. De plus, la méthode mise en oeuvre concerne le Krigeage simple et il serait intéressant de l'adapter au cas du Krigeage Ordinaire et Universel.
- Construction d'un nouveau critère de planification dans le cas de données non stationnaires : le critère *IMSE* pondéré a permis de réaliser une première application sur le cas de données présentant un fort gradient. Il s'appuie sur l'estimation de la dérivée qui permet de capturer les fortes variations mais la reconstruction est toujours faite par un Krigeage utilisant une covariance stationnaire. Une autre piste serait d'intégrer la non stationnarité des données directement dans un noyau de covariance non stationnaire puis de définir un critère de planification basé uniquement sur la variance d'estimation. Ce travail est actuellement en cours à l'IRSN en partant des travaux de Xiong et al. (2007).

# Bibliographie

- R. Ababou, A.C. Bagtzoglou, and E.F. Wood. On the condition number of covariance matrices in kriging, estimation and simulation of random fields. *Mathematical Geology*, 26(1) :99–133, 1994.
- S. Amat and J. Liandrat. On the stability of the PPH nonlinear multiresolution. *Appl. and Comp. Harm. Anal.*, 18 :198–206, 2005.
- S. Amat, F. Arandiga, A. Cohen, R. Donat, G. Garcia, and M. von Oehsen. Data compression with ENO schemes : a case study. *Journal of Applied and Computational Harmonic Analysis*, 11 :273–288, 2001.
- F. Arandiga, R. Donat, and A. Harten. Multiresolution based on weighted averages of the hat function I : linear reconstruction techniques. *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(1) :160–203, 1999a.
- F. Arandiga, R. Donat, and A. Harten. Multiresolution based on weighted averages of the hat function II : non-linear reconstruction techniques. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(3) :1053–1093, 1999b.
- J. Baccou and J. Liandrat. Position-dependent lagrange interpolating multiresolutions. *Int. J. of Wavelets, Multiresol. and Inf.*, 5(4) :513–539, 2005.
- J. Baccou and J. Liandrat. Kriging-based interpolatory subdivision schemes. *Appl. and Comp. Harm. Anal.*, page DOI : 10.1016/j.acha.2012.07.008, 2012.
- R.J. Barnes and A. Watson. Efficient updating of kriging estimates and variances. *Mathematical geology*, 24(1) :129–133, 1992.
- J. Benesty and T. Gansler. Computation of the condition number of a nonsingular symmetric toeplitz matrix with the levinson-durbin algorithm. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 54(6) :2362–2364, 2006.
- L. Buslig, J. Baccou, and V. Picheny. Construction and efficient implementation of adaptive objective-based design of experiments. *Mathematical Geosciences*, 46(3) :285–313, 2014.

- C. Chevalier, J. Bect, D. Ginsbourger, V. Picheny, Y. Richet, and E. Vazquez. Fast kriging-based stepwise uncertainty reduction with application to the identification of an excursion set. *Submitted to Technometrics*, 2012.
- J. P. Chiles and P. Delfiner. *Geostatistics : modelling spatial uncertainty*. Wiley, New York, 695 pp, 1999.
- E. Chojnacki and A. Ounsi. Description of the IPSN method for the uncertainty and sensitivity analysis and the associated software : SUNSET. *ASME/JSME ICONE, Louisiana, USA*, 3 :545–550, 1996.
- C. Chui. *An Introduction to Wavelets*. Academic Press, 1992.
- N. A. Cressie. *Statistics for spatial data*. Wiley, New York, 900 pp, 1993.
- I. Daubechies. *Ten lectures on wavelets*. SIAM, Philadelphia, 1992.
- E. M. Delmelle and P. Goovaerts. Second-phase sampling designs for non-stationary spatial variables. *Geoderma*, 153(1-2) :205–216, 2009.
- G. Deslauriers and S. Dubuc. Interpolation dyadique. In *Fractals, dimensions non entières et applications*, pages 44–45. Masson, Paris, 1987.
- N. Dyn. Subdivision schemes in computer-aides geometric design. *Advances in Numerical Analysis II, Wavelets, Subdivision algorithms and Radial Basis functions*, 2 :36–104, 1992.
- X. Emery. The kriging update equations and their application to the selection of neighboring data. *Computational Geosciences*, 13(1) :211–219, 2009.
- K.T. Fang, R. Li, and A. Sudjianto. *Design and modeling for computer experiments*. Chapman & Hall/CRC, University of Michigan, 290 pp, 2006.
- J. Franco. *Planification d’expériences numériques en phase exploratoire pour la simulation des phénomènes complexes*. PhD thesis, ENSM-SE, 2008.
- D. Ginsbourger, J. Baccou, C. Chevalier, F. Perales, N. Garland, and Y. Monerie. Bayesian adaptive reconstruction of profile optima and optimizers. *accepted in SIAM JUQ*, 2014.
- P. Goovaerts. *Geostatistics for natural resources evaluation*. Oxford University Press, New York, 483 pp, 1997.
- R.M. Gray. *Toeplitz and circulant matrices : a review*. Now Publishers Inc., Boston-Delft, 93 pp, 2006.
- S. Gubian, Y. Xiang, B. Suomela, and J. Hoeng. Generalized simulated annealing for efficient global optimization : the GenSA package for R. *The R Journal*,, 2012. Forthcoming, URL <http://journal.r-project.org>.

