Élimination des conditions aux limites dualisées

Résumé :
La prise en compte des conditions aux limites dans c*ode_aster* peut être réalisée soit par une technique directe d'élimination dans des cas simples (AFFE_CHAR_CINE), soit grâce à une technique de dualisation (AFFE_CHAR_MECA), et à l'introduction de multiplicateurs de Lagrange, pour les cas les plus généraux.

Néanmoins, cette approche présente deux inconvénients. D'une part, l'ajout de multiplicateurs de Lagrange augmente le nombre de degré de liberté du problème global, et donc la taille du système à résoudre. Ce point peut devenir pénalisant dès lors que le nombre de conditions aux limites augmente (nombreuses interfaces, liaisons cinématiques, impositions de mouvements rigides, etc.). D'autre part, la technique particulière de dualisation conduit à la perte du caractère semi-défini positif de la matrice de raideur. Ce changement de nature peut conduire à des défauts de robustesse, voir à l'échec de la résolution dans le cas des solveurs itératifs.

On présente dans ce document une méthode permettant d'éliminer a posteriori les multiplicateurs de Lagrange pour prendre en compte les conditions aux limites affines. Cette approche ne concerne pas les multiplicateurs de Lagrange liés à la modélisation du contact.

L'élimination des conditions aux limites est réalisée soit par l'utilisation du mot-clef ELIM_LAGR dans SOLVEUR [U4.50.01], soit directement avec l'opérateur ELIM_LAGR [U4.55.03] qui construit un nouveau concept matr_asse_elim.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Table des Matières

1 Notations....3
2 Introduction....4
3 Principe de la résolution par élimination....4
3.1 Définition du problème à résoudre....4
3.2 Recherche de la solution particulière....5
3.3 Recherche de la solution générale....5
3.3.1 Obtention d'une base du noyau....5
3.3.2 Projection et résolution....6
4 Modes propres et élimination....8
5 Bibliographie....8

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Notations

$[K]_{N_t \times N_t}$	Matrice de raideur contenant les conditions aux limites dualisées
$[A]_{N \times N}$	Matrice de raideur du problème sans conditions aux limites
$[B]_{N_b \times N}$	Matrice de définition des conditions aux limites ou « matrice des contraintes »
$[I_d]_{N_b \times N_b}$	Matrice identité de taille $N_b \times N_b$
$[Z]_{N \times N_l}$	Matrice contenant une base du noyau (Ker) de B
$\{u\}_{N \times 1}$	Vecteur des déplacements solutions
$\{u_0\}_{N_b \times 1}$	Vecteurs des déplacements imposés
$\{u_N\}_{N_l \times 1}$	Fonctions de forme vérifiant les conditions aux limites
$(\omega_0, \{\varphi\}_{N_l \times 1})$	Modes propres vérifiant les conditions aux limites
$\{f\}_{N \times 1}$	Vecteur du chargement imposé
$\{\lambda\}_{N_c \times 1}$, $\{\lambda_1\}_{N_c \times 1}$, $\{\lambda_2\}_{N_c \times 1}$	Vecteurs des multiplicateurs de Lagrange
N	Nombre de degrés de liberté du problème non contraint
N_b	Nombre de contraintes
N_t	Nombre total d'inconnues • $N+N_b$ pour une dualisation simple, • $N+2N_b$ pour une dualisation double,
N_l	Nombre d'inconnues indépendantes, c'est aussi la taille du noyau de B $N_l = N - N_b$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Introduction

La prise en compte des conditions aux limites dans *Code_Aster* peut être réalisée soit par une technique directe d'élimination dans des cas simples (AFFE_CHAR_CINE), soit grâce à une technique de dualisation (AFFE_CHAR_MECA), et à l'introduction de multiplicateurs de Lagrange, pour les cas les plus généraux. Cette dernière approche est très générale et permet de traiter sous un même formalisme tous les types de conditions aux limites.

