

ALGORITHME DE REGION DE CONFIANCE POUR LA SIMULATION NUMERIQUE D'ÉCOULEMENTS DE FLUIDES VISCOELASTIQUES

Y. BERAUX[†] J.R. CLERMONT[†] A. YASSINE[‡]

ABSTRACT. La simulation numérique d'écoulements de fluides viscoélastiques induit des problèmes non-linéaires qui imposent une résolution itérative. Dans le cadre des méthodes d'optimisation sans contraintes, il peut être intéressant de disposer d'un algorithme présentant une propriété de convergence globale. C'est le cas des méthodes de région de confiance que nous avons implémentées dans le code de calcul simulant des écoulements de fluides viscoélastiques par la méthode des tubes de courant. Outre des résultats numériques de convergence sur ces types de problèmes, nous présentons l'influence des divers paramétrages envisageables pour ces algorithmes. Le coût de calcul de la matrice hessienne est drastiquement réduit par la formulation qui nécessite peu d'inconnues, par l'utilisation d'une approximation de Gauss-Newton de la matrice hessienne et surtout grâce au calcul direct et exact de la matrice jacobienne du système des équations gouvernantes.

Mots-clés : Optimisation sans contraintes, Algorithme de région de confiance, Viscoélasticité

Classification mathématique : 76M25 OTHERS NUMERICAL METHODS, 76A10 VISCOELASTIC FLUIDS

1. INTRODUCTION

La simulation numérique d'écoulements de fluides viscoélastiques fournit toute une gamme de problèmes où les non-linéarités sont principalement dues à la loi de comportement choisie pour décrire le fluide. La résolution numérique du système discret non-linéaire doit se faire de manière itérative et s'avère en pratique très délicate à mener à partir d'une solution initiale très proche de la solution à la convergence. Dans le cadre des méthodes d'optimisation sans contraintes, il peut être intéressant de disposer d'un algorithme présentant une propriété de convergence globale. Dans le cadre de la méthode des tubes de courant, appliquée à l'étude d'un écoulement de fluide viscoélastique représenté par une loi de comportement intégrale de type Wagner [5, 1], nous avons développé un algorithme de région de confiance applicable à un problème de moindres carrés non-linéaires. Nous présentons ici, outre la définition de cet algorithme, des résultats de convergence ainsi que l'influence des méthodes de calcul de certains paramètres sur les performances d'ensemble de l'algorithme.

2. ALGORITHME DE RÉGION DE CONFIANCE

On peut définir un algorithme de région de confiance de la manière suivante : Si S représente la fonction objective de \mathbf{R}^n dans \mathbf{R} , dont on recherche le minimum \vec{x}^* , un développement limité au second ordre de S autour de \vec{x}

indique que :

$$S(\vec{x} + \vec{\delta}) = S(\vec{x}) + \vec{g}(\vec{x}) \bullet \vec{\delta} + \frac{1}{2} \vec{\delta}^t \bullet H(\vec{x}) \bullet \vec{\delta} = q(\vec{\delta}) \quad (1)$$

où \vec{g} et H représentent le gradient et la matrice hessienne de la fonction objective S . On désigne par q l'approximation quadratique locale de S . Ce développement de S est valide dans un certain voisinage de \vec{x} . L'idée de base de la méthode de région de confiance est alors de minimiser cette approximation quadratique locale q sur une boule centrée en \vec{x} et dont le rayon Δ est appelé rayon de confiance. La condition de stationnarité pour q est évidemment :

$$\nabla q = \vec{0} \quad (2)$$

Comme q est quadratique en $\vec{\delta}$, cette condition de stationnarité implique que $\vec{\delta}$ est solution du système linéaire :

$$H(\vec{x}) \bullet \vec{\delta} = -\vec{g}(\vec{x}) \quad (3)$$

$\vec{\delta}$ est alors la direction de recherche de la méthode de Newton classique, appliquée au problème de minimisation sans contraintes de S .

