

Accélération de Convergence

1 Accélération de convergence

1.1 Construction d'un sous-espace sécant

Le principe consiste à réduire l'opérateur tangent (inconnu et on ne souhaite pas le calculer) à un sous espace (Line Search Multidimension)

A chaque itération est associé un couple $\{\vec{U}_i, \vec{R}_i\}$ vérifiant l'équation suivante :

$$F_{ext}(\vec{U}_i) - F_{int}(\vec{U}_i) = \vec{R}_i$$

Il faut définir un produit scalaire auquel on associe la norme Euclidienne (le choix de la norme n'est pas unique) :

$$\begin{aligned} - \vec{u} \cdot \vec{v} &= \sum_{i=1}^q (u_i v_i) \\ - \|\vec{v}\| &= \vec{v} \cdot \vec{v} \end{aligned}$$

Remarques :

- 1- La norme Euclidienne est choisie parce que la minimisation (dérivation) fait apparaître un système linéaire (facile à résoudre).
- 2- On minimise $\vec{R} \cdot \vec{R}$ mais on pourrait envisager de minimiser le travail associé à l'incrément de déplacement : $\Delta \vec{U} \cdot \vec{R}$

En sélectionnant \vec{R}_n l'un des résidus (au choix), après $m + 1$ itérations, on peut construire m vecteurs $(\vec{R}_{i \neq n} - \vec{R}_n)$ constituant un espace vectoriel (Ils ne sont pas nécessairement libres). Une base orthonormée $\{\vec{b}_i\}$ constituée de p vecteurs ($p \leq m$) est fabriquée à l'aide du procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt :

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \beta_1 (\vec{R}_1 - \vec{R}_n) \\ \vdots \\ \vec{b}_{i \neq n} = \beta_i \left[(\vec{R}_i - \vec{R}_n) - \sum_{k=1}^{i-1} (p_{ik} - p_{nk}) \vec{b}_k \right] \end{cases} \quad \text{Avec : } \begin{cases} \beta_i = \left\| (\vec{R}_i - \vec{R}_n) - \sum_{k=1}^{i-1} (p_{ik} - p_{nk}) \vec{b}_k \right\| \\ p_{jk} = \vec{R}_j \cdot \vec{b}_k \end{cases}$$

Il est à présent possible d'écrire n'importe quel vecteur \vec{R} dans le sous espace affine associé par la relation suivante :

$$\vec{R} = \vec{R}_n + \sum_{i=1}^p (\lambda_i \vec{b}_i)$$

1.2 Minimisation du résidu

L'opération suivante consiste à déterminer les λ_k tel que la norme $\|\vec{R}_{acc}\|$ soit minimale.

$$\forall k \in [1; p] \quad \frac{\partial(\vec{R}_{acc} \cdot \vec{R}_{acc})}{\partial \lambda_k} = 2 \frac{\partial \vec{R}_{acc}}{\partial \lambda_k} \cdot \vec{R}_{acc} = 0$$

$$\Rightarrow \forall k \in [1; p] \quad 2 \frac{\partial \vec{R}_{acc}}{\partial \lambda_k} \cdot \vec{R}_{acc} = 0$$

Calcul du terme $\frac{\partial \vec{R}_{acc}}{\partial \lambda_k}$

$$\frac{\partial \vec{R}_{acc}}{\partial \lambda_k} = \frac{\partial \left(\vec{R}_n + \sum_{i=1}^p (\lambda_i \vec{b}_i) \right)}{\partial \lambda_k} = \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^p (\lambda_i \vec{b}_i) \right)}{\partial \lambda_k} = \sum_{i=1}^p \left(\frac{\partial (\lambda_i \vec{b}_i)}{\partial \lambda_k} \right) = \sum_{i=1}^p \left(\frac{\partial \lambda_i}{\partial \lambda_k} \vec{b}_i \right) = \sum_{i=1}^p (\delta_{ik} \vec{b}_i) = \vec{b}_k$$

Ce qui donne, en l'introduisant dans la relation précédente et en développant :

$$\forall k \in [1; p] \quad \vec{R} \cdot \frac{\partial \vec{R}_{acc}}{\partial \lambda_k} = 0$$

$$\Rightarrow \left(\vec{R}_n + \sum_{i=1}^p (\lambda_i \vec{b}_i) \right) \cdot \vec{b}_k = 0$$

$$\Rightarrow \vec{R}_n \cdot \vec{b}_k + \left[\sum_{i=1}^p (\lambda_i \vec{b}_i) \right] \cdot \vec{b}_k = 0$$

$$\Rightarrow \vec{R}_n \cdot \vec{b}_k + \left[\sum_{i=1}^p (\lambda_i (\vec{b}_i \cdot \vec{b}_k)) \right] = 0$$

$$\Rightarrow \vec{R}_n \cdot \vec{b}_k + \left[\sum_{i=1}^p (\lambda_i \delta_{ki}) \right] = 0$$

$$\Rightarrow \vec{R}_n \cdot \vec{b}_k + \lambda_k = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_k = -\vec{R}_n \cdot \vec{b}_k$$

Précédemment on a déjà calculé $\vec{R}_n \cdot \vec{b}_k$ lors de l'orthogonalisation :

$$p_{nk} = \vec{R}_n \cdot \vec{b}_k$$

$$\Rightarrow \lambda_k = -p_{nk}$$

Les λ_k minimisant $\|\vec{R}\|$ sont déjà déterminés durant la fabrication de la base orthonormée. Ainsi, le nouveau résidu projeté (corrigé) vaut :

$$\vec{R}_{acc} = \vec{R}_n - \sum_{i=1}^p (p_{ni} \vec{b}_i)$$

Le nouvel incrément de déplacement $\overrightarrow{\Delta U}_{acc}$ sera calculé à l'aide de l'opérateur $\overline{\overline{K}}$ (raideur élastique par défaut dans Cast3M mais on pourrait choisir autre chose) et sera ajouté au déplacement \overrightarrow{U}_n associé au résidu \overrightarrow{R}_n de référence :

$$\begin{aligned}\overrightarrow{\Delta U}_{acc} &= \overline{\overline{K}}^{-1} \cdot \overrightarrow{R}_{acc} \\ \Rightarrow \overrightarrow{U}_{i+1} &= \overrightarrow{U}_n + \overrightarrow{\Delta U}_{acc}\end{aligned}$$

Le comportement peut à nouveau être évalué par $\overline{F}_{ext}(\overrightarrow{U}_{i+1}) - \overline{F}_{int}(\overrightarrow{U}_{i+1}) = \overrightarrow{R}_{i+1}$ et l'opération se poursuit à chaque itération.