Néanmoins, cette approche présente deux inconvénients. D'une part, l'ajout de multiplicateurs de Lagrange augmente le nombre de degré de liberté du problème global, et donc la taille du système à résoudre. Ce point peut devenir pénalisant dès lors que le nombre de conditions aux limites augmente (nombreuses interfaces, liaisons cinématiques, impositions de mouvements rigides, etc.). D'autre part, la technique particulière de dualisation conduit à la perte du caractère semi-défini positif de la matrice de raideur. La recherche de la solution n'est alors plus une recherche de minimum, mais une recherche de point selle [1]. Ce changement de nature peut conduire à des défauts de robustesse, voir à l'échec de la résolution dans le cas des solveurs itératifs.

On présente dans ce document une méthode alternative à l'introduction de multiplicateurs de Lagrange pour prendre en compte les conditions aux limites affines. Cette approche ne se substitue pas à l'introduction des multiplicateurs de Lagrange, en particulier pour les études présentant du contact. En revanche, dans le cas des études où les conditions aux limites sont figées, cette approche permet des gains de robustesse, et de performance dans le cas d'un nombre important de conditions aux limites. On rappelle dans un premier temps la technique générale qui préside à l'élimination des conditions aux limites, puis on présente la démarche retenue pour éliminer en pratique les conditions aux limites, ainsi que les différents algorithmes associés. Enfin, on présente la technique d'élimination dans le cas d'un problème aux valeurs propres.

3 Principe de la résolution par élimination

3.1 Définition du problème à résoudre

Le système à résoudre peut se mettre sous la forme générale suivante :

$$[K]\{u\}=\{f\} \tag{1}$$

sous la contrainte

$$[B]\{u\}=\{u_0\} \tag{2}$$

Avec l'introduction de multiplicateurs de Lagrange, le problème devient

$$\begin{cases}[K]\{u\}+[B]^T\{\lambda\}=\{f\}\\ [B]\{u\}=\{u_0\}\end{cases} \tag{3}$$

et se met sous la forme générale

$$\begin{bmatrix}K & B^T\\ B & 0\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}u\\ \lambda\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}f\\ u_0\end{Bmatrix} \tag{4}$$

Dans le cas de la double dualisation (AFFE_CHAR_MECA), cette matrice est augmentée, et le système à résoudre devient

$$\begin{bmatrix}K & B^T & B^T\\ B & -\alpha I_d & \alpha I_d\\ B & \alpha I_d & -\alpha I_d\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}u\\ \lambda_1\\ \lambda_2\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}f\\ u_0\\ u_0\end{Bmatrix} \tag{5}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

après avoir posé naturellement $\lambda_1=\lambda_2=\lambda/2$.
Pour rendre son caractère semi-défini positif au problème générique $Ku=f$, dans le cas où la matrice K présente une topologie découlant de la mise sous la forme (4) ou (5), on va chercher à décomposer la solution u du problème sous la forme $u=u_p+u_g$, où

- u_p est la solution particulière du problème,
- u_g est la solution générale du problème, associée aux conditions aux limites $[B]\{u_g\}=\{0\}$.

3.2 Recherche de la solution particulière

La recherche de la solution particulière consiste simplement à trouver u_p tel que $[B]\{u_p\}=\{u_0\}$. Pour calculer u_p , on considère la décomposition sur l'image et le noyau de B , soit $u_p=u_{p-i}+u_{p-n}$, avec u_{p-i} appartenant à l'image de B et u_{p-n} appartenant au noyau de B .

Ce problème peut être résolu au sens des moindres carrés, et dans ce cas, on considère la solution de (2) de norme L_2 minimale, soit $u_p=u_{p-i}$. $\{u_{p-i}\}$ est la solution du problème de minimisation :

$$\{u_{p-i}\}=\underset{\{u_p\}}{\mathrm{ArgMin}}\left(\left\|[B]\{u_p\}-\{u_0\}\right\|^2\right) \tag{6}$$