A ce stade trois difficultés peuvent apparaître :

- Cette direction de recherche peut être “trop grande” par rapport au rayon de confiance dans lequel l'approximation quadratique locale q est valide :

$$\|\vec{\delta}\| > \Delta \quad (4)$$

- Ou bien cette direction de recherche n'est pas une direction de descente, à savoir :

$$S(\vec{x} + \vec{\delta}) \geq S(\vec{x}) \quad (5)$$

- Ou encore, on ne peut pas calculer de direction de recherche car H n'est pas définie en \vec{x} .

La particularité des méthodes de région de confiance intervient à ce niveau, par leur capacité à rectifier le calcul de cette direction de recherche insatisfaisante en calculant une autre direction de recherche par la résolution cette fois du système linéaire suivant :

$$(H(\vec{x}) + \lambda D) \bullet \vec{\delta} = -\vec{g}(\vec{x}) \quad (6)$$

où D représente une matrice diagonale et $\lambda \geq 0$ désigne le paramètre de Levenberg-Marquardt [8] calculé de telle sorte que soient vérifiées les contraintes:

$$\begin{aligned} \|D(\vec{\delta})\| &= \Delta \\ S(\vec{x} + \vec{\delta}) &< S(\vec{x}) \end{aligned} \quad (7)$$

C'est d'ailleurs dans le choix de la matrice D et dans le mode de calcul de ce paramètre de Levenberg-Marquardt qu'interviennent les principales différences entre les implémentations possibles. Les conditions générales nécessaires et suffisantes d'optimalité du problème de minimisation de q

sous les contraintes (7) sont alors [10]:

$$\begin{cases} (H + \lambda D) \text{ semi-définie positive en } \vec{x} \\ (H(\vec{x}) + \lambda D) \bullet \vec{\delta} = -\vec{g}(\vec{x}) \\ \|D(\vec{\delta})\| \leq \Delta \\ \lambda(\|D(\vec{\delta})\| - \Delta) = 0 \\ \lambda \geq 0 \end{cases} \quad (8)$$

L'intérêt majeur des méthodes de région de confiance réside dans leur propriété de convergence globale [4, Chap. 5]:

THÉORÈME 1. Convergence globale. *Si la suite des itérés successifs \vec{x}^k est incluse dans un domaine borné B , si S , la fonction objective, est deux fois continûment dérivable sur B ; alors, il existe un point d'accumulation \vec{x}^∞ qui satisfait aux conditions nécessaires et suffisantes d'optimalité. \vec{x}^∞ est donc un minimum local. Si, de plus, la matrice Hessienne est k -Lipschitzienne dans un voisinage de \vec{x}^∞ , alors la méthode de région de confiance converge quadratiquement vers \vec{x}^∞ .*

3. DÉTAIL DE L'IMPLÉMENTATION

3.1. CAS DES MOINDRES CARRÉS NON-LINÉAIRES

Le système non linéaire $\vec{F}(\vec{x})$ résultant des équations gouvernantes et des conditions aux limites donne lieu à une fonction objective S définie comme la demi-somme des carrés des composantes de \vec{F} :

$$S(\vec{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m F_i^2(\vec{x}) \quad (9)$$

Nous nous situons donc dans le cas particulier des moindres carrés non-linéaires où l'on peut définir une matrice jacobienne J :

$$J = \nabla \vec{F} \quad (10)$$

Le vecteur gradient \vec{g} et la matrice Hessienne H se calculent alors de la manière suivante:

$$\begin{aligned} \vec{g} &= \nabla s = J^t \bullet \vec{F} \\ H &= \nabla^2 s = J^t \bullet J + \nabla^2 \vec{F} \bullet \vec{F} \end{aligned} \quad (11)$$

