



HAL
open science

Contrôle robuste des simulations numériques utilisant la PGD

Ludovic Chamoin, Pierre Ladevèze

► **To cite this version:**

Ludovic Chamoin, Pierre Ladevèze. Contrôle robuste des simulations numériques utilisant la PGD. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. pp.Clé USB. hal-00592907

HAL Id: hal-00592907

<https://hal.science/hal-00592907>

Submitted on 3 May 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Contrôle robuste des simulations numériques utilisant la PGD

L. Chamoin¹, P. Ladevèze^(1,2)

¹ LMT, ENS-Cachan, France, {chamoin,ladeveze}@lmt.ens-cachan.fr

² Chaire de la Fondation EADS "Techniques Avancées en Calcul des Structures"

Résumé — Dans ce travail, nous développons une méthode d'estimation d'erreur robuste qui permet de contrôler efficacement la qualité des solutions numériques obtenues par la PGD. L'estimateur associé est basé sur la notion d'erreur en relation de comportement et s'appuie donc sur une solution admissible. Il prend en compte toutes les sources d'erreur (discretisations en espace et en temps, troncature de la représentation modale, ...) et des indicateurs spécifiques permettent de séparer les contributions de ces différentes sources afin de pouvoir conduire de façon optimale les algorithmes adaptatifs.

Mots clés — vérification, réduction de modèle, PGD.

1 Introduction

Parmi toutes les méthodes de réduction de modèle disponibles aujourd'hui, celle appelée communément *Proper Generalized Decomposition* (PGD) est particulièrement prometteuse et fait actuellement l'objet de nombreux travaux de recherche [2, 6, 3, 8]. Elle est basée sur une représentation par fonctions à variables séparées (modes) de la solution ; ce type de représentation, dérivé de la méthode POD, permet une croissance linéaire du nombre d'inconnues en fonction du nombre de paramètres. Cependant, contrairement à la POD, l'originalité de la PGD est qu'elle ne s'appuie pas sur une base de projection donnée *a priori* (la construction de cette dernière base nécessitant une connaissance au moins partielle de la solution du problème ...). La PGD opère au contraire en une stratégie itérative dans laquelle les modes sont calculés à la volée au cours des itérations, en résolvant des problèmes simples.

Malgré les nombreux avantages de la PGD, une limitation majeure de cette méthode est qu'il n'existe pas aujourd'hui d'outil robuste de vérification associé qui permette de mesurer la qualité de la solution approchée obtenue. Des résultats de base sur l'estimation d'erreur *a priori* pour les représentations par fonctions à variables séparées sont donnés dans [4] tandis qu'une première tentative d'estimation *a posteriori* d'erreur dans ce cadre a été proposée dans [1]. Néanmoins, aucun estimateur d'erreur amenant à une majoration d'erreur garantie et précise n'existe actuellement pour la PGD.

Dans ce travail, nous développons une méthode d'estimation d'erreur robuste qui permet de contrôler efficacement la qualité de la solution numérique obtenue par la PGD [7]. L'estimateur associé est basé sur la notion d'erreur en relation de comportement en s'appuyant sur une solution admissible [5]. En se plaçant pour l'exemple dans le cadre de la thermique transitoire, on montre que la construction de cette solution admissible peut être menée à l'aide d'une double approche PGD : (i) une approche cinématique classique afin de construire en champ de température cinématiquement admissible ; (ii) une approche duale (non classique) afin de construire un champ de flux statiquement admissible. Néanmoins, les deux approches conduisent à des problèmes qui peuvent être aisément résolus avec les outils standards disponibles dans les codes industriels ; ceci fait de la méthode d'estimation d'erreur proposée un outil pratique et pertinent. De plus, l'estimateur associé prend en compte toutes les sources d'erreur, i.e les discrétisations en espace et en temps, ainsi que la troncature de la somme dans la représentation modale. Enfin, des indicateurs spécifiques permettent de séparer les différentes sources d'erreur afin de pouvoir conduire de façon optimale les algorithmes adaptatifs.

2 Problème de référence et approximation par la PGD

2.1 Problème de référence

On considère un problème de thermique transitoire sur une structure Ω , de frontière $\partial\Omega$, et sur l'intervalle de temps $I = [0, T]$. La structure est soumise à une température imposée sur une partie $\partial_u\Omega \neq \emptyset$ de son bord, et à un chargement thermique dépendant du temps : (i) un flux thermique $q_d(\mathbf{x}, t)$ sur $\partial_q\Omega \subset \partial\Omega$, avec $\partial_u\Omega \cap \partial_q\Omega = \emptyset$ et $\overline{\partial_u\Omega \cup \partial_q\Omega} = \partial\Omega$; (ii) un terme source $f_d(\mathbf{x}, t)$ dans Ω . Le matériau est supposé isotrope, de diffusion μ , de densité ρ , et de capacité thermique c . Les conditions initiales sont prises nulles. Le problème consiste alors à trouver le couple température-flux $(u(\mathbf{x}, t), \mathbf{q}(\mathbf{x}, t))$, avec $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times I$, vérifiant :