Pour calculer efficacement u_{p-i} , sous réserve que B soit de rang plein (rang égal à Nb , donc pas de contraintes redondantes), on exploite la propriété suivante :

$$\left([B][B]^T\right)\left([B][B]^T\right)^{-1}=[I_d]_{NbxNb} \tag{7}$$

et donc

$$\left([B][B]^T\right)\left([B][B]^T\right)^{-1}\{u_0\}=\{u_0\} \tag{8}$$

La solution recherchée est naturellement donnée par :

$$\{u_p\}=\{u_{p-i}\}=[B]^T\left([B][B]^T\right)^{-1}\{u_0\} \tag{9}$$

En pratique, on effectue une factorisation de Cholesky de la matrice symétrique BB^T , à l'aide de la bibliothèque MUMPS, puis on résout

$$[B][B]^T\{y\}=\{u_0\} \tag{10}$$

Enfin, on obtient $\{u_p\}$:

$$\{u_p\}=\{u_{p-i}\}=[B]^T\{y\}$$

3.3 Recherche de la solution générale

La solution générale u_g vérifiant $[B]\{u_g\}=\{0\}$, elle appartient au noyau de B . La recherche de la solution générale passe donc par une étape de construction d'une base Z du noyau de B . On peut ensuite projeter le problème sur le noyau, et résoudre ce problème, mieux posé et de taille réduite.

3.3.1 Obtention d'une base du noyau

Formellement, la construction du noyau de B peut se faire de plusieurs façons :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

• Décomposition en valeurs singulières de B, soit $B=USV^T$. $Ker(B)$ est l'espace engendré par les colonnes de V^T associées à une valeur singulière nulle.

• Décomposition QR de B^T, soit $B=R^T Q^T$. $Ker(B)$ est l'espace engendré par les colonnes de Q associées à une valeur nulle sur la diagonale de R^T.

• Décomposition LU de B^T. Le calcul du noyau n'est pas direct, et s'obtient à partir de sous-blocs de L.

C'est cette troisième méthode qui est mise en œuvre dans code_aster. On utilise la bibliothèque SuperLU pour construire la factorisation LU de B^T :

$$P_r B^T P_c^T=[L][U]=\begin{bmatrix}[L_1]_{N_b\times N_b} & [0] \\ [L_2]_{(N-N_b)\times N_b} & [L_3]_{(N-N_b)\times(N-N_b)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}[U_1]_{N_b\times N_b} \\ [0]_{(N-N_b)\times N_b}\end{bmatrix} \quad (11)$$

Les matrices P_r et P_c désignent respectivement les matrices de permutation imposées aux lignes et aux colonnes de B^T pour la construction de la factorisation LU. Les blocs L_1 et L_3 sont triangulaires inférieurs et le bloc U_1 est triangulaire supérieur.

Remarque :

En pratique, $P_c=Id$, il n'y a pas de permutation des colonnes de B^T.

On en déduit l'expression suivante pour B :

$$B=U^T L^T P_r=\begin{bmatrix}[U_1]^T_{N_b\times N_b} & [0]_{N_b\times(N-N_b)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}[L_1]^T_{N_b\times N_b} & [L_2]^T_{N_b\times(N-N_b)} \\ [0] & [L_3]^T_{(N-N_b)\times(N-N_b)}\end{bmatrix}P_r \quad (12)$$

Il est ensuite facile de voir qu'une base de $Ker(B)$ est donnée par :

$$Z=P_r^{-1}\begin{bmatrix}-[L_1]^{-T}[L_2]^T \\ [I_d]_{(N-N_b)\times(N-N_b)}\end{bmatrix} \quad (13)$$

On fait ici l'hypothèse que B est de rang plein. Si tel n'est pas le cas, alors il suffit de construire L_1 à partir du bloc de L associé aux termes non nuls de la diagonale de U.

