

Optimisation de structures viscoplastiques par couplage entre métamodèle multi-fidélité et modèles réduits

S. Nachar, P.A. Boucard, D. Néron

LMT, ENS Cachan/CNRS/Université Paris-Saclay, {nachar, boucard,neron}@ens-paris-saclay.fr

Résumé — Les travaux présentés portent sur deux types de problèmes : la génération rapide d'un abaque virtuel d'une quantité d'intérêt d'une part, et l'optimisation d'un critère d'autre part. Ces deux problèmes utilisent des métamodèles qui exploitent des données multi-fidélités associées à la génération à la volée d'une base réduite des champs mécaniques. Le point clé est la génération d'observations basse et haute fidélité à partir du même solveur non linéaire exploitant un modèle réduit PGD. Cette méthode permet une accélération des calculs pouvant aller jusqu'à un facteur 55 sur le cas-test proposé.

Mots clés — Optimisation, Métamodèle, Modèles réduits, Non linéaire

1 Introduction

Les outils de simulation numérique ont permis l'émergence de nouveaux process de développement de produits, à la fois plus courts mais moins coûteux. La question du temps de simulation est néanmoins un enjeu majeur car la volonté actuelle est de conserver la durée allouée à l'optimisation du produit, tout en étant capable de prendre en compte des modèles non linéaires, multiphysiques, sur un maximum de configurations. Dans ces conditions, l'appel direct à des solveurs exacts n'est pas acceptable pour la génération d'un abaque virtuel ou pour une optimisation, et des métamodèles sont couramment utilisés pour étudier l'impact des différentes configurations avec un nombre réduit d'observations.

Les métamodèles sont des modèles statistiques ou fonctionnels sur des données entrée-sortie obtenues par mesures expérimentales ou simulations numériques. Les entrées sont des paramètres \underline{x} choisis dans un espace de conception \mathcal{D} et les sorties sont des quantités scalaires d'intérêt (QoI) calculées à partir des champs mécaniques spatio-temporels complets. Chaque valeur observée, représentant un point dans l'espace de conception, nécessite l'appel à un solveur mécanique et l'emploi d'importantes ressources de calcul.

Générer le métamodèle d'une quantité d'intérêt nécessite un grand nombre d'observations. Une possibilité est d'utiliser de multiples sources de qualité différentes pour générer un métamodèle multi-fidélité. Dans un premier temps, de nombreux calculs basse fidélité (donc rapides) peuvent être effectués pour avoir une première approximation de la réponse. Avec cette information, les points suivants calculés seront les points maximisant le gain d'information estimé. Ces points calculés de manière approchée et exacte permettront de corriger les données approximés calculés précédemment, et d'améliorer le métamodèle sur tout l'espace de conception en cas de création d'un abaque virtuel, ou uniquement dans les zones où l'optimum global a la plus forte probabilité de s'y trouver.

Une autre manière d'accélérer le calcul est l'utilisation de la réduction de modèles pour initialiser et approximer les champs et donc les quantités d'intérêt. Les méthodes de réduction de modèle couramment employées sont la Proper Orthogonalized Decomposition (POD) et ses extensions, la méthode Reduced-Basis [1] ou encore la Proper Generalized Decomposition [2, 3]. Le principal avantage de ces techniques est que le temps de calcul est directement corrélé au nombre de modes générés et donc à la qualité de l'approximation.

Les travaux présentés ont pour but de coupler les techniques de génération de métamodèles multi-fidélité, avec la génération de champs mécaniques par une méthode de réduction de modèles. Ce couplage sera réalisé sur un cas industriel pour quantifier les gains en temps de calcul.