- les contraintes thermiques :

$$u = 0 \quad \text{sur } \partial_u\Omega \times I \quad (1)$$

- les équations d'équilibre :

$$\rho c \frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + f_d \quad \text{dans } \Omega \times I \quad ; \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = q_d \quad \text{sur } \partial_q\Omega \times I \quad (2)$$

- la relation de comportement :

$$\mathbf{q} = -\mu \nabla u \quad \text{dans } \Omega \times I \quad (3)$$

- les conditions initiales :

$$u(\mathbf{x}, 0^+) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (4)$$

\mathbf{n} représentant la normale sortante à Ω . Dans la suite, on fait le changement de variable $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ afin d'avoir une relation de comportement "classique" $\mathbf{q} = \mu \nabla u$.

En introduisant les espaces fonctionnels \mathcal{V} et \mathcal{T} assurant la régularité nécessaire en espace et en temps, respectivement, la formulation faible du problème consiste à chercher la solution $u \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{T}$ telle que

$$B(u, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{T} \quad (5)$$

La solution exacte de (5), qui est généralement hors de portée, est notée $(u_{ex}, \mathbf{q}_{ex})$. On introduit pour finir les produits scalaires et normes suivants, pour des fonctions u et v dans $\mathcal{V} \otimes \mathcal{T}$:

$$\begin{aligned} \langle u, v \rangle_{\Omega} &= \int_{\Omega} u v d\Omega \quad ; \quad \langle u, v \rangle_I = \int_0^T u v dt \quad ; \quad \langle\langle u, v \rangle\rangle = \int_0^T \int_{\Omega} u v d\Omega dt \\ \|v\|_{\Omega} &= \sqrt{\langle v, v \rangle_{\Omega}} \quad ; \quad \|v\|_I = \sqrt{\langle v, v \rangle_I} \quad ; \quad \|v\| = \sqrt{\langle\langle v, v \rangle\rangle} \end{aligned} \quad (6)$$

2.2 Approximation par la PGD

Dans les méthodes de réduction de modèle basées sur une représentation de la solution en variables séparées (les variables étant ici \mathbf{x} et t), l'idée est de construire une approximation de la solution $u(\mathbf{x}, t)$ comme une somme de m produits de fonctions d'espace et du temps ($m \in \mathbb{N}$ étant l'ordre de la représentation) :

$$u(\mathbf{x}, t) \approx u_m(\mathbf{x}, t) = \sum_i^m \psi_i(\mathbf{x}) \lambda_i(t) = \Psi_m(\mathbf{x}) \cdot \Lambda_m(t) \quad (7)$$

où $\Psi_m(\mathbf{x}) = [\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x}), \dots, \psi_m(\mathbf{x})]^T$ (resp. $\Lambda_m(t) = [\lambda_1(t), \lambda_2(t), \dots, \lambda_m(t)]^T$) est une base réduite de fonctions d'espace (resp. fonctions du temps). Dans la méthode appelée *Proper Generalized Decomposition* (PGD) [2, 6, 3, 8], ni les fonctions $\lambda_i(t)$ ni les fonctions $\psi_i(\mathbf{x})$ ne sont données initialement, et ces deux familles sont calculées "à la volée".

Nous décrivons ici une démarche classique pour la PGD, appelée *Galerkin progressive*. On suppose qu'une décomposition à variables séparées $u_{m-1} = \Psi_{m-1} \cdot \Lambda_{m-1}$ d'ordre $(m-1)$ est connue. Un nouveau couple $(\psi, \lambda) \in \mathcal{V} \times \mathcal{T}$ est défini pour la décomposition d'ordre m comme celui qui vérifie le critère de double orthogonalité de Galerkin suivant :

$$B(u_{m-1} + \psi \lambda, \psi \lambda^* + \psi^* \lambda) = L(\psi \lambda^* + \psi^* \lambda) \quad \forall \lambda^* \in \mathcal{T}, \forall \psi^* \in \mathcal{V} \quad (8)$$

On peut alors définir deux applications :

- $S_m : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{V}$ est l'application qui associe à une fonction du temps λ une fonction spatiale $\psi = S_m(\lambda)$ définie par

$$B(u_{m-1} + \psi\lambda, \psi^*\lambda) = L(\psi^*\lambda) \quad \forall \psi^* \in \mathcal{V} \quad (9)$$

Elle est associée à un problème spatial dépendant du temps ;

- $T_m : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{T}$ est l'application qui associe à une fonction d'espace ψ une fonction temporelle $\lambda = T_m(\psi)$ définie par

$$B(u_{m-1} + \psi\lambda, \psi\lambda^*) = L(\psi\lambda^*) \quad \forall \lambda^* \in \mathcal{T} \quad (10)$$

Elle est associée à un problème en temps (EDO scalaire).