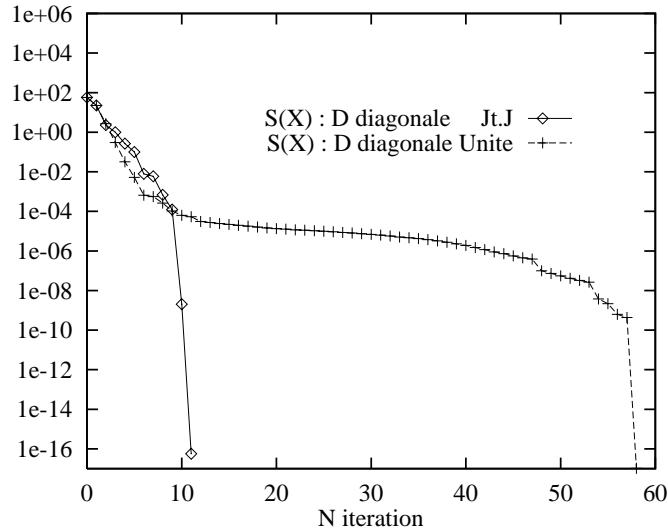
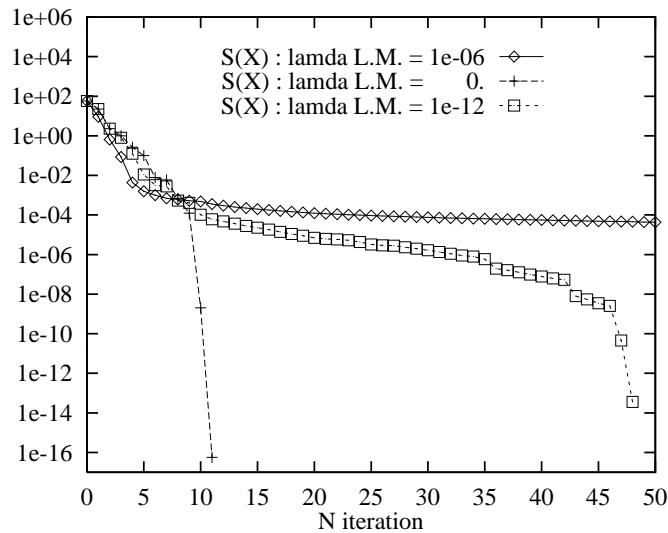
3.2. CALCUL DES MATRICES JACOBienne ET HESSIENNE

Un premier choix d'implémentation concerne le calcul de la matrice hessienne pour laquelle on utilise l'approximation de Gauss-Newton, classique dans le cas des problèmes de moindres carrés non-linéaires :

$$H = J^t \bullet J \quad (12)$$

Cette approximation à l'avantage de ne retenir que la partie semi-définie positive de H .

La matrice jacobienne est, elle, calculée directement et exactement suivant les expressions formelles des dérivées des composantes de \vec{F} , plutôt que par différence finie sur chaque composante, par rapport à chaque inconnue.

FIGURE 1. Influence de la matrice diagonale D sur la convergence.FIGURE 2. Influence de la valeur de λ initial sur la convergence.

3.3. CHOIX DE LA MATRICE DIAGONALE D

La matrice diagonale D est en fait la diagonale de H , ce qui confère une propriété d'invariance d'échelle à l'algorithme. Ce choix est nettement plus efficace que celui où D est la matrice identité, comme le montre l'évolution de S (cf. Fig. 1) obtenue dans le cas d'un problème d'un écoulement de Poiseuille dont la solution initiale est la solution exacte avec une perturbation [2].

3.4. CALCUL DU PARAMÈTRE DE LEVENBERG-MARQUARDT

A chaque itération k , le paramètre de Levenberg-Marquardt est nul initialement, c'est-à-dire que l'on calcule et teste une direction de recherche qui est la direction de recherche donnée par une méthode de Newton. Ce choix n'est pas sans conséquence sur les performances de l'algorithme (cf. Fig. 2) où l'on voit clairement dans le cas d'un écoulement de Poiseuille perturbé [2], que le choix de λ initial nul est le meilleur possible.

Lorsque la direction calculée pour $\lambda = 0$ ne satisfait pas aux contraintes (7), on calcule $\lambda > 0$ par l'algorithme de Hebden [9, 3].

