

Contrôle des calculs éléments finis à partir de modèles réduits PGD

L. Chamoin¹, P-E. Allier¹, P. Ladevèze¹

¹ LMT, ENS Paris-Saclay, CNRS, Université Paris-Saclay, {chamoin,allier,ladeveze}@ens-paris-saclay.fr

Résumé — On explore l'utilisation de la réduction de modèle dans les procédures de vérification des simulations par éléments finis. A partir du concept d'erreur en relation de comportement, et en notant que le point technique pour utiliser ce concept est la construction de champs admissibles, on montre comment la technique PGD (Proper Generalized Decomposition) peut largement faciliter cette tâche. De plus, on montre que l'utilisation de la PGD permet d'optimiser la procédure de vérification afin d'obtenir des bornes d'erreur très précises avec un coût CPU raisonnable. Des illustrations numériques en 2D et 3D sont présentées pour mesurer les performances de l'approche proposée.

Mots clés — Estimation d'erreur, erreur en relation de comportement, réduction de modèle, PGD.

1 Introduction

Une problématique permanente en calcul de structures est le contrôle des modèles numériques employés afin de certifier les résultats de simulation. Dans ce contexte, la vérification de modèle cherche à estimer la qualité du modèle numérique vis-à-vis d'un modèle mathématique de référence afin notamment de conduire efficacement les algorithmes adaptatifs (raffinement de maillage en particulier). Depuis plus de 30 ans, une large gamme d'outils d'estimation d'erreur *a posteriori* a été définie, principalement pour la Méthode des Éléments Finis ; une synthèse récente de ces outils peut être trouvée dans [2]. Ici, on s'intéresse au concept d'erreur en relation de comportement (ERC) introduit dans [4]. Pour les modèles de mécanique numérique, dans lesquels la relation de comportement joue un rôle majeur, le concept d'ERC est un outil de vérification puissant. L'idée est de définir, en post-traitement du calcul EF, des champs dits admissibles vérifiant toutes les équations du modèle hormis la relation de comportement, puis de mesurer le résidu sur cette relation. Le concept d'ERC permet d'obtenir des bornes strictes et précises de l'erreur de discrétisation pour une large gamme de modèles de mécanique des structures. Il fut initialement utilisé pour les problèmes de thermique et d'élasticité [4] avant d'être étendu aux problèmes non-linéaires et/ou dépendant du temps [6], ainsi qu'au contrôle de quantités d'intérêt [7]. L'utilisation du concept d'ERC, dont une vision générale peut être trouvée dans [6, 2], nécessite en particulier la construction de champs duaux (flux, contraintes) en équilibre. Cette construction, qui constitue le principal point dur en termes de coût de calcul et de technicité d'implémentation, peut être menée avec différentes approches [6, 10] ; toutes réalisent un post-traitement de la solution approchée disponible et nécessitent la résolution de problèmes locaux. Nous nous focalisons ici sur l'approche dite *hybrid-flux* (ou *EET*).

L'objectif de ce travail est d'introduire de nouveaux outils numériques, basés sur les techniques de réduction de modèle et une stratégie *offline-online*, au sein de la méthode de construction de champs en équilibre afin de rendre le concept d'ERC pleinement exploitable dans les codes industriels et les applications pratiques. Pour cela, on prend la technique *Proper Generalized Decomposition* (PGD) qui a été largement analysée et mise en oeuvre ces dernières années pour résoudre des problèmes complexes multi-paramétriques [3]. Dans un premier temps, à partir de l'approche *hybrid-flux* classique, on introduit un modèle réduit à l'échelle de chaque élément du maillage. Cette approche, notée ultérieurement *EET-PGD*, mène au pré-calcul par la PGD (dans une phase *offline*) de l'équilibre local à partir des données (densités d'effort sur le bord de l'élément, géométrie de l'élément, ...). Les solutions PGD élémentaires sont ensuite évaluées dans la phase *online* pour calculer l'estimateur d'erreur. Dans un second temps, à partir de la représentation PGD précédente, on aborde l'optimisation des densités d'effort (*hybrid fluxes*) en introduisant les inconnues duales sur chaque élément du maillage. Cela définit un problème d'opti-

misation global dans lequel tous les calculs coûteux peuvent être faits dans l'étape *offline*. Cette dernière approche est notée ultérieurement *HFT-PGD*.

On vise ici à donner un aperçu général des capacités de la PGD pour la vérification de modèle basée sur le concept d'ERC. Dans un soucis de simplicité et de clarté, on présente et illustre la méthode sur un problème scalaire elliptique (de type équation de la chaleur stationnaire) pour lequel on montre une diminution drastique du temps CPU et de la technicité nécessaires pour mettre en oeuvre l'estimation d'erreur, ainsi que la qualité accrue des bornes d'erreur obtenues. L'extension à l'élasticité ou aux problèmes non-linéaires dépendant du temps est directe à partir de la littérature existante [5, 6], la technique proposée reposant sur les équations d'équilibre seules. Aussi, pour les problèmes dépendant du temps, le gain numérique obtenu avec la méthode est augmenté car la construction de champs équilibrés doit être réalisée à chaque piquet de temps. Ce travail apparait donc comme une voie intéressante pour : (i) définir une méthode de vérification à la fois robuste, pratique, et applicable en temps court dans les simulations numériques ; (ii) tendre vers la conception de maillages optimaux et le raffinement de maillage à la volée.