2 Génération du métamodèle multi-fidélité de la quantité d'intérêt

Le problème considéré sera l'étude d'une quantité d'intérêt associée à une structure mécanique paramétrée par des variables matériaux et de chargement \underline{x} appartenant à un espace de conception \mathcal{D} . Pour chaque valeur $\underline{x} \in \mathcal{D}$, un problème mécanique spatio-temporel est résolu afin d'en extraire une quantité d'intérêt (QoI) scalaire, appelée Y . La fonction correspondante est donc la fonction $\underline{x} \in \mathcal{D} \mapsto Y(\underline{x}) \in \mathbb{R}$, mais elle n'est pas abordable directement pour des raisons évidentes de coût de calcul. Cette fonction est remplacée par un métamodèle $\underline{x} \in \mathcal{D} \mapsto \hat{Y}(\underline{x}) \in \mathbb{R}$, où \hat{Y} est construit à partir d'un ensemble d'observations sur n points sélectionnés \underline{x}_i et les réponses correspondantes de la QoI $FctObj$ telle que $Y_i = Y(\underline{x}_i)$.

La stratégie de génération du métamodèle exploite un premier tirage LHS [4] de n échantillons \underline{x}_i dans \mathcal{D} . La génération du métamodèle permet de quantifier un critère d'amélioration du minimum et d'enrichir si besoin le métamodèle d'observations pouvant être approximées ou calculées exactement.

La méthode de génération du métamodèle \hat{Y} exploite la régression par processus gaussien pour manipuler des données de qualités distinctes. Le krigeage [5] est un modèle statistique de régression pouvant être présenté comme une extension des régressions linéaires $\hat{Y}(\underline{x}) = \underline{f}(\underline{x})^T \underline{\beta} + \varepsilon(\underline{x})$ avec \underline{x} les données d'entrée, $\underline{\beta}$ le vecteur de poids associé à la régression, et \underline{f} la fonction de régression choisie par l'utilisateur. L'erreur du modèle est modélisé par un processus gaussien de moyenne nulle et de covariance $\sigma^2 r(\underline{x}, \underline{x}'; \underline{\theta})$ avec σ^2 le paramètre de variance, r une fonction de corrélation (ou fonction noyau) choisie par l'utilisateur et $\underline{\theta}$ les hyperparamètres associés à la fonction. Ces hyperparamètres sont également à déterminer. Ces termes permettent de former un processus gaussien conditionné aux observations :

$$\begin{pmatrix} \hat{Y}(\underline{x}) \\ \underline{Y} \end{pmatrix} \sim N \left(\begin{pmatrix} \underline{f}(\underline{x})^T \underline{\beta} \\ \mathbf{F}^T \underline{\beta} \end{pmatrix}, \sigma^2 \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \underline{r}(\underline{x})^T \\ \underline{r}(\underline{x}) & \mathbf{R} \end{pmatrix} \right) \quad (1)$$

avec \mathbf{F} matrice de régression telle que $\mathbf{F}_{ij} = \underline{f}_i(\underline{x}_j)$, \mathbf{R} matrice de corrélation entre les données observées telle que $\mathbf{R}_{ij} = r(\underline{x}_i, \underline{x}_j; \underline{\theta})$ et $\underline{r}(\underline{x})$ matrice de corrélation entre les données observées et les données prédites telle que $\underline{r}_j(\underline{x}) = r(\underline{x}_j, \underline{x}; \underline{\theta})$. $\underline{\beta}$ et σ sont déterminés en considérant \hat{Y} comme le meilleur prédicteur linéaire non-biaisé (BLUP). Les propriétés en découlant permettent de définir le meilleur processus gaussien au regard de la fonction de covariance et des hyperparamètres associés. Ceux-ci sont obtenus par maximisation de la fonction de vraisemblance ou par validation croisée.

La prise en compte des différentes qualités sur les observations peut être faites de plusieurs manières : par la définition une variance sur les observations Z_i non nulle, par la définition de la corrélation entre les données issues de sources différentes [6, 7, 8] ou encore par l'emploi de corrections aux données approximées. Dans ce travail, la méthode de génération de métamodèles successifs Evofusion [9] sera employée et est présentée via l'Algorithme 1.