Le sous-problème qui se pose alors est de rechercher pour un rayon de confiance donné Δ , le paramètre de Levenberg-Marquardt λ tel que la direction de recherche $\vec{\delta}$ obtenue par la résolution du système linéaire (6) soit telle que :

$$\|D \bullet \vec{\delta}\| = \Delta \quad (13)$$

En fait la norme de cette direction de recherche définit une fonction scalaire Φ :

$$\Phi(\lambda) = \|D \bullet \vec{\delta}\| \quad (14)$$

et le paramètre de Levenberg-Marquardt recherché est solution de l'équation non-linéaire :

$$\Phi(\lambda) - \Delta = 0 \quad (15)$$

L'idée d'Hebden est de résoudre cette équation non-linéaire en appliquant un schéma de Newton à l'équation inverse [6], afin d'utiliser au mieux le fait que $\Phi(\lambda)$ est une fonction rationnelle :

$$\Psi(\lambda) = \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Phi(\lambda)} = 0 \quad (16)$$

On génère alors la suite d'itérés successifs :

$$\lambda_{i+1} = \lambda_i + \frac{\Phi(\lambda_i)}{\Phi'(\lambda_i)} \frac{\Delta - \Phi(\lambda_i)}{\Delta} \quad (17)$$

où $\Phi'(\lambda_i)$ est définie par :

$$\Phi'(\lambda_i) = -\frac{1}{\Phi(\lambda_i)} (D \bullet \vec{\delta})^t \bullet (H(\vec{x}) + \lambda D)^{-1} \bullet (D \bullet \vec{\delta}) \quad (18)$$

On réitère le processus jusqu'à ce que :

$$\left| \frac{\Delta - \Phi(\lambda_i)}{\Delta} \right| \leq 0.1 \quad (19)$$

On vérifie que la deuxième contrainte (7) est satisfaite, à savoir que la direction de recherche ainsi calculée est une direction de descente. Si oui, on double le rayon de confiance Δ et le nouvel itéré est $\vec{x}^{k+1} + \vec{\delta}$. Dans le cas contraire, on divise Δ par deux et l'on reprend l'algorithme de Hebden.

En pratique, lorsque l'on utilise une matrice diagonale D différente de la matrice identité, cet algorithme de Hebden doit faire intervenir des bornes variables qui encadrent l'itéré λ_i et entre lesquelles il faut éventuellement le replacer [9]. La convergence, quadratique, est très rapide et assurée en une dizaine d'itérations au maximum.

Cet algorithme de Hebden marque un net avantage sur la stratégie de calcul de λ dans l'algorithme de Levenberg-Marquardt de la bibliothèque I.M.S.L. utilisé auparavant [1].

3.5. CRITÈRES DE CONVERGENCE

A chaque itération k , on évalue les critères de convergence suivants, dont la vérification séparée ou simultanée détermine l'arrêt des calculs :

- Condition de stationnarité.

$$\|\vec{g}^k\| \leq 10^{-4} \quad (20)$$

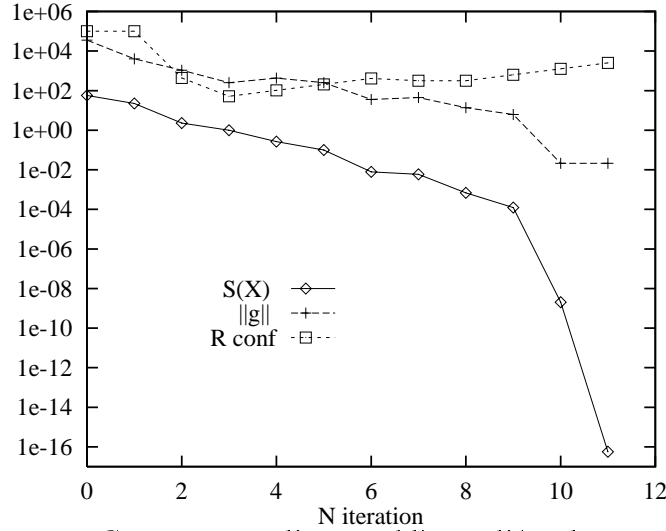


FIGURE 3. Convergence d'un problème d'écoulement de Poiseuille perturbé. Evolution au cours des itