Estimation d'erreur et stratégie adaptative pour le couplage nonintrusif de modèles

M. Tirvaudey^{1,2}, L. Chamoin², R. Bouclier^{1,3}, J-C. Passieux¹

¹ ICA, Université de Toulouse, CNRS/INSA/ISAE/Mines Albi/UPS, Toulouse {tirvaude, bouclier, passieux}@insa-toulouse.fr

² LMT, ENS Paris-Saclay/CNRS/Université Paris-Saclay, Cachan, chamoin@lmt.ens-cachan.fr

³ IMT, Université de Toulouse, UPS/UT1/UT2/INSA/CNRS, Toulouse

Résumé — Le couplage local/global non-intrusif est un atout pour la simulation numérique car il permet d'analyser des phénomènes locaux en rationalisant le temps de calcul. Nous proposons de mettre en place une stratégie de vérification afin de valider les approximations obtenues avec une telle méthode. Cela repose sur la construction d'estimateurs d'erreur *a posteriori* afin d'évaluer quantitativement le niveau d'erreur et les différentes sources d'erreur sur une quantité d'intérêt. Une procédure d'adaptation est alors mise en place afin d'ajuster les paramètres de couplage.

Mots clés — multi-échelle, couplage non-intrusif, estimation d'erreur, algorithme adaptatif.

1 Introduction

Pour les problèmes présentant des phénomènes complexes localisés, modéliser la complexité sur tout le domaine physique est très coûteux numériquement. Afin de faire diminuer ce coût, une approche naturelle est de limiter la modélisation complexe dans une zone d'intérêt et d'utiliser des modèles plus simples loin du phénomène d'intérêt. De nombreuses méthodes multiéchelle avec multi-modèles ont été développées (méthode Arlequin, méthode de substitution, etc.). Parmi celles-ci on s'intéresse à une méthode de couplage dite "non-intrusive locale/globale" [1] qui facilite la connexion avec les codes de calcul industriels [2]. Cette méthode définit un modèle global grossier sur l'ensemble du domaine dont les données (géométrie, connectivité, opérateur, solveur) sont fixées et un modèle local séparé qui peut évoluer. Des données d'interface sont alors échangées de façon itérative entre les deux modèles.

Un challenge de la simulation numérique est de valider les modèles et méthodes de simulation. Comme toutes les autres méthodes, le couplage non-intrusif est impacté par des erreurs dont les sources peuvent être diverses (modèle, discrétisation, stratégie de résolution) qui doivent être contrôlées pour valider la méthode. Très peu de travaux on été menés pour estimer ces erreurs et adapter les paramètres du calcul dans le cas du couplage non-intrusif [3]. On propose ici d'étendre les méthodes classiques de contrôle d'erreur [4], notamment vis-à-vis d'une quantité d'intérêt [5, 6], à cette technique de couplage. De plus l'utilisation de la méthode de couplage non-intrusif facilite l'implémentation des estimateurs d'erreur et la procédure d'adaptation car les modifications qui peuvent être appliquées sur la zone locale (taille, raffinement) sont réalisées indépendemment du modèle global. Cela permet aussi une grande flexibilité dans l'analyse de modèles variés.

Après avoir rappelé la méthodologie de couplage non-intrusif, nous expliquons comment en estimer l'erreur globale et la décomposer selon les différentes sources d'erreur possibles : modèle, itération et discrétisation. La procédure d'adaptation du couplage est aussi explicitée avant d'être mise en place sur un exemple simple de poutre en traction. D'autres applications, en 2D et dans des contextes de comportement linéaire ou non-linéaire, seront exposées pendant le congrès.

2 Couplage non intrusif

On considère un problème de mécanique classique, résumé sur la Figure 1(a), dans lequel un phénomène d'intérêt est localisé. L'approche naturelle est donc de découper le modèle de base en une zone locale qui est le support du phénomène d'intérêt et une zone globale complémentaire dans laquelle un comportement linéaire peut être défini, comme indiqué sur la Figure 1(b).



(c) Principe du couplage non-intrusif entre un problème global et un problème local avec transfert d'informations à l'interface.

Dirichlet *u*



A ce stade, on sépare donc le modèle de référence en un problème local et un problème global pour lequel la matrice de rigidité dépend de la zone locale. Afin de rendre complètement indépendants les problèmes local et global, un point de vue de couplage non-intrusif avec échange de données aux interfaces est envisagé (voir Figure 1(c)). Les deux problèmes indépendants peuvent ainsi s'écrire de la façon suivante :

— un problème global sur Ω qui permet de déterminer U_G à partir des forces de réaction à l'interface :

$$\mathbb{K}_{0\Omega} \mathbf{U}_G^{(n)} = \mathbf{F}_0 - \mathbb{C}_G^T \mathbf{\Lambda}^{(n-1)} + \mathbb{K}_{0L} \mathbf{U}_G^{(n-1)}$$
(1)

— un problème local sur Ω_L qui permet de déterminer $(\mathbf{U}_L^{(n)}, \mathbf{\Lambda}^{(n)})$ à partir des conditions aux limites de Dirichlet à l'interface :

$$\begin{bmatrix} \mathbb{K}_L & -\mathbb{C}_L^T \\ -\mathbb{C}_L^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_L^{(n)} \\ \mathbf{\Lambda}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_L \\ -\mathbb{C}_G \mathbf{U}_G^{(n)} \end{bmatrix}$$
(2)

où $\mathbf{U}_{G}^{(k)}$, $\mathbf{U}_{L}^{(k)}$, $\mathbf{\Lambda}^{(k)}$ sont les valeurs nodales des déplacements globaux et locaux ainsi que des multiplicateurs de Lagrange à l'itération k, $\mathbb{K}_{0\Omega}$ (resp. \mathbb{K}_{0L}) sont les matrices de rigidité sur l'ensemble du domaine Ω (resp. sur le sous domaine Ω_{L}), \mathbf{F}_{0} (resp. \mathbf{F}_{L}) les efforts nodaux sur le Ω_{0} (resp. sur le sous domaine Ω_{L}) et \mathbb{C}_{G}^{T} ainsi que \mathbb{C}_{L}^{T} sont des opérateurs Mortar de couplage.

Remarque 1 L'avantage principal de cette méthode est de pouvoir faire communiquer ensemble des codes différents servant à résoudre le problème local et/ou global. Par exemple, après les travaux réalisés sur des couplages non-intrusifs avec la méthode isogéométrique [7, 8], il peut être intéressant de chercher à coupler un modèle global isogéométrique avec un modèle local élément fini. Pour se faire, l'extension du lien entre ces deux méthodes de calcul ([9]) à l'aide d'un opérateur global ([10]) peut être utilisée afin de construire une zone locale éléments finis à partir du maillage isogéométrique global initial.

3 Estimation d'erreur en quantité d'intérêt

Dans cette partie, nous nous intéressons à une quantité d'intérêt scalaire (déplacement, contrainte ou déformation) notée $Q(\mathbf{u})$. L'erreur sur cette quantité d'intérêt est déterminée par la différence $Q(\mathbf{u}) - Q(\mathbf{u}_0)$ où \mathbf{u}_0 est une approximation de la solution. En introduisant un problème adjoint, dont la solution est notée $\tilde{\mathbf{u}}$, il est montré que $Q(\mathbf{u}) - Q(\mathbf{u}_0) = R(\mathbf{u}_0, \tilde{\mathbf{u}})$ [5]. Cette relation pour un problème couplé se réécrit de la façon suivante :

$$Q(\mathbf{u}) - Q(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}) = R(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}, \tilde{\mathbf{u}}),$$
(3)

avec $\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}$ le champ de déplacement continu solution d'un problème de couplage global local à l'itération *n*.

En pratique, un problème couplé est aussi utilisé pour déterminer la solution du problème adjoint. Ainsi l'estimateur d'erreur globale sur Q est déterminé à l'aide de la solution d'un problème adjoint avec une zone locale plus grande, comprenant une discrétisation plus fine, et avec un algorithme de couplage convergé : $\tilde{\mathbf{u}}_{L+G}^{h^+H(\infty)}$. L'indicateur d'erreur globale s'écrit donc :

$$\eta_{Q,res}^{tot} = R(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}, \tilde{\mathbf{u}}_{L^+G}^{h^+H(\infty)})$$
(4)

3.1 Différentes sources d'erreur

L'estimateur d'erreur global défini dans (4) prend en compte toutes les sources d'erreur. Afin de les séparer, l'équation (3) est décomposée :

$$Q(\mathbf{u}) - Q(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}) = [Q(\mathbf{u}) - Q(\mathbf{u}_{LG}^{H})] + [Q(\mathbf{u}_{LG}^{H}) - Q(\mathbf{u}_{LG}^{hH})] + [Q(\mathbf{u}_{LG}^{hH}) - Q(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)})].$$
 (5)

L'équation (5) fait apparaître, dans l'ordre, les différentes contributions d'erreur via trois indicateurs :