- A. Harten. Multiresolution representation of data : a general framework. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(3) :1205–1256, 1996.
- A.G. Journel and C.J. Huijbregts. *Mining Geostatistics*. Academic Press, London, 1978.
- J.P. Kahane and P.G. Lemarié. *Fourier series and wavelets*. Gordon and Breach (London), 1995.
- G. Matheron. The intrinsic random functions, and their applications. *Adv. Appl. Prob.*, 5 :439–468, 1973.
- M. McKay, W. Conover, and R. Beckman. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, 21 :239–245, 1979.
- Y. Meyer. *Ondelettes et Opérateurs I : Ondelettes*. Hermann, Paris, 1990.
- R.H. Myers and D.C. Montgomery. *Response Surface Methodology-Process and Product Optimization using Design Experiments*. Wiley-Blackwell, New York, 704 pp, 1995.
- H. Niederreiter. *Random number generators and quasi-Monte Carlo methods*. SIAM, Philadelphia, 247 pp, 1992.
- R.J. O’Dowd. Conditioning of coefficient matrices of ordinary kriging. *Mathematical Geology*, 23(5) :721–739, 1991.
- E. Pardo-Iguzquiza. Optimal selection of number and location of rainfall gauges for areal rainfall estimation using geostatistics and simulated annealing. *Journal of Hydrology*, 210 :206–220, 1998.
- F. Perales, F. Dubois, Y. Monerie, B. Piar, and L. Stainier. A Non Smooth Contact Dynamics-based multi-domain solver Code coupling (Xper) and application to fracture. *Eur. J. Comp. Mech.*, 19 :389–417, 2010.
- V. Picheny, D. Ginsbourger, O. Roustant, and R. T. Haftka. Adaptive designs of experiments for accurate approximation of a target region. *Journal of Mechanical Design*, 132(7) :071008 (9 pp), 2010.
- D. Posa. Conditioning of the stationary kriging matrices for some well-known covariance models. *Mathematical Geology*, 21(7) :755–765, 1989.
- P. Ranjan, R. Haynes, and R. Karsten. A computationally stable approach to Gaussian process interpolation of deterministic computer simulation data. *Technometrics*, 53(4) :366–378, 2011.

- J. Sacks, W. J. Welch, T. J. Mitchell, and P. Wynn. Design and analysis of computer experiments. *Statistical Science*, 4(4) :409–423, 1989.
- M. J. Sasena, P. Y. Papalambros, and P. Goovaerts. Exploration of metamodeling sampling criteria for constrained global optimization. *Engineering Optimization*, 34(3) :263–278, 2002.
- M. J. Sasena, M. Parkinson, M. P. Reed, P. Y. Papalambros, and P. Goovaerts. Improving an ergonomics testing procedure via approximation-based adaptive experimental design. *Journal of Mechanical Design*, 127 : 1006–1013, 2005.
- R.C. St John and N.R Draper. D-optimality for regression designs : a review. *Technometrics*, 17(1) :15–23, 1975.
- A.N. Tikhonov and V.Y. Arsenin. *Solutions of Ill-Posed Problems*. Winston& Sons, Washington D.C., 258 pp, 1977.
- E. Vazquez and E. Walter. Estimating derivatives and integrals with kriging. *Proceedings of the 44th IEEE Conference on Decision and Control, and the European Control Conference 2005, Sevilla, Spain*, 2005.
- M. Vetterli. Wavelets and filter banks for discrete-time signal processing. In *Wavelets and Their Applications*, pages 17–52. 1992.
- H. Wackernagel. *Multivariate geostatistics*. Springer, Berlin, 291 pp, 1998.
- Y. Xiong, W. Chen, D. Apley, and X. Ding. A non-stationary covariance-based kriging method for metamodelling in engineering design. *Int. J. for Num. Meth. in Engineering*, 71 :733–756, 2007.