Un couple (ψ, λ) vérifie (8) si et seulement si $\psi = S_m(\lambda)$ et $\lambda = T_m(\psi)$, qui est un problème non-linéaire. Cette version de la PGD peut donc être interprétée comme un pseudo-problème aux valeurs propres, les fonctions ψ et λ étant respectivement les fonctions propres dominantes des applications $G_m := S_m \circ T_m$ et $\tilde{G}_m := T_m \circ S_m$ [8]. Cette interprétation est utile car elle permet de proposer des algorithmes dédiés, inspirés de ceux utilisés dans les problèmes aux valeurs propres, pour la construction de la décomposition. Un algorithme possible, noté *algorithme des puissances itérées*, est décrit ci-dessous :

- **pour** $m = 1$ à m_{max}
- définir $\lambda^{(0)}$ (initialisation)
- **pour** $k = 1$ à k_{max}
- calculer $\psi^{(k)} = S_m(\lambda^{(k-1)})$
- normer $\psi^{(k)}$ ($\|\psi^{(k)}\|_{\Omega} = 1$)
- calculer $\lambda^{(k)} = T_m(\psi^{(k)})$
- vérifier la convergence de $(\psi^{(k)}\lambda^{(k)})$
- **fin pour**
- définir $\psi_m = \psi^{(k)}$ et $\lambda_m = \lambda^{(k)}$
- définir $u_m = u_{m-1} + \psi_m\lambda_m$ et vérifier la convergence
- **fin pour**

On remarque donc que u_m est calculée à l'aide de la solution de quelques problèmes d'espace et du temps, sans aucune connaissance sur u : la première étape $\psi^{(k)} = S_m(\lambda^{(k-1)})$ de la stratégie itérative, qui est la plus coûteuse, consiste à résoudre un problème spatial avec une fonction du temps $\lambda^{(k-1)}$ fixée ; la seconde étape $\lambda^{(k)} = T_m(\psi^{(k)})$ consiste à résoudre un problème en temps sur tout le domaine temporel I , avec une fonction spatiale $\psi^{(k)}$ fixée. En pratique, ces deux problèmes sont résolus avec des techniques de discrétisation classiques, i.e. la MEF et un schéma d'intégration temporelle donné.

A un ordre m donné, la fonction spatiale ψ_m peut être orthogonalisée par rapport à la base spatiale existante $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{m-1}\}$; cette procédure améliore généralement les résultats. Une autre modification simple de l'algorithme des puissances itérées précédent a été proposée pour construire une meilleure décomposition à un coût raisonnable [6, 8]. Elle consiste à introduire l'application T pour mettre à jour tout l'ensemble de fonctions du temps Λ_m après chaque construction d'un nouveau couple (ψ_m, λ_m) . Cela mène à l'algorithme suivant :

- **pour** $m = 1$ à m_{max}
- faire les étapes 2 à 8 de l'algorithme des puissances itérées
- définir $\psi_m = \psi^{(k_{max})}$
- calculer $\Lambda_m = T(\Psi_m)$
- définir $u_m = \Psi_m \cdot \Lambda_m$ et vérifier la convergence
- **fin pour**

3 Méthode d'estimation d'erreur globale

Considérant le problème de diffusion introduit dans la Section 2.1, nous présentons d'abord deux approches PGD (cinématique et statique) qui servent de base pour calculer des champs admissibles. Nous introduisons ensuite l'estimateur d'erreur et analysons ses propriétés.

3.1 Approche cinématique

Nous considérons la formulation faible espace-temps (5). Afin de calculer une approximation de u , nous utilisons l'approche PGD progressive définie précédemment. Connaissant u_{m-1} , cette approche consiste tout d'abord à trouver le couple (ψ, λ) tel que :

$$B(\psi\lambda, \psi\lambda^* + \psi^*\lambda) = R_{m-1}(\psi\lambda^* + \psi^*\lambda) \quad \forall \lambda^* \in \mathcal{T}, \forall \psi^* \in \mathcal{V} \quad (11)$$

où $R_{m-1}(\cdot) = L(\cdot) - B(u_{m-1}, \cdot)$ est le résidu à l'ordre $m-1$; ceci est résolu en utilisant l'algorithme des puissances itérées. Après convergence de $(\psi^{(k)}, \lambda^{(k)})$, on prend $\psi_m = \psi^{(k)}$ et on met à jour toutes les fonctions du temps en utilisant l'application $\Lambda_m = T(\Psi_m)$. On obtient alors l'approximation PGD (d'ordre m) u_m de u :

$$u_m = \Psi_m \cdot \Lambda_m \quad (12)$$

En pratique, l'algorithme des puissances itérées nécessite la solution de deux types de problèmes :