— un indicateur d'erreur d'itération, déterminé à l'aide de la solution d'un problème adjoint convergé : $\tilde{\mathbf{u}}_{LC}^{hH(\infty)}$ dont la zone local a la même taille et le même maillage que celle du problème primal :

$$\eta_{Q,res}^{conv} = R_{LG}(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}, \tilde{\mathbf{u}}_{LG}^{hH(\infty)}),$$

avec le résidu RLG résidu classique calculé séparément sur le local et son complémentaire,

— un indicateur d'erreur de modèle, déterminé à partir d'une solution ajointe convergée $\tilde{\mathbf{u}}_{L+G}^{hH(\infty)}$, dont la zone locale est plus grande que celle du problème primal :

$$\boldsymbol{\eta}_{Q,res}^{mod} = R(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}, \tilde{\mathbf{u}}_{L^+G}^{hH(\infty)}) - \boldsymbol{\eta}_{Q,res}^{conv}$$

— un indicateur d'erreur de discrétisation, calculé à partir de la solution convergé du problème adjoint à zone locale plus raffinée, $\mathbf{\tilde{u}}_{LG}^{h^+H(\infty)}$:

$$\eta_{Q,res}^{dis} = R(\mathbf{u}_{LG}^{hH(n)}, \mathbf{\tilde{u}}_{LG}^{h^+H(\infty)}) - \eta_{Q,res}^{conv}.$$

Remarque 2 Comme indiqué précédemment, pour calculer l'erreur globale il faut calculer la solution $\tilde{\mathbf{u}}_{L+G}^{h+H(\infty)}$ qui est très coûteuse numériquement. En pratique, en utilisant l'aspect non-intrusif du couplage dans lequel le problème global reste inchangé même si le problème local change, cette erreur peut être facilement évaluée en additionnant les contributions d'erreur d'un ensemble de problèmes adjoints dont la zone locale se déplace sur tout le domaine.

3.2 Procédure d'adaptation

A l'aide de l'estimateur d'erreur globale et des trois indicateurs, une procédure d'adaptation de couplage peut être mise en place afin d'optimiser le couplage. La tolérance d'erreur est au préalable fixée et notée γ_{tol} . La procédure d'adaptation est expliquée sur la Figure 2.

Si l'estimateur d'erreur globale n'est pas inférieur à la tolérance donnée, les différents indicateurs d'erreurs sont calculés. Le maximum de ces indicateurs va donner l'information quant à l'adaptation à réaliser sur le couplage du problème primal : soit raffiner, soit agrandir la zone locale ou y ajouter un patch, soit itérer plus. Une fois la tolérance souhaitée atteinte, la taille, le raffinement de la zone locale ainsi que le nombre d'itérations du couplage déterminés permettront de construire le couplage du problème primal idéal pour la quantité d'intérêt choisie.

4 Résultats numériques

Afin de valider la procédure d'adaptation de couplage, un exemple uni-directionnel d'une poutre, de longueur 1, en traction est utilisée. La quantité d'intérêt étudiée est le déplacement en bout de poutre.



FIGURE 2 – Procédure d'adaptation.

Pour simuler un défaut dans le matériau, le module de Young varie le long de la poutre comme indiqué sur la Figure 3(b). Dans le modèle global, le module de Young est considéré comme constant et égal à 1, tandis que dans le modèle local son évolution est prise en compte. La tolérance d'erreur est fixée à 1%.

L'estimateur d'erreur global est calculé comme expliqué dans la section précédente, c'est à dire comme une somme de contributions d'erreur de plusieurs problèmes adjoints. Ainsi six problèmes adjoints sont définis, la position de leur zone locale comprend un patch au niveau de la quantité d'intérêt *PO* et un second patch qui varie le long de la poutre P_i pour $i \in [1-6]$.

L'évolution des indicateurs, normés par rapport à la quantité d'intérêt $Q(\mathbf{u}_0)$, en fonction des différents pas d'adaptation est tracée sur la Figure 3(d). Au premier pas, c'est l'erreur de modèle qui est la plus importante, celle-ci est donc évaluée sur chacun des éléments de la poutre, comme montré sur la Figure 3(c) afin de déterminer où elle est localisée. Cela indique que la zone locale initiale doit être agrandie afin de recouvrir l'intervalle [11/16 - 15/16]. Une fois cette zone agrandie c'est l'erreur d'itération qui est la plus importante, trois pas d'adaptation successifs sont ainsi réalisés, afin d'atteindre 4 itérations d'algorithme global/local. Puis l'erreur venant du modèle redevient plus importante et grâce à une nouvelle décomposition de l'erreur par élément il en résulte l'ajout d'un patch entre 3/16 et 5/16 qui doit après être agrandi pour recouvrir la zone [3/16 - 7/16]. Une itération supplémentaire de l'algorithme de l'algorithme itératif. Puis la zone locale est raffinée car l'erreur de discrétisation est la plus importante ce qui permet d'atteindre la tolérance souhaitée de 1% sur l'erreur globale.