3.3.2 Projection et résolution

Une fois que la base du noyau est calculée, la résolution est directe. On pose $u_g=Z\,\bar{u}$, et la solution du problème est donc directement donnée par

$$[Z]^T[K][Z]\{\bar{u}\}=Z^T\{f\}\ , \quad (14)$$

puisque, par construction,

$$[Z]^T[B]^T\{\lambda\}=\{0\}\ . \quad (15)$$

Dans certains cas, il est nécessaire d'accéder aux multiplicateurs de Lagrange. Il faut donc les reconstruire, à partir des solutions u_p et u_g. Pour ce faire, on doit résoudre la première ligne du système (3), soit

$$[B]^T\{\lambda\}=\{f\}-[K]\left([Z]\{\bar{u}\}+\{u_p\}\right) \quad (16)$$

Si B est de rang plein, la solution s'écrit formellement :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\{\lambda\}=\left([B][B]^T\right)^{-1}[B]\{f\}-[K]\left([T]\{\bar{u}\}+\{u_p\}\right), \quad (17)$$

et se calcule en pratique en réutilisant la factorisation de $B\,B^T$ calculée pour la recherche de la solution particulière. De façon analogue, si B n'est pas de rang plein, il est possible de supprimer les contraintes redondantes.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

4 Modes propres et élimination

Cette section fait écho à la section §7 de la documentation R3.03.01, et justifie la méthode d'élimination pour le calcul des modes propres. On s'intéresse ici au problème général suivant :

Trouver les couples $\left(\omega_0^2,\{\varphi\}\right)$ vérifiant $\left([K_b]-\omega_0^2[M_b]\right)\{\varphi\}=0$ (18)

Les matrices M_c et K_c doivent prendre en compte les conditions aux limites, et sont ici supposées obtenues à partir de fonctions de formes u_N vérifiant $Bu_N=0$. Or, dans le cas présent, le problème assemblé n'est pas le problème (18), mais un problème de taille plus importante, pour lequel les fonctions de formes ne vérifient pas les contraintes cinématiques. Les matrices M_b et K_b sont de dimension $\left(N-Nb\right)\times\left(N-Nb\right)$.
En partant des matrices assemblées M et K , de taille $N\times N$, construites sur la base de fonctions de formes u ne vérifiant pas $Bu=0$, il existe deux alternatives pour résoudre le problème (18). La première consiste à augmenter la matrice K pour faire apparaître les contraintes cinématiques, en ajoutant des inconnues sous la forme de multiplicateurs de Lagrange. C'est l'approche retenue jusqu'à présent dans le code. Le problème à résoudre s'écrit, avec la technique de double dualisation :

$$\left(\begin{bmatrix} K & B^T & B^T \\ B & -Id & Id \\ B & Id & -Id \end{bmatrix}-\omega_0^2\begin{bmatrix} M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\right)\begin{Bmatrix} \varphi \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (19)$$

L'approche par ajouts de multiplicateurs de Lagrange, dans le cas de la recherche des modes propres, n'est pas satisfaisante, puisqu'en plus de la perte des propriétés de positivité de l'opérateur, on ajoute un nombre important de degrés de liberté, et on élargit donc le spectre du problème. Cet élargissement de spectre pose des problèmes numériques, qui obligent à un travail important dans ce cas.
La seconde approche, celle proposée ici, est plus naturelle, et se rapproche du problème initial. Les matrices de masse et de raideur sont certes assemblées sur la base de fonctions de formes ne vérifiant pas les conditions limites, mais la recherche des modes propres et des valeurs propres peut se faire dans un sous espace adapté. Il suffit de construire une base du sous espace des vecteurs v vérifiant $Bv=0$. Ce sous espace est naturellement le noyau de B . Il suffit alors de rechercher les modes du problème non contraint projeté dans le noyau de B . Soit Z une base du noyau, on cherche alors les couples $\left(\omega_0^2,\{\psi\}\right)$ qui vérifient

$$\left[Z^T\left(K-\omega_0^2 M\right)Z\right]\{\psi\}=\{0\} \quad (20)$$

On identifie alors $M_b=Z^T M Z$ et $K_b=Z^T K Z$.

Les efforts de réactions f_0 , calculés par $f_0=\lambda_1+\lambda_2$ dans la méthode avec double dualisation (voir relation 19), sont simplement fournis par

$$\left[B\left(K-\omega_0^2 M\right)Z\right]\{\psi\}=\{f_0\} \quad (21)$$

5 Bibliographie

[1] Benzi, M. and Golub, G.H., and Liesen, J. :Numerical solution of saddle point problems, Acta Numerica, Vol. 14, pp1 - 137 (2005).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)