- l'application $\psi = S_m(\lambda)$ mène à un problème en espace du type : trouver $\psi \in \mathcal{V}$ tel que

$$\int_{\Omega} \{ \alpha_S \rho c \psi \psi^* + \beta_S \mu \nabla \psi \cdot \nabla \psi^* \} d\Omega = \bar{l}(\psi^*) - \sum_{i=1}^{m-1} \int_{\Omega} \{ \alpha_{S,i} \rho c \psi_i \psi^* + \beta_{S,i} \mu \nabla \psi_i \cdot \nabla \psi^* \} d\Omega \quad (13)$$

Une solution approchée ψ^h of ψ est calculée par la MEF associée à l'espace $\mathcal{V}^h \subset \mathcal{V}$, en résolvant un système discret de la forme :

$$(\alpha_S \mathbb{M} + \beta_S \mathbb{K}) \mathbf{X} = \mathbf{F} \quad (14)$$

- l'application $\lambda = T_m(\psi)$ mène à un problème en temps du type : trouver $\lambda \in \mathcal{T}$ tel que

$$\lambda(0) = 0 \quad ; \quad \alpha_T \dot{\lambda} + \beta_T \lambda = \delta_T \quad (15)$$

Une solution approchée $\lambda^{\Delta t}$ of λ est calculée avec un schéma d'intégration temporelle donné.

On obtient finalement une approximation PGD d'ordre m de la forme $u_m^{h,\Delta t} = \sum_{i=1}^m \psi_i^h(\mathbf{x}) \lambda_i^{\Delta t}(t)$. Elle est cinématiquement admissible (CA) dans le sens où elle vérifie les équations (1) et (4) du problème initial. Cependant, le couple associé $(u_m^{h,\Delta t}, \mathbf{q}(u_m^{h,\Delta t}))$, avec $\mathbf{q}(u_m^{h,\Delta t}) = \mu \nabla u_m^{h,\Delta t}$, n'est généralement pas statiquement admissible car il ne vérifie pas l'équilibre (2), même au sens faible des éléments finis. Nous introduisons dans la section suivante une approche PGD statique qui fournit un flux vérifiant ce dernier type d'équilibre.

3.2 Approche statique

On définit une approximation PGD d'ordre m du flux comme :

$$\mathbf{q}_m(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}_0^h(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^m \phi_i(\mathbf{x}) \xi_i(t) = \mathbf{q}_0^h(\mathbf{x}, t) + \Phi_m(\mathbf{x}) \cdot \Xi_m(t) \quad (16)$$

où $\Phi_m(\mathbf{x}) = [\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \dots, \phi_m(\mathbf{x})]^T$ et $\Xi_m(t) = [\xi_1(t), \xi_2(t), \dots, \xi_m(t)]^T$ sont les bases réduites de fonctions d'espace et du temps, respectivement. $\mathbf{q}_0^h(\mathbf{x}, t)$ est un flux particulier en équilibre au sens EF avec le chargement, et les fonctions d'espace $\phi_i(\mathbf{x})$ sont statiquement admissibles à zéro au sens EF, i.e. elles vérifient :

$$\int_{\Omega} \phi_i \cdot \nabla v^* d\Omega = 0 \quad \forall v^* \in \mathcal{V}^h, \forall t \in [0, T] \quad (17)$$

L'espace associé est noté Q_0^h .

D'une part, en supposant que le chargement extérieur (f_d, q_d) peut être écrit avec l'approximation radiale :

$$f_d(\mathbf{x}, t) = F_d(\mathbf{x}) \kappa_f(t) \quad ; \quad q_d(\mathbf{x}, t) = Q_d(\mathbf{x}) \kappa_q(t) \quad (18)$$

le calcul de $\mathbf{q}_0^h(\mathbf{x}, t)$ peut être fait facilement avec une procédure EF classique.

D'autre part, en notant que la formulation de Galerkin duale du problème de diffusion est de trouver $\mathbf{q} \in Q \times \mathcal{T}$ tel que :

$$\int_0^T \int_{\Omega} \frac{1}{\mu} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}^* d\Omega dt = 0 \quad \forall \mathbf{q}^* \in Q_0 \quad (19)$$

et en supposant que $\mathbf{q}_{m-1} = \mathbf{q}_0^h + \sum_{i=1}^{m-1} \phi_i \xi_i$ est connu, la PGD progressive à l'ordre m (avec mise à jour des fonctions du temps) consiste tout d'abord à chercher un couple (ϕ, ξ) qui vérifie :

$$\int_0^T \int_{\Omega} (\mathbf{q}_{m-1} + \phi \xi) \cdot \frac{1}{\mu} (\phi^* \xi + \phi \xi^*) d\Omega dt = 0 \quad \forall \phi^* \in Q_0^h, \forall \xi^* \in \mathcal{T} \quad (20)$$

De façon similaire à l'approche cinématique, l'algorithme des puissances itérées associé nécessite la solution de deux genres de problèmes :

- un problème spatial de la forme $\phi = \tilde{S}_m(\xi)$ tel que :

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\mu} \{\alpha \phi + \beta\} \cdot \phi^* d\Omega = 0 \quad \forall \phi^* \in Q_0^h \quad (21)$$

avec $\alpha = \|\xi\|_I^2$ et $\beta = \langle \xi, \mathbf{q}_{m-1} \rangle_I$. En utilisant des arguments de dualité, nous en déduisons qu'il existe une fonction $w^h(\mathbf{x}) \in \mathcal{V}^h$ telle que :

$$\alpha \phi + \beta = \mu \nabla w^h \quad (22)$$

De ce fait, w^h doit vérifier :

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\alpha} \{\mu \nabla w^h - \beta\} \cdot \nabla w^* d\Omega = 0 \quad \forall w^* \in \mathcal{V}^h \quad (23)$$

et ce dernier problème peut être résolu avec la MEF standard.

- un problème temporel de la forme $\xi = \tilde{T}_m(\phi)$ tel que :

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\mu} (\mathbf{q}_{m-1} + \phi \xi) \cdot \phi d\Omega = 0 \quad \forall t \in I \quad (24)$$

Ceci fournit l'expression explicite de $\xi(t)$ (après normalisation de ϕ) ;

$$\xi(t) = -\langle \mathbf{q}_{m-1}(\cdot, t), \phi \rangle_{\Omega} \quad (25)$$

Dans un second temps, le vecteur $\Xi_m(t)$ des fonctions du temps est mis à jour en utilisant l'application globale $\Xi_m = \tilde{T}(\Phi_m)$. L'algorithme des puissances itérées qui est employé pour calculer la version statique de la PGD de \mathbf{q} est identique à celui précédemment décrit pour u .

Evidemment, les problèmes en espace et en temps associés aux applications \tilde{S}_m et \tilde{T}_m sont à nouveau résolus de façon approchée, et la décomposition calculée est notée $\mathbf{q}_m^{h,\Delta t} = \mathbf{q}_0^h + \sum_{i=1}^m \phi_i^h \xi_i^{\Delta t}$.

Enfinement, le couple $(u_m^{h,\Delta t}, \mathbf{q}_m^{h,\Delta t})$ est SA au sens EF.

3.3 Calcul de champs admissibles

L'estimateur d'erreur globale que nous mettons en place est basé sur l'erreur en relation de comportement (ERC) [5]. L'utilisation de l'ERC nécessite le calcul d'un couple température-flux admissible, noté $(\hat{u}^{h,\Delta t}, \hat{\mathbf{q}}^{h,\Delta t})$ par la suite, associé à la solution PGD calculée. Le couple $(\hat{u}^{h,\Delta t}, \hat{\mathbf{q}}^{h,\Delta t})$ est admissible au sens où il vérifie (1), (2) et (4). Sa construction est menée à partir de la solution approchée $(u_m^{h,\Delta t}, \mathbf{q}_m^{h,\Delta t})$:

- un champ de température $\hat{u}^{h,\Delta t}$ vérifiant (1) et (4) est dit *cinématiquement admissible* (CA) ; un choix simple consiste à prendre le champ de température $u_m^{h,\Delta t}$ venant de l'approche PGD cinématique ;
- un couple $(\hat{u}^{h,\Delta t}, \hat{\mathbf{q}}^{h,\Delta t})$ vérifiant (2) est dit *statiquement admissible* (SA) ; la construction de $\hat{\mathbf{q}}^{h,\Delta t}$ est le point le plus technique. Il consiste à utiliser une relation énergétique, nommée *condition de prolongement*, impliquant le champ $\mathbf{q}_m^{h,\Delta t}$ venant de l'approche PGD statique. Les détails sur les différentes techniques utilisables pour construire $\hat{\mathbf{q}}^{h,\Delta t}$ à chaque pas de temps peuvent être trouvés dans [5] par exemple.

Remarque : En pratique, $\hat{\mathbf{q}}_m^{h,\Delta t}$ est construit comme :

$$\hat{\mathbf{q}}_m^{h,\Delta t} = \hat{\mathbf{q}}_0^h + \sum_{i=1}^m \hat{\phi}_i^h \zeta_i^{\Delta t} \quad ; \quad \hat{\mathbf{q}}_0^h = \hat{\mathbf{q}}(z_f^h) \kappa_f(t) + \hat{\mathbf{q}}(z_q^h) \kappa_q(t) + \sum_{i=1}^m \hat{\mathbf{q}}(s_i^h) \lambda_i^{\Delta t}(t) \quad (26)$$

où $\hat{\mathbf{q}}_0^h$ et $\hat{\phi}_i^h$ sont des champs SA et SA0, vérifiant la condition de prolongement avec \mathbf{q}_0^h et ϕ_i^h , respectivement.

3.4 Estimateur et indicateurs d'erreur

A partir de toute solution admissible $(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}})$ (les calculs précédents conduisent à prendre $(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}}) = (\hat{u}_m^{h,\Delta t}, \hat{\mathbf{q}}_m^{h,\Delta t})$), l'ERC est définie comme une mesure E_{CRE} de la non-vérification de (3) par le couple admissible. Elle s'écrit :

$$E_{CRE}^2(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}}) \equiv \int_0^T \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{q}} - \mu \nabla \hat{u}) \cdot \frac{1}{\mu} (\hat{\mathbf{q}} - \mu \nabla \hat{u}) d\Omega dt = \|\|\| \hat{\mathbf{q}} - \mu \nabla \hat{u} \|\|\|_{\mu^{-1}}^2 \quad (27)$$

Une propriété fondamentale de l'ERC est le lien avec la solution exacte $(u^{ex}, \mathbf{q}^{ex})$:

$$\|\|\| u^{ex} - \hat{u} \|\|_{\mu}^2 + \|\|\| \mathbf{q}^{ex} - \hat{\mathbf{q}} \|\|_{\mu^{-1}}^2 + \mathcal{G}(u^{ex} - \hat{u}) = E_{CRE}^2(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}}) \quad (28)$$

avec $\|\|\| \cdot \|\|_{\mu}^2 = \int_0^T \int_{\Omega} \mu \nabla(\cdot) \cdot \nabla(\cdot) d\Omega dt$ et $\mathcal{G}(u^{ex} - \hat{u}) = \int_{\Omega} \rho c (u^{ex} - \hat{u})^2|_{t=T} d\Omega \geq 0$.

L'équation (28), qui peut être vue comme une extension de l'égalité de Prager-Synge pour les problèmes dépendant du temps, montre directement que $\|\|\| u^{ex} - \hat{u} \|\|_{\mu} \leq E_{CRE}$ donc que la mesure E_{CRE} est une borne supérieure de l'erreur globale (décrite par une norme énergétique). Elle prend en compte toutes les sources d'erreur, i.e. les discrétisations en espace et en temps ainsi que la troncature de la somme dans la représentation PGD quand on choisit $(\hat{u}, \hat{\mathbf{q}}) = (\hat{u}_m^{h,\Delta t}, \hat{\mathbf{q}}_m^{h,\Delta t})$.

Afin d'optimiser le processus d'adaptation qui vise à diminuer l'erreur $\|\|\| u^{ex} - \hat{u}_m^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}$, il faut être capable d'estimer les contributions apportées par les différentes sources d'erreur ; ceci est fait en définissant des indicateurs d'erreur appropriés. La procédure pour définir de tels indicateurs d'erreur est très simple : on définit tout d'abord la solution $u^{h,\Delta t}$ du problème discret obtenu en discrétisant le problème de diffusion initial en espace et en temps (avec les mêmes discrétisations que celles utilisées pour calculer $u_m^{h,\Delta t}$). En utilisant par exemple une MEF classique et un schéma en temps de type Euler explicite, $u^{h,\Delta t}$ est obtenue en résolvant un système de la forme (P est le nombre de pas de temps) :

$$\mathbf{U}_h^1 = \mathbf{0} \quad ; \quad \mathbb{M} \frac{\mathbf{U}_h^{p+1} - \mathbf{U}_h^p}{\Delta t} + \mathbb{K} \mathbf{U}_h^p = \mathbf{F}_h^p \quad \forall p \in [1, P-1] \quad (29)$$

On peut alors écrire :

$$\|\|\| u^{ex} - u_m^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}^2 = \|\|\| u^{ex} - u^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}^2 + \|\|\| u^{h,\Delta t} - u_m^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}^2 \quad (30)$$

où $\|\|\| u^{ex} - u^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}$ est la contribution de l'erreur venant des discrétisations en espace et en temps seules, et $\|\|\| u^{h,\Delta t} - u_m^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}$ est la contribution de l'erreur venant de la représentation PGD seule. La seconde contribution peut être facilement estimée, sans aucun calcul supplémentaire, en définissant le problème (29) comme problème de référence et en utilisant l'ERC. Dans ce cadre, un couple admissible associé $(\hat{u}^{h,\Delta t}, \hat{\mathbf{q}}^{h,\Delta t})$ (dans le sens de (29)) peut être défini ; il est directement obtenu à chaque piquet de temps comme un post-traitement de la solution $(u_m^{h,\Delta t}, \mathbf{q}_m^{h,\Delta t})$ à disposition. On peut donc calculer l'estimateur :

$$E_{CRE,PGD} = \|\|\| \hat{\mathbf{q}}^{h,\Delta t} - \mu \nabla \hat{u}^{h,\Delta t} \|\|_{\mu^{-1}} \quad (31)$$

de l'erreur $\|\|\| u^{h,\Delta t} - u_m^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}$ venant de la représentation PGD.