Algorithm 1 Algorithme Evofusion

Input: Observations basse-fidélité et haute-fidélité $(\mathbf{X}_{LF}, \mathbf{Y}_{LF}), (\mathbf{X}_{HF}, \mathbf{Y}_{HF})$

- 1: Construire un métamodèle contenant que les données basse-fidélité : $(\mathbf{X}_{LF}, \mathbf{Y}_{LF}) \longrightarrow \hat{Y}_{LF}$
 - 2: Calculer les écarts entre le métamodèle basse fidélité \hat{Y}_{LF} et les observations haute-fidélité \mathbf{Y}_{HF} aux points haute-fidélité \mathbf{X}_{HF} : $Y_{corr} = Y_{HF} - \hat{Y}_{LF}(\mathbf{X}_{HF})$
 - 3: Construire un métamodèle d'erreur : $(\mathbf{X}_{HF}, \mathbf{Y}_{corr}) \longrightarrow \hat{Y}_{corr}$
 - 4: Corriger les observations basse-fidélité avec le métamodèle d'erreur :
 $\mathbf{Y}_{LFcorr} = \mathbf{Y}_{LF} + \hat{Y}_{corr}(\mathbf{X}_{LF})$
 - 5: Construire le métamodèle avec les données corrigées et les observations haute-fidélité :
 $(\mathbf{X}_{LF}, \mathbf{Y}_{corr}) \cup (\mathbf{X}_{HF}, \mathbf{Y}_{HF}) \longrightarrow \hat{Y}$
 - 6: **return** Métamodèle évofusé \hat{Y}
-

3 Calcul des champs mécaniques associés sous forme PGD espace-temps avec un niveau de fidélité adapté

Le problème mécanique utilisé pour les campagnes de tests est un problème usuel de mécanique des milieux continus avec une loi de comportement associée non-linéaire. Le problème de référence est un problème d'évolution isotherme quasi-statique défini sur le domaine spatio-temporel $I \times \Omega$, sous l'hypothèse des petites perturbations. La structure est soumise à des forces volumiques \underline{f}_d , surfaciques \underline{F}_d sur le bord $\partial_2\Omega$, et à des déplacements imposés \underline{U}_d sur le bord $\partial_1\Omega$.

L'état de la structure est définie par l'ensemble des champs $\mathbf{s} = (\underline{\varepsilon}_p, \underline{\sigma}, \underline{A}_k, \underline{V}_k)$ avec :

- $\underline{\varepsilon} = \nabla_{sym}\underline{U}$ le champ de déformation admissible associé au champ de déplacement \underline{U} , pouvant se décomposer en une partie élastique $\underline{\varepsilon}_e$, et une partie inélastique $\underline{\varepsilon}_p$
- $\underline{\sigma} = \mathbf{K}_e \underline{\varepsilon}_e$ le champ de contrainte admissible
- \underline{A}_k et \underline{V}_k respectivement les champs primaux et duaux des variables internes caractérisant le comportement de la structure

La loi de comportement employée ici est une loi élastoplastique de Lemaître-Chaboche [10] avec un écrouissage cinématique de type Armstrong-Frederick. Les variables internes associées sont donc l'écrouissage isotrope R et un unique écrouissage cinématique linéaire X .

On décompose le problème en deux sous-problèmes : le problème global A_d où \mathbf{s} respecte les équations d'admissibilité et d'état, et le problème local Γ où \mathbf{s} respecte les équations d'évolutions non-linéaires mais local en temps et en espace. La solution du problème est à l'intersection $\Gamma \cap A_d$.

La résolution est faite par la méthode LATIN où un processus de directions de recherche alternées est mis en place pour obtenir une solution dans A_d , puis dans Γ à chaque itération. Ce processus fait converger \mathbf{s} dans $\Gamma \cap A_d$. Cette méthode a été implémentée notamment dans le cadre d'un comportement élasto-viscoplastique [11]. La particularité de la LATIN-PGD réside dans la recherche de la solution $\mathbf{s} \in A_d$ sous forme à variable séparée PGD. Les équations permettant l'implémentation du solveur en élasto-viscoplastique sont présentes dans [12].

Dans le cadre de ces travaux, l'intérêt de ce type de solveur est double. En effet, à chaque itération, les champs spatio-temporels complets sont accessibles ce qui permet avant convergence d'avoir une approximation des champs et des quantités d'intérêt. Ainsi, les deux qualités de données peuvent être issues du même solveur. Ceci simplifie la mise en oeuvre du problème et permet de facilement mettre en oeuvre un critère d'arrêt via un estimateur d'erreur sur les quantités d'intérêt.

De plus, le solveur autorise son démarrage avec des données pré-calculées. Ces données peuvent être issues de calculs précédents. Ainsi, il est attendu que l'appel au solveur soit de plus en plus rapide à mesure que des calculs sont effectués par celui-ci. Cette stratégie est nommée stratégie multi-paramétrique et est présentée par la Figure 1.

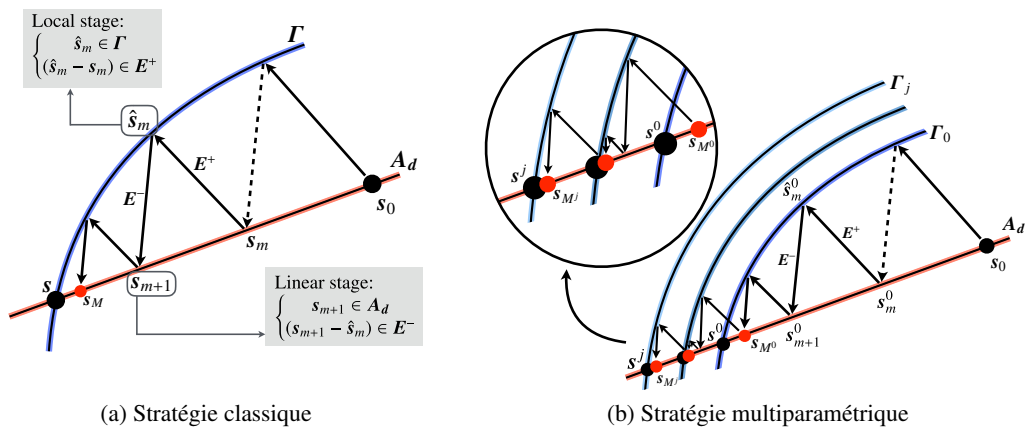


FIGURE 1 – Représentation schématique de l'algorithme LATIN [13]

4 Couplage des méthodes sur un cas industriel

La stratégie de génération du métamodèle correspond à celle présentée dans l’algorithme 2. Deux paramètres influencent fortement sur le temps de génération du métamodèle : le nombre de points n générés uniquement en basse fidélité et la qualité du solveur basse-fidélité employée η_{LF} .

Algorithm 2 Génération d’un métamodèle multi-fidélité

Input: \mathcal{D}, Y

Tirage dans $\mathcal{D} \rightarrow \mathbf{X}$ (4 points)

Résolution basse-fidélité $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}_{LF}$ (Solveur LATIN avec critère d’arrêt $\eta_{LATIN} \leq \eta_{LATIN}^{(BF)}$)

While Critère d’arrêt non atteint **do**

Création du métamodèle avec les observations $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}_{LF}) : \hat{Y}$

Détermination du point \underline{x}^* maximisant le gain d’information espéré sur \mathcal{D} (EI, ...)

Résolution basse-fidélité \underline{x}^* et ajout de $(\underline{x}^*, Y_{LF}(\underline{x}^*))$ dans les observations

If LF Points > n **then**

Résolution haute-fidélité $\underline{x}^* \rightarrow Y_{HF}(\underline{x}^*)$ (Solveur LATIN convergé)

Ajout de $(\underline{x}^*, Y_{HF}(\underline{x}^*))$ dans les observations

end

end

La stratégie proposée peut s’avérer utile dans deux cas. La première présentée dans [14] est la mise en place d’un abaque virtuel par génération du métamodèle sur \mathcal{D} complet. La fonctionnelle optimisée pour maximiser le gain d’information attendu est l’erreur aux moindres carrées MSE caractérisant la variance estimée en tout point du métamodèle. Le second cas d’emploi de la méthode correspond à la recherche d’un optimum global de la quantité d’intérêt dans l’espace de conception. La méthode EGO [15] est employée en maximisant le gain d’information espéré via la probabilité d’amélioration de l’optimum global appelé également Expected Improvement EI .

Le cas test présenté ici est une pièce banalisée proposée par Safran Aircraft Engines dans le cadre du projet [APPROFI](#). Celle-ci est encastrée sur les surfaces supérieure et latérales (Zone bleue sur la Figure 2) et est chargée sur les deux parties de son nez (Zone verte et la zone opposée non visible sur la Figure 2). Le chargement sur les deux parties est de même intensité, mais la direction de chaque face est pilotée par deux angles pour chaque zone (Figure 3). Le cas de chargement le plus défavorable au sens de la contrainte équivalente de Von Mises est recherché dans un espace de conception à quatre dimensions $\mathcal{D} = [0, 90]^4$.

Fonction objective	$Y(\underline{x}) = \max_{I \times \Omega} \sigma_{VonMises}$
Paramètres	$\underline{x} = (\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2) \in [0, 90]^4$
Type d’éléments spatiaux	Linéaire triangulaire (30k DDLs)
Type d’éléments temporels	Linéaire (41 DOFs)
Conditions limites	Encastrement sur les faces latérales bleues $F = F_{max} \sin(\omega t) \underline{e}_i$ sur chaque face verte

TABLE 1 – Pièce d’amortissement

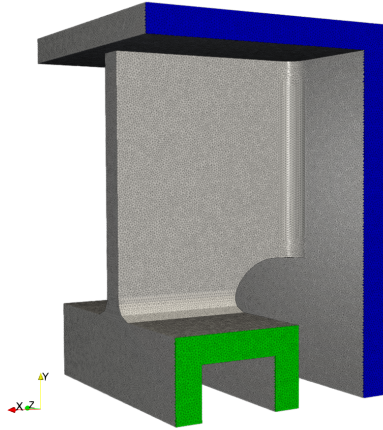


FIGURE 2 – Représentation du cas-test

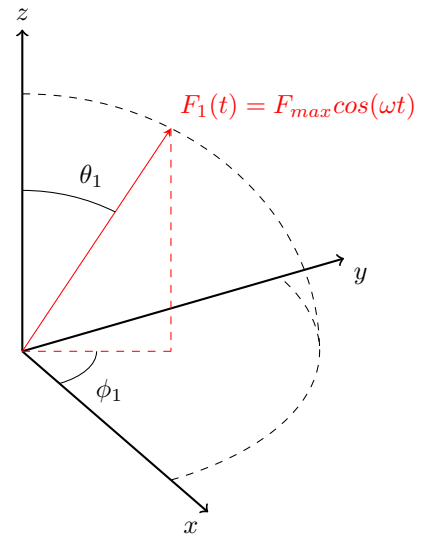


FIGURE 3 – Pilotage angulaire du chargement sur la surface verte visible

5 Résultats

On cherche à optimiser la quantité d'intérêt en utilisant la stratégie EGO. L'objectif de recherche de l'optimum global est considéré comme satisfait lorsque l'optimum trouvé est supérieur à 112 MPa, ce qui correspond à moins de 1% des points dans l'espace de conception. On considère alors que le maximum global est atteint.

En terme de temps de calcul, la meilleure stratégie obtenue est celle associée à un critère d'arrêt en basse fidélité $\eta_{LATIN} = 10^{-1}$ et à 4×12 points basse fidélité soit un temps de 8 minutes 47 secondes. Sans approche multi-fidélité, ni stratégie multiparamétrique, le temps total est de 8 heures 6 minutes. Ainsi, on peut séparer le gain apporté par l'approche multi-fidélité est de $17.3 \times$. Le gain apporté par la stratégie multi-paramétrique est de $3.2 \times$ soit un gain total de $55.4 \times$.