Ainsi, le couplage du problème primal adapté à la quantité d'intérêt choisie comprend une zone locale constituée de deux patchs : $[3/16 - 7/16] \cup [11/16 - 15/16]$, raffinés une fois et 5 itérations de l'algorithme de couplage sont nécessaires.

Remarque 3 Il peut aussi être mis en évidence que si la tolérance choisie est plus importante, par exemple 5%, la faible variation du module de Young comprise dans la zone [3/16-7/16] n'a pas besoin d'être modélisée.

Remarque 4 Des calculs similaires ont été menés pour d'autres quantités d'intérêt. Dans le cas d'une contrainte moyenne en bout de poutre, les solutions sont similaires à celles obtenues pour le déplacement tandis que pour une quantité d'intérêt en déformation aucune adaptation est nécessaire car la déformation n'est pas impactée par la variation du module de Young en amont de la quantité d'intérêt.

5 Conclusion

Nous avons développé une méthode qui permet d'optimiser un couplage global/local non intrusif grâce à une évaluation des erreurs et une séparation des différentes sources d'erreur : modèle, itération et discrétisation. Les premiers résultats montrent une bonne corrélation entre le couplage adapté et l'évolution d'un phénomène local choisi. Cette adaptation de couplage en fonction d'une quantité d'intérêt est en cours d'implémentation pour des problèmes 2D avec des inclusions dans le but de déterminer le



(a) Évolution du module de Young le long de la poutre.



premier pas d'adaptation sur le modèle.

P1 P2 P3 P4 P5 P6

(b) Différentes localisations du second patch dans la zone locale pour l'évaluation de l'erreur globale.



(d) Évolution des différentes erreurs en fonction du pas d'adaptation.

FIGURE 3 – Résultats de la procédure d'adaptation de couplage sur une poutre en traction avec un module de Young variable. Les valeurs des indicateurs d'erreur sont normées par rapport à la quantité d'intérêt.

sous-ensemble d'inclusions qui impactent la quantité d'intérêt et nécessitent donc d'être finement définies. D'autres méthodes d'estimation d'erreur sont aussi en cours de développement telles que l'erreur en relation de comportement qui permet d'obtenir des bornes d'erreurs exactes et garanties, à la fois en linéaire et en non-linéaire. Ces développements seront présentés pendant la conférence.

Références

- [1] L. Gendre, O. Allix, P. Gosselet, F. Comte Non intrusive and exact globale/local techniques for structural problems with local pasticity., Computational Mechanics, 44(2):233-245, 2009.
- [2] S. Guinard, R. Bouclier, M. Toniolli and J.-C. Passieux Multiscale analysis of complex aeronautical structures using robust non-intrusive coupling., Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences. 5 :1-27, 2018.
- [3] M. Duval, A. Lovinski, J-C. Passieux, M. Salaun *Residual error based adaptive meshrefinement, with the non-intrusive patch algorithm.*
- [4] L. Chamoin, P.Dièz Verifying calculations, forty years on : an overview of classical verification techniques for *FEM simulations.*, SpringerBriefs, 2016.
- [5] J.T Oden, K. Vemaganti *Estimation of local modeling error and goal-oriented modeling of heterogeneous materials; Part 1 : Error estimates and adaptive algorithms.*, Journal of Computational Physics, 164 :22–47, 2000.
- [6] J.T Oden, S.Prudhomme *Estimation of modeling error in Computational Mechanics.*, Journal of Computational Physics, 182:496–515, 2002.
- [7] R. Bouclier, J.-C. Passieux and M. Salaün *Local enrichment of NURBS patches using a non-intrusive coupling strategy : geometric details, local refinement, inclusion, fracture.*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 300 :1-26, 2016.
- [8] R. Bouclier and J.-C. Passieux A Nitsche-based non-intrusive coupling strategy for global/local isogeometric structural analysis, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 340 :253-27, 2018.
- [9] D. Schillinger, P.K Ruthala, L.H Nguyen Lagrange extraction and projection for NURBS basis functions : A direct link between isogeometric and standard nodal finite element formulations., International Journal for Numerical Methods in Engineering, 108:515–534, 2016.

[10] M. Tirvaudey, R. Bouclier, J-C. Passieux, L.Chamoin *Non-intrusive implementation of nonlinear IGA in an industrial finite element code.*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, submitted.