Dans un second temps, (30) permet de définir l'estimateur $E_{CRE,dis}$ de l'erreur $\|\|\| u^{ex} - u^{h,\Delta t} \|\|_{\mu}$ venant des discrétisations en espace et en temps ; il s'écrit :

$$E_{CRE,dis} = \sqrt{E_{CRE}^2 - E_{CRE,PGD}^2} \quad (32)$$

La comparaison des valeurs de $E_{CRE,dis}$ et $E_{CRE,PGD}$ permet d'estimer la source critique d'erreur et de conduire la procédure adaptative efficacement.

4 Résultats numériques

Dans l'exemple qui suit, l'algorithme des puissances itérées est initialisé avec $\lambda^{(0)}(t) = t$ ($\xi^{(0)}(t) = t$). On utilise la MEF avec des éléments linéaires pour résoudre les problèmes en espace, et un schéma d'Euler explicite pour résoudre les problèmes en temps. Le nombre d'itérations faites dans l'algorithme des puissances itérées est fixé à $k_{max} = 4$.

On considère la structure 2D de la Fig. 1, qui présente deux trous rectangulaires dans lesquels circule un fluide ; par symétrie, on ne conserve qu'un quart du domaine 2D que nous notons Ω . Il est soumis sur $[0, T]$ à un flux donné $q_d = -1$ appliqué sur le bord du trou ; un terme source de la forme $f_d(x, y) = 200xy$ est également appliqué dans Ω . Pour l'étude numérique, on prend $T = 10$, $\mu = 1$, $\rho c = 1$.

Le maillage spatial utilisé pour discrétiser Ω consiste en $N_e = 50$ éléments quadrangulaires, et l'intervalle de temps $[0, T]$ est divisé en $N_p = 1000$ pas de temps.

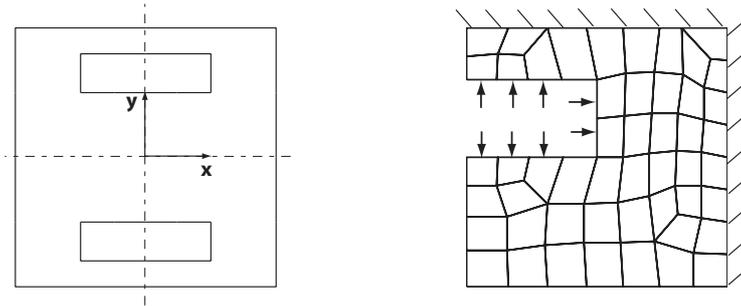


FIGURE 1 – Domaine 2D considéré (gauche), et maillage EF associé (droite).

On représente sur la Fig. 2 les premiers modes (ψ_m, λ_m) obtenus pour $m_{max} = 5$.

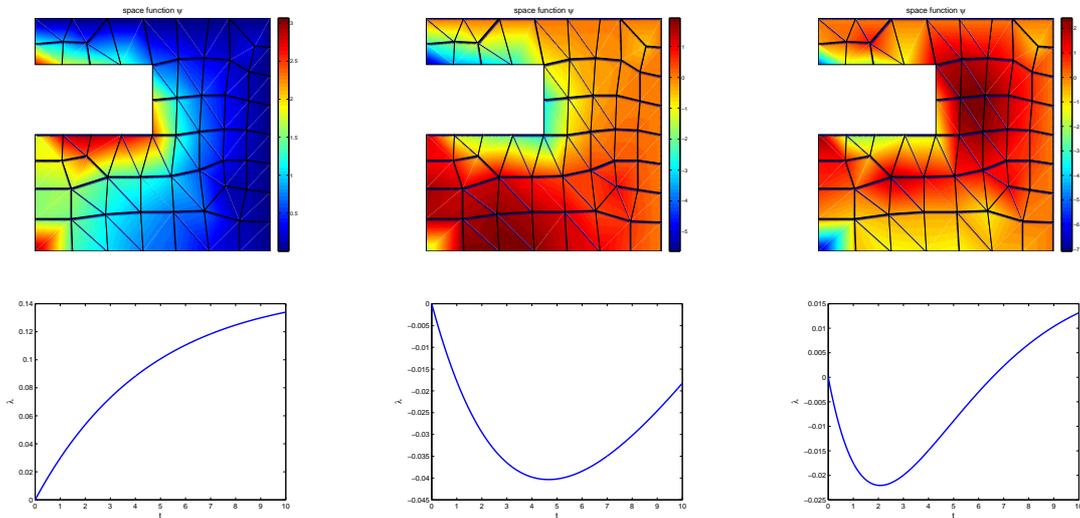


FIGURE 2 – Fonctions spatiales ψ_m (haut) et temporelles λ_m (bas) pour $m = 1, 2, 3$ (de gauche à droite).

Sur la Fig. 3 est donnée la valeur de l'estimateur d'erreur relative $\bar{E}_{CRE} = E_{CRE} / \|\hat{\mathbf{q}}\|_{\mu^{-1}}$ en fonction de l'ordre PGD m utilisé ($m \in [1, 10]$). L'estimateur d'erreur (qui prend en compte toutes les sources d'erreur) atteint la convergence pour $m = 4$.

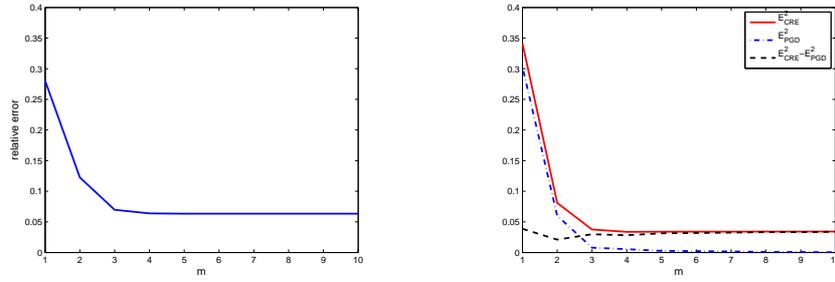


FIGURE 3 – Evolution des estimateurs E_{CRE}^2 , $E_{CRE,PGD}^2$ et $E_{CRE,dis}^2$ en fonction de l'ordre PGD m .

On introduit à présent le problème de référence obtenu avec une discrétisation en espace et en temps du problème de diffusion initial. Après avoir calculé les champs admissibles associés, on obtient l'estimateur $E_{CRE,PGD}$ de l'erreur venant de la représentation PGD seule. A partir de E_{CRE} et $E_{CRE,PGD}$, on en déduit alors un estimateur $E_{CRE,dis}$ de la discrétisation espace/temps seule. Les trois estimateurs sont donnés sur la Fig. 3 en fonction de l'ordre m .

On observe que l'indicateur $E_{CRE,dis}^2$ fournit une évaluation pertinente de l'erreur de discrétisation, même pour des petites valeurs de m . De plus, on peut voir que l'indicateur $E_{CRE,dis}$ devient plus grand que $E_{CRE,PGD}$ pour $m \geq 3$; cette information pourrait être utilisée dans une procédure d'adaptation optimisée dans laquelle on augmenterait tout d'abord le nombre de modes calculés, jusqu'à $m = 3$, avant de raffiner les discrétisations en espace et en temps pour obtenir une solution de meilleure qualité.

5 Conclusions

Nous avons présenté une méthode qui fournit un estimateur d'erreur garanti et robuste dans le cadre des simulations numériques menées avec la PGD. Cet estimateur, basé sur l'ERC, repose sur une double approche PGD du problème qui permet de calculer des champs admissibles avec outils classiques utilisés dans les codes EF. Des indicateurs sur les différentes sources d'erreur ont aussi été déterminés afin de pouvoir mener efficacement des stratégies adaptatives (celles-ci seront abordées plus tard).

La méthode d'estimation d'erreur est assez générale; elle pourrait être appliquée à d'autres problèmes paramétrés tels que les problèmes stochastiques. De plus, les estimateurs d'erreur obtenus pourraient être utilisés pour calculer des bornes d'erreur sur des quantités d'intérêt dans le cadre de la PGD.

Références

- [1] A. Ammar, F. Chinesta, P. Diez, A. Huerta. *An error estimator for separated representations of highly multi-dimensional models*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **199** :1872–1880, 2010.
- [2] F. Chinesta, P. Ladevèze, A. Ammar, E. Cueto, A. Nouy. *Proper generalized decomposition in extreme simulations : towards a change of paradigm in Computational Mechanics ?*, IACM Expressions, **26/09** :2–7, 2009.
- [3] F. Chinesta, A. Ammar, E. Cueto. *Recent advances and new challenges in the use of the Proper Generalized Decomposition for solving multidimensional models*, Archives of Computational Methods in Engineering, in press, 2010.
- [4] P. Ladevèze. *Nonlinear Computational Structural Mechanics : New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation*, Springer, 1998.
- [5] P. Ladevèze, J-P. Pelle. *Mastering Calculations in Linear and Nonlinear Mechanics*, Springer NY, 2004.
- [6] P. Ladevèze, J-C. Passieux, D. Néron. *The LATIN multiscale computational method and the Proper Generalized Decomposition*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **199(21)** :1287–1296, 2009.
- [7] P. Ladevèze, L. Chamoin. *On the control of model reduction methods based on the Proper Generalized Decomposition*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, accepted, 2010.
- [8] 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(23-24)** :1603–1626, 2010.