Nb points BF	Critère BF LATIN		
	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}
4/dim	8287s	9215s	8562s
8/dim	4088s	2954s	3716s
10/dim	1697s	1851s	1376s
12/dim	1504s	954s	527s

TABLE 2 – Moyenne des temps de calcul pour déterminer l'optimum (Sans multi-fidélité : 9125s)

6 Conclusion

Ce travail présente les avancées sur le couplage krigeage multi-fidélité et modèle réduit pour l'optimisation de pièces mécaniques. La méthode Evofusion a été employée pour générer un métamodèle de quantité d'intérêt obtenue par deux sources de qualité distinctes. Le point remarquable ici est l'emploi d'observations basse fidélité et haute fidélité issues d'un même solveur. Ce dernier est basé sur la génération d'une approximation des champs sous forme PGD, qui permet de générer les modes d'approximation à la volée et d'enrichir ainsi le dictionnaire d'initialisation du calcul. Dans le cadre de l'optimisation via la méthode EGO, la stratégie de couplage permet une accélération d'un facteur de plus de 50 sur le cas-test proposé.

Remerciements

Ces travaux ont été soutenus par le Ministère de l'Enseignement Supérieur, de la Recherche et de l'Innovation et SAFRAN Tech. La campagne d'essais a été réalisée grâce aux moyens de calcul du Mésocentre de CentraleSupélec et de l'École normale supérieure Paris-Saclay avec le soutien du CNRS et de la région Île-de-France.

Références

- [1] Y. Maday and E. Ronquist. The Reduced Basis Element Method : Application to a Thermal Fin Problem. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(1) :240–258, January 2004. 1
- [2] Pierre Ladevèze. *Nonlinear Computational Structural Mechanics : New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation*. Mechanical Engineering Series. Springer Verlag, 1999. 1
- [3] Francisco Chinesta, Roland Keunings, and Adrien Leygue. *The Proper Generalized Decomposition for Advanced Numerical Simulations*. SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology. Springer International Publishing, Cham, 2014. 1
- [4] Michael D. McKay, Richard J. Beckman, and William J. Conover. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, 42(1) :55–61, 2000. 2
- [5] Carl Edward Rasmussen and Christopher KI Williams. Gaussian processes in machine learning. *Lecture notes in computer science*, 3176 :63–71, 2004. 2
- [6] R. Zimmermann and Z.-H. Han. Simplified Cross-Correlation Estimation for Multi-Fidelity Surrogate Co-kriging Models. *Advances and Applications in Mathematical Sciences*, 7(2) :181–201, 2010. 2
- [7] Z.-H. Han, R. Zimmermann, and S. Görtz. Alternative Cokriging Model for Variable-Fidelity Surrogate Modeling. *AIAA Journal*, 50(5) :1205–1210, 2012. 2
- [8] Nicolas Courier, Pierre-Alain Boucard, and Bruno Soulier. Variable-fidelity modeling of structural analysis of assemblies. *Journal of Global Optimization*, 64(3) :577–613, March 2016. 2
- [9] A. I. J. Forrester, A. J. Keane, and N. W. Bressloff. Design and Analysis of “Noisy” Computer Experiments. *AIAA Journal*, 44(10) :2331–2339, 2006. 2
- [10] Jean Lemaitre and Jean-Louis Chaboche. *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge university press, 1994. 3
- [11] N. Relun, D. Néron, and P. A. Boucard. A model reduction technique based on the PGD for elastic-viscoplastic computational analysis. *Computational Mechanics*, 51(1) :83–92, January 2013. 3
- [12] Mainak Bhattacharyya, Amelie Fau, Udo Nackenhorst, David Néron, and Pierre Ladevèze. A LATIN-based model reduction approach for the simulation of cycling damage. *Computational Mechanics*, pages 1–19, November 2017. 3
- [13] Matthieu Vitse, David Néron, and Pierre-Alain Boucard. Virtual charts of solutions for parametrized nonlinear equations. *Computational Mechanics*, 54(6) :1529–1539, December 2014. 3
- [14] Stéphane Nachar, Pierre-Alain Boucard, David Néron, and Felipe Bordeu. Coupling multi-fidelity kriging & model-order reduction for the construction of virtual charts. *Computational Mechanics*, Submitted. 4
- [15] Donald R. Jones. A Taxonomy of Global Optimization Methods Based on Response Surfaces. *Journal of Global Optimization*, 21(4) :345–383, December 2001. 4