2 Présentation de la méthode EET-PGD

2.1 Problème de référence

On considère le problème de thermique stationnaire suivant : trouver le couple température/flux (u, \mathbf{q}) vérifiant :

$$\begin{aligned} u &\in \mathcal{U} \quad ; \quad u = u_d \quad \text{sur } \partial_1 \Omega \quad (\text{liaisons cinématiques}) \\ \mathbf{q} &\in \mathcal{S} \quad ; \quad \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \nabla u^* = \int_{\Omega} f_d u^* + \int_{\partial_2 \Omega} F_d u^* \quad \forall u^* \in \mathcal{U}_0 \quad (\text{équations d'équilibre}) \\ &\quad \quad \quad \mathbf{q} = \mathcal{K} \nabla u \quad (\text{relation de comportement}) \end{aligned} \quad (1)$$

avec $\mathcal{U} = H^1(\Omega)$ et $\mathcal{S} = H(\text{div}, \Omega) = \{\boldsymbol{\pi} \in [L^2(\Omega)]^d, \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} \in L^2(\Omega)\}$. \mathcal{K} est un opérateur du second ordre symétrique défini positif. On introduit la semi-norme en énergie $\|\cdot\|_{\mathcal{U}} = \sqrt{\int_{\Omega} \nabla(\cdot) \cdot \mathcal{K} \nabla(\cdot)}$. Pour un couple $(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}})$ admissible, i.e. vérifiant les liaisons cinématiques et les équations d'équilibre, la fonctionnelle ERC est définie par :

$$E_{CRE}^2(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{q}} - \mathcal{K} \nabla \hat{u}) \mathcal{K}^{-1} (\hat{\mathbf{q}} - \mathcal{K} \nabla \hat{u}) = \frac{1}{2} \|\hat{\mathbf{q}} - \mathcal{K} \nabla \hat{u}\|_{\mathcal{S}}^2 \quad (2)$$

Elle mesure la non-vérification de la relation de comportement par $(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}})$ et peut être utilisée comme un estimateur d'erreur. En effet, après avoir calculé une solution EF $(u_h, \mathbf{q}_h = \mathcal{K} \nabla u_h)$, le choix $\hat{u} = u_h$ et la construction d'un champ équilibré $\hat{\mathbf{q}}_h$ donnent :

$$\|u_h - u\|_{\mathcal{U}} \leq \sqrt{2} E_{CRE}(u_h, \hat{\mathbf{q}}_h) \quad (3)$$

La qualité de l'estimateur dépend bien entendu de celle de $\hat{\mathbf{q}}_h$.

Le champ $\hat{\mathbf{q}}_h$ peut en pratique être construit en post-traitement du calcul EF, à partir de l'approche *hybrid-flux* qui se décompose en deux étapes :

- (i) **Etape 1** : construction de densités $\hat{F}_K|_{\Gamma} = \eta_K^{\Gamma} \hat{F}_{\Gamma}$ sur les bords Γ de chaque élément K du maillage, telles que l'équilibre élémentaire $\int_K f_d + \int_{\partial K} \hat{F}_K = 0$ est vérifié. Ceci est réalisé à partir d'une condition de prolongement, et les densités sont recherchées comme des combinaisons linéaires des fonctions de forme EF : $\hat{F}_K|_{\Gamma}(\mathbf{x}) = \sum_{j \in \mathcal{J}_{\Gamma}} \hat{F}_K^j|_{\Gamma} \phi_j(\mathbf{x})$ (voir Figure 1).
- (ii) **Etape 2** : construction locale, pour des densités \hat{F}_K données et sur chaque élément K , de $\hat{\mathbf{q}}_{h|K}$ en résolvant le problème de Neumann suivant avec une discrétisation de haut degré :

$$\int_K \mathcal{K} \nabla \rho \cdot \nabla u^* = \int_K f_d u^* + \int_{\partial K} \hat{F}_K u^* \quad \forall u^* \in \mathcal{U}(K) \quad ; \quad \hat{\mathbf{q}}_{h|K} = \mathcal{K} \nabla \rho \quad (4)$$

Résoudre (4) est en pratique la partie la plus coûteuse de la méthode EET, en particulier pour les applications 3D.

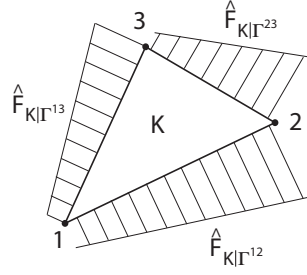


FIGURE 1 – Configuration pour un élément triangulaire à 3 noeuds.

2.2 Paramétrage des problèmes locaux

Par simplicité, on considère ici que le matériau est isotrope et homogène sur chaque élément K , de telle sorte que les paramètres matériau n'ont pas d'influence sur $\hat{q}_{h|K}$; on prend donc $\mathcal{K} = \mathbb{I}$ quand on résout (4) et on définit $\hat{q}_{h|K} = \nabla \rho$. Dans le cas où le matériau est hétérogène dans un élément ou n'est pas isotrope, sa structure peut être paramétrée et des paramètres matériau additionnels peuvent être introduits dans la décomposition PGD donnée plus tard.

Les densités construites à l'étape 1 étant des combinaisons linéaires des fonctions de forme EF sur chaque bord Γ d'un élément K , la solution ρ de (4) peut être écrite comme une combinaison linéaire de solutions élémentaires ρ_Γ^j :

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\Gamma \subset \partial K} \sum_{j \in \mathcal{J}_\Gamma} \hat{F}_{K|\Gamma}^j \rho_\Gamma^j(\mathbf{x}) \quad (5)$$

où ρ_Γ^j est la solution (à une constante près) du problème élémentaire :

$$\int_K \nabla \rho_\Gamma^j \cdot \nabla u^* = \int_\Gamma \phi_j u^* - \int_K \left(\frac{1}{|K|} \int_\Gamma \phi_j \right) u^* \quad \forall u^* \in \mathcal{U}(K) \quad (6)$$

L'idée est alors de déterminer la solution ρ_Γ^j de chaque problème (6) avec la technique PGD, pour tout élément K , en paramétrant la géométrie de K avec un ensemble de paramètres $\mathbf{p}_{geo} \in \mathcal{P}$. En suivant l'approche décrite dans [1], on reformule le problème (6) en introduisant une transformation géométrique paramétrée $\mathcal{M}(\mathbf{p}_{geo}) : K_{ref} \rightarrow K(\mathbf{p}_{geo})$ à partir d'un élément de référence K_{ref} . Une telle transformation permet alors de définir le problème faible dans un espace tensorisé puis d'appliquer la méthode PGD et calculer des solutions paramétrées $\rho_\Gamma^j(\mathbf{p}_{geo})$ génériques qui peuvent ultérieurement être utilisées pour tout élément du maillage.

La transformation est définie à partir de deux sous-transformations (Figure 2) :

- une première transformation d'échelle $\mathcal{M}_1 : \bar{K} \rightarrow K$ transforme un élément homothétique \bar{K} de diamètre 1 en l'élément courant K de diamètre α . Cette transformation implique la matrice $\mathbb{T}_1 = \alpha \mathbb{I}_d$ telle que $\mathbf{x} = \mathbb{T}_1 \bar{\mathbf{x}}$;
- une seconde transformation isoparamétrique $\mathcal{M}_2 : K_{ref} \rightarrow \bar{K}$ transforme l'élément de référence K_{ref} en l'élément \bar{K} . Cette transformation implique la matrice \mathbb{T}_2 telle que $\bar{\mathbf{x}} = \mathbb{T}_2 \mathbf{x}_{ref}$.

La transformation globale est donc $\mathcal{M}(\mathbf{p}_{geo}) = \mathcal{M}_1 \circ \mathcal{M}_2$; on définit la matrice jacobienne $\mathbb{J} = \alpha \mathbb{T}_2$ et le jacobien $J(\mathbf{p}_{geo}) = \det(\mathbb{J})$.

Pour illustration, on a pour des éléments triangulaires à 3 noeuds (Figure 2) :

$$\begin{pmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^3 \bar{x}_i \phi_i(\eta, \xi) \\ \sum_{i=1}^3 \bar{y}_i \phi_i(\eta, \xi) \end{pmatrix} = \mathbb{T}_2 \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathbb{T}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \bar{x}_3 \\ 0 & \bar{y}_3 \end{bmatrix} \quad (7)$$

où (\bar{x}_3, \bar{y}_3) sont les coordonnées locales du noeud 3 dans le système de coordonnées associé à l'élément K_{ref} . La transformation globale \mathcal{M} implique donc 3 paramètres, i.e. $\mathbf{p}_{geo} = (\alpha, \bar{x}_3, \bar{y}_3)$, et $J = \alpha^2 \bar{y}_3$.

Par conséquent, le problème (6) peut être défini dans un élément de référence fixe K_{ref} sous la forme :

$$\int_{K_{ref}} J \mathbb{J}^{-T} \nabla \rho_\Gamma^j \cdot \mathbb{J}^{-T} \nabla u^* = \int_{\Gamma_{ref}} J_s \phi_j u^* - \int_{K_{ref}} J \left(\frac{1}{|K|} \int_{\Gamma_{ref}} J_s \phi_j \right) u^* \quad \forall u^* \in \mathcal{U}(K_{ref}) \quad (8)$$

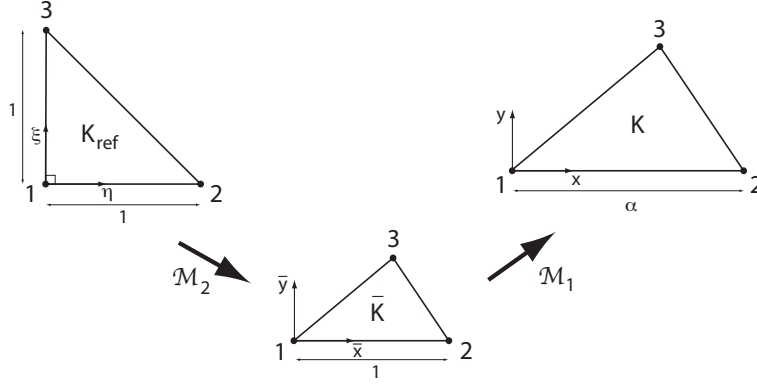


FIGURE 2 – Transformation paramétrée pour un élément triangulaire à 3 noeuds.

avec J_s le jacobien associé à la transformation du bord Γ . Pour des éléments triangulaires à 3 noeuds (Figure 2), il s'écrit :

$$J_s = \alpha \begin{cases} 1 & \text{sur } \Gamma^{12} \\ \sqrt{(1 - \bar{x}_3)^2 + \bar{y}_3^2} & \text{sur } \Gamma^{23} \\ \sqrt{\bar{x}_3^2 + \bar{y}_3^2} & \text{sur } \Gamma^{13} \end{cases} \quad (9)$$

Remarque 1 Le nombre de problèmes élémentaires (6) (ou (8)) et le nombre de paramètres impliqués dans la transformation \mathcal{M} (taille de \mathbf{p}_{geo}) dépend du type d'élément. Par exemple :

- les éléments triangulaires à 3 noeuds impliquent 6 problèmes élémentaires (2 pour chacun des 3 côtés) et 3 paramètres géométriques (6 degrés de liberté avec 3 mouvements de solide rigide) ;
- les éléments triangulaires à 6 noeuds impliquent 9 problèmes élémentaires (3 pour chacun des 3 côtés) et 9 paramètres géométriques (12 degrés de liberté avec 3 mouvements de solide rigide) ;
- les éléments tétraédriques à 4 noeuds impliquent 12 problèmes élémentaires (3 pour chacun des 4 côtés) et 6 paramètres géométriques (12 degrés de liberté avec 6 mouvements de solide rigide).

2.3 Solution PGD

On introduit à présent un modèle réduit, à l'échelle de l'élément et basé sur la PGD, pour déterminer, dans une phase *offline* (une fois pour toutes), une approximation paramétrée des solutions $\rho_{\Gamma}^j(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo})$. Cette approximations sont cherchées sous forme d'une décomposition modale à variables séparées (tenseur de format canonique et de faible rang). Parmi les diverses stratégies pour construire la solution PGD [9], on utilise celle appelée *progressive Galerkin*.

A partir de (8), on introduit les formes bilinéaire B et linéaire F construites à partir de la transformation jacobienne paramétrique à variables séparées (tous les détails techniques peuvent être trouvés dans [1]). En définissant l'intervalle $I_{p_{geo}^k}$ dans lequel le paramètre p_{geo}^k évolue ($1 \leq k \leq P = \dim(\mathbf{p}_{geo})$), ces formes s'écrivent :

$$\begin{aligned} B(\rho_{\Gamma}^j, v) &= \int_{I_{\alpha}} \int_{I_{p_{geo},1}} \dots \int_{I_{p_{geo},P}} \int_{K_{ref}} J \cdot \mathbb{J}^{-T} \nabla \rho_{\Gamma}^j \cdot \mathbb{J}^{-T} \nabla v \\ F(v) &= \int_{I_{\alpha}} \int_{I_{p_{geo},1}} \dots \int_{I_{p_{geo},P}} \left[\int_{\Gamma_{ref}} J_s \phi_j v - \int_{K_{ref}} J \cdot \left(\frac{1}{|K|} \int_{\Gamma_{ref}} J_s \phi_j \right) v \right] \end{aligned} \quad (10)$$

Le paramètre α est inclus seulement pour que la description soit complète ; il agit comme une constante multiplicative dans la solution ρ et disparaît quand on calcule $\hat{\mathbf{q}}_{h|K} = \mathcal{K} \nabla \rho$. Les solutions PGD s'écrivent alors (à l'ordre m) :

$$\rho_{\Gamma,m}^j(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}) = \alpha \sum_{i=1}^m \left(\psi_i(\mathbf{x}_{ref}) \prod_{2 \leq k \leq P} \delta_i^{p_{geo,k}}(p_{geo,k}) \right) \quad (11)$$

Les fonctions spatiales $\psi_i(\mathbf{x}_{ref})$ dans (11) sont calculées en utilisant la MEF avec un seul élément de degré $p + k$. Les autres fonctions sont discrétisés à partir d'une grille fine sur les espaces individuels

$I_{p_{geo,k}}$. De plus, les racines carrées qui apparaissent dans J_s sont approchées en utilisant la SVD (ou HO-SVD) et une interpolation polynomiale de haut degré (degré 8 en pratique).

Remarque 2 Le nombre m de modes PGD nécessaires pour obtenir des solutions $\rho_{\Gamma,m}^j$ précises peut être rigoureusement défini à partir d'outils d'estimation d'erreur dédiés à la PGD [8]. En particulier, ce nombre doit être choisi avec attention pour les cas extrêmes avec éléments distordus ; cependant ceux-ci sont généralement évités en pratique.

En combinant (5) et (11), une représentation PGD de $\rho(\mathbf{x})$ solution de (4) s'écrit :

$$\rho_m(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}, \{\widehat{F}_{K|\Gamma}^j\}) = \sum_{\Gamma \subset \partial K} \sum_{j \in \mathcal{J}_\Gamma} \widehat{F}_{K|\Gamma}^j \rho_{\Gamma,m}^j(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}) \quad (12)$$

Elle fournit un champ de flux paramétré et équilibré à l'échelle de l'élément :

$$\widehat{\mathbf{q}}_{h,m|K}(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}, \{\widehat{F}_{K|\Gamma}^j\}) = \mathbb{J}^{-T}(\mathbf{p}_{geo}) \nabla \left(\sum_{\Gamma \subset \partial K} \sum_{j \in \mathcal{J}_\Gamma} \widehat{F}_{K|\Gamma}^j \rho_{\Gamma,m}^j(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}) \right) \quad (13)$$

qui peut être directement utilisé *online* dans la procédure d'estimation d'erreur *a posteriori*, dans un contexte *multi-requêtes* et pour tout élément K du maillage.

3 Présentation de la méthode d'optimisation HFT-PGD

La qualité de l'estimateur ERC est liée à celle des densités en équilibre $\widehat{F}_{K|\Gamma}$ construites à la frontière des éléments, donc optimiser ces densités est pertinent. Cependant, cela mène dans le cadre classique à un problème d'optimisation global qui est compliqué à résoudre sans outils numériques adaptés. On souhaite ici tirer parti de la représentation PGD (13) pour mener une optimisation globale des densités $\widehat{F}_{K|\Gamma}$ en minimisant la fonctionnelle ERC. Cette procédure, qui serait hors de portée avec une approche standard, est largement facilitée par la dépendance explicite du champ admissible (équilibré) $\widehat{\mathbf{q}}_{h,m}$ par rapport aux quantités $\{\widehat{F}_{K|\Gamma}^j\}$ que fournit la PGD.

3.1 Problème d'optimisation

On définit l'espace (de dimension infinie) des densités en équilibre :

$$\mathcal{F} = \left\{ \{\widehat{F}_\Gamma(\mathbf{x})\}; \int_K f_d + \sum_{\Gamma \subset \partial K} \int_\Gamma \eta_K^\Gamma \widehat{F}_\Gamma = 0 \text{ pour tout } K, \quad \eta_K^\Gamma \widehat{F}_\Gamma = F_d \text{ si } \Gamma \subset \partial_2 \Omega \right\} \quad (14)$$

Dans cet espace, on considère le sous-espace (de dimension finie) des densités qui sont une combinaison linéaire des fonctions de forme sur chaque bord :

$$\mathcal{F}_\ell = \left\{ \{\widehat{F}_\Gamma(\mathbf{x})\} \in \mathcal{F}; \widehat{F}_\Gamma(\mathbf{x}) = \sum_{j \in \mathcal{J}_\Gamma} \widehat{F}_\Gamma^j \phi_j(\mathbf{x}) \right\} \subset \mathcal{F} \quad (15)$$

La dimension de \mathcal{F}_ℓ dépend du degré polynomial des fonctions de forme EF et du nombre de bords. Par conséquent, les inconnues du problème sont les données d'interface $\{\widehat{F}_\Gamma^j\}$ qui sont regroupées dans un vecteur global $\widehat{\mathbf{F}}$ de longueur N_F . La contrainte indiquant que $\{\widehat{F}_\Gamma^j\}$ donne des densités qui appartiennent à \mathcal{F} peut être écrite $\mathbb{C}\widehat{\mathbf{F}} = \widehat{\mathbf{F}}_d$. Le problème d'optimisation est :

$$\{\widehat{F}_\Gamma(\mathbf{x})\}_{opt} = \underset{\{\widehat{F}_\Gamma\} \in \mathcal{F}_\ell}{\operatorname{argmin}} E_{CRE}^2(u_h, \widehat{\mathbf{q}}_h(\{\widehat{F}_\Gamma\})) \quad (16)$$

3.2 Solution utilisant la PGD

D'une part, à partir de la représentation PGD (13) de $\hat{\mathbf{q}}_{h,m|K}$:

$$\hat{\mathbf{q}}_{h,m|K}(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}, \{\hat{\mathbf{F}}_{\Gamma}^j\}) = \mathbb{J}^{-T}(\mathbf{p}_{geo}) \nabla \left(\sum_{\Gamma \subset \partial K} \sum_{j \in \mathcal{J}_{\Gamma}} \eta_{K}^{\Gamma} \hat{\mathbf{F}}_{\Gamma}^j \rho_{\Gamma,m}^j(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}) \right) \quad (17)$$

le champ admissible global $\hat{\mathbf{q}}_{h,m}$ calculé par la PGD s'écrit :

$$\hat{\mathbf{q}}_{h,m} = \mathbb{N}(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo}) \hat{\mathbf{F}} \quad (18)$$

où $\mathbb{N}(\mathbf{x}_{ref}, \mathbf{p}_{geo})$ est une matrice $d \times N_F$ paramétrée. D'autre part, la représentation PGD de $E_{CRE}^2(u_h, \hat{\mathbf{q}}_{h,m}(\{\hat{\mathbf{F}}_{\Gamma}^j\}))$ s'écrit :

$$E_{CRE}^2(u_h, \hat{\mathbf{q}}_{h,m}) = \frac{1}{2} \|\hat{\mathbf{q}}_{h,m}\|_s^2 - \int_{\Omega} \hat{\mathbf{q}}_{h,m} \nabla u_h + \frac{1}{2} \|u_h\|_u^2 = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{F}}^T \mathbb{M} \hat{\mathbf{F}} - \hat{\mathbf{F}}^T \mathbb{L} \mathbf{U}_h + \frac{1}{2} \|u_h\|_u^2 \quad (19)$$

avec $\mathbb{M} = \int_{\Omega} \mathbb{N}^T \mathcal{K} \mathbb{N}$ et $\mathbb{L} = \int_{\Omega} \mathbb{N}^T \mathbb{B} (\mathbb{B} \mathbf{U}_h = \nabla u_h)$.

Dès lors, le problème d'optimisation se met sous la forme :

$$\hat{\mathbf{F}}_{opt} = \underset{\hat{\mathbf{F}}, \mathbb{C} \hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{F}}_d}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{1}{2} \hat{\mathbf{F}}^T \mathbb{M} \hat{\mathbf{F}} - \hat{\mathbf{F}}^T \mathbb{L} \mathbf{U}_h \right) \quad (20)$$

Il est résolu en utilisant un lagrangien et mène au système :

$$\begin{pmatrix} \mathbb{M} & \mathbb{C}^T \\ \mathbb{C} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{opt} \\ \boldsymbol{\Lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{L} \mathbf{U}_h \\ \hat{\mathbf{F}}_d \end{pmatrix} \quad (21)$$

On note que les matrices \mathbb{M} , \mathbb{C} et \mathbb{L} peuvent être pré-calculées (et donc la matrice du système peut être factorisée) dans la phase *offline* et définies sous une forme PGD, à partir des matrices élémentaires données à l'échelle de l'élément et de la topologie du maillage.

Après avoir inversé le système (21), l'estimateur CRE est récupéré par :

$$E_{CRE}^2 = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{F}}_{opt}^T \mathbb{M} \hat{\mathbf{F}}_{opt} - \hat{\mathbf{F}}_{opt}^T \mathbb{L} \mathbf{U}_h + \frac{1}{2} \|u_h\|_u^2 \quad (22)$$

Remarque 3 Dans le cas de problèmes non-linéaires, la fonctionnelle CRE est non-linéaire par rapport à $\hat{\mathbf{q}}_{h,m}$ donc des méthodes de minimisation itératives sont nécessaires. Une alternative est de minimiser $\|\hat{\mathbf{q}}_{h,m} - \mathbf{q}_h\|_s$.

La technique HFT-PGD, qui utilise la PGD tout au long du processus d'estimation d'erreur, fournit donc une alternative à l'approche EET classique.

4 Illustration numérique

On réalise l'estimation d'erreur sur une plaque trouée Ω , vis-à-vis d'un maillage fait d'éléments triangulaires à 3 noeuds (Figure 3). On choisit un matériau homogène et isotrope avec $\mathcal{K} = \mathbb{I}$. Une température nulle est imposée sur le bord externe $\partial_1 \Omega$ tandis qu'un flux normal $r_d = 1$ est imposé sur le bord interne $\partial_2 \Omega$ (bord du trou). Par symétrie, on ne conserve qu'un quart de la structure.

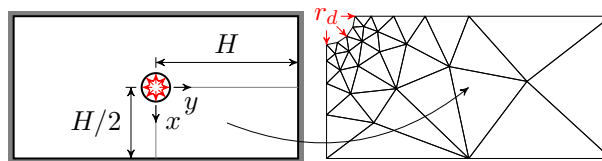


FIGURE 3 – Structure étudiée avec chargement appliqué et maillage

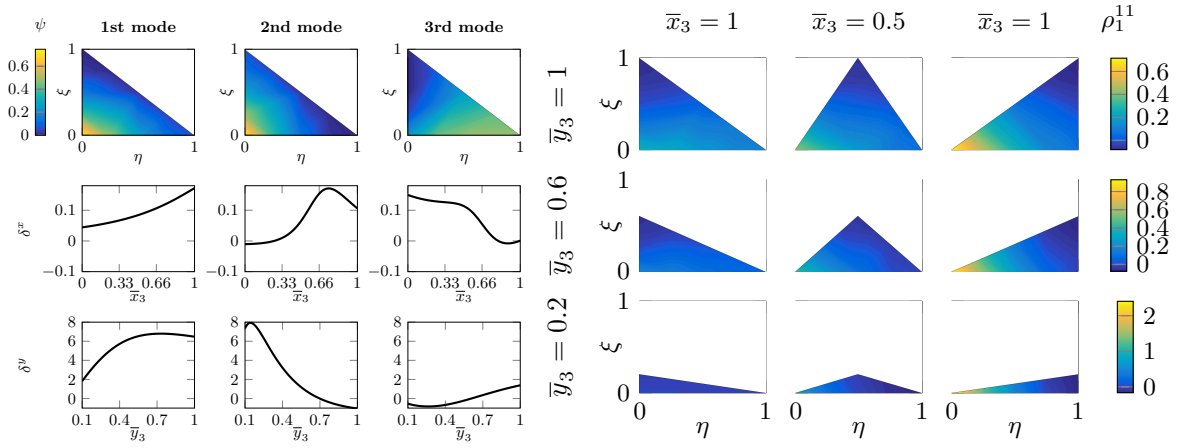


FIGURE 4 – Premiers modes PGD de $\rho_{\Gamma^{12},20}^1$ (gauche), solution PGD paramétrée $\rho_{\Gamma^{12},20}^1$ pour diverses configurations de paramètres (droite).

A partir des notations de la Figure 2, on calcule les solutions paramétrées $\rho_{\Gamma^{kl},m}^j(\mathbf{x}_{ref}, \alpha, \bar{x}_3, \bar{y}_3) = \alpha \sum_{i=1}^m \psi_i(\mathbf{x}_{ref}) \delta_i^x(\bar{x}_3) \delta_i^y(\bar{y}_3)$ de (6) avec 20 modes ($m = 20$). Les trois premiers modes de $\rho_{\Gamma^{12},20}^1$ sont montrés sur la Figure 4, ainsi que l’approximation obtenue pour différentes valeurs de \bar{x}_3 et \bar{y}_3 .

Après avoir identifié les paramètres PGD α , \bar{x}_3 et \bar{y}_3 sur chaque élément du maillage (Figure 5), une approximation PGD précise du flux admissible peut être obtenue (évaluation directe et peu coûteuse) dans la phase *online*. Sur la Figure 5, on compare les contributions locales de l’estimateur CRE obtenues avec la technique EET classique ou la technique EET-PGD, et on représente également celles correspondant à l’erreur exacte (évaluée à partir d’un maillage très fin). On observe une très bonne concordance entre les estimateurs.

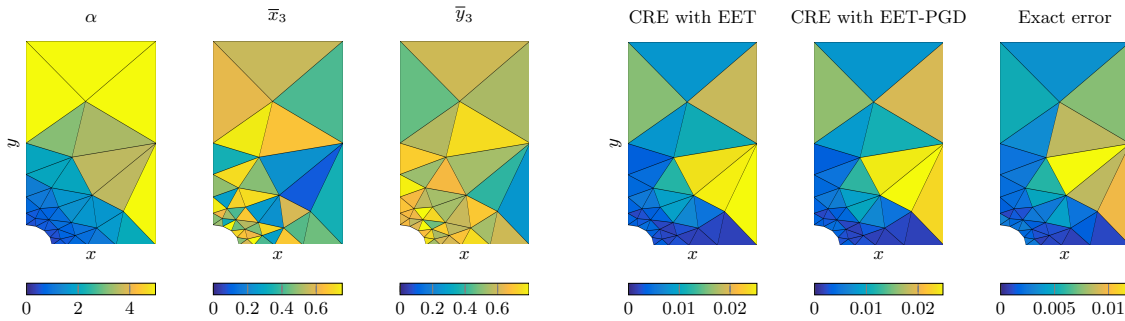


FIGURE 5 – Valeurs identifiées des paramètres PGD pour chaque élément du maillage (gauche), contributions locales de l’erreur prédite ou vraie (droite).

On représente sur la Figure 6 l’évolution de l’erreur relative $\frac{\|\hat{\mathbf{q}}_{h,m} - \hat{\mathbf{q}}_h\|_s}{\|\hat{\mathbf{q}}_h\|_s}$ en fonction du nombre m de modes PGD choisis ($\hat{\mathbf{q}}_h$ est le flux équilibré construit avec la technique EET standard). On observe qu’une très bonne approximation peut être obtenue avec un nombre de modes modéré ($m = 7$ suffit). Enfin, on compare le temps CPU nécessaire pour calculer le flux admissible en fonction de la méthode utilisée (Figure 6). On observe un gain de 10 dans l’étape 2 de construction locale du flux équilibré, ainsi qu’un gain global de 2. Ce gain augmente au fur et à mesure que le nombre d’éléments augmente, atteignant 125 (pour l’étape 2 seule) et 5 (globalement) avec un maillage à 2688 éléments.

On représente sur la Figure 7 l’indice d’efficacité pour les techniques de reconstruction EET, EET-PGD et HFT-PGD, en fonction du nombre m de modes PGD considérés. On observe que l’optimisation globale apportée par la technique HFT-PGD améliore considérablement la qualité de l’estimateur d’erreur, l’indice d’efficacité tendant vers 1 quand m augmente. On trace également, pour $m = 3$, l’évolution du gain CPU des techniques EET, EET-PGD et HFT-PGD comparé au temps CPU de la simulation EF. On observe que contrairement aux techniques EET et EET-PGD, la technique HFT-PGD mène à une procédure d’estimation d’erreur qui est beaucoup moins coûteuse que la simulation EF elle-même.

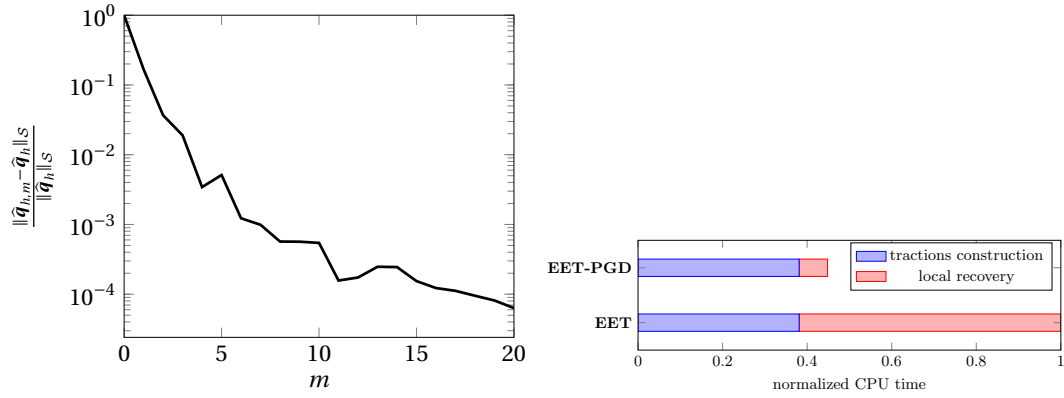


FIGURE 6 – Evolution de l’erreur relative sur le flux en fonction du nombre de modes (gauche), comparaison des temps CPU (droite).

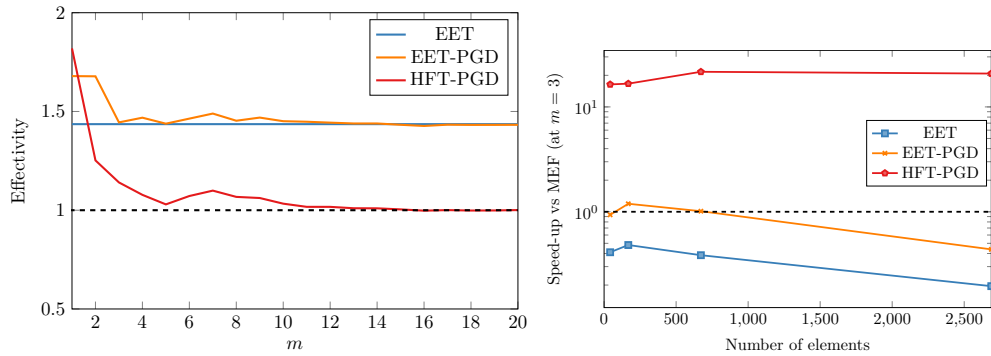


FIGURE 7 – Evolution de l’indice d’efficacité en fonction du nombre de modes PGD (gauche), et rapport des temps CPU par rapport au temps CPU du calcul EF pour différentes tailles d’éléments.

Références

- [1] A. Ammar, A. Huerta, A. Leygue, F. Chinesta, E. Cueto. *Parametric solutions involving geometry : a step towards efficient shape optimization*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **268**(1) :178–193, 2014.
- [2] L. Chamoin L, P. Díez (ed). *Verifying calculations, forty years on : an overview of classical verification techniques for FEM simulations*, SpringerBriefs, 2015.
- [3] F. Chinesta, R. Keunings, A. Leygue. *The Proper Generalized Decomposition for advanced numerical simulations*, Springer International Publishing, 2014.
- [4] P. Ladevèze, D. Leguillon. *Error estimate procedure in the finite element method and application*, SIAM Journal of Numerical Analysis, **20**(3) :485–509, 1983.
- [5] P. Ladevèze, N. Moës, B. Douchin. *Constitutive relation error estimators for (visco)plastic finite element analysis with softening*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **176** :247–264, 1999.
- [6] P. Ladevèze, J-P. Pelle. *Mastering Calculations in Linear and Nonlinear Mechanics*, Springer NY, 2004.
- [7] P. Ladevèze. *Strict upper error bounds for calculated outputs of interest in computational structural mechanics*, Computational Mechanics, **42**(2) :271–286, 2008.
- [8] P. Ladevèze, L. Chamoin. *On the verification of model reduction methods based on the Proper Generalized Decomposition*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **200** :2032–2047, 2011.
- [9] A. Nouy. *A priori model reduction through proper generalized decomposition for solving time dependent partial differential equations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **199** :1603–1626, 2010.
- [10] F. Pled, L. Chamoin, P. Ladevèze. *On the techniques for constructing admissible stress fields in model verification : performances on engineering examples*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, **88**(5) :409–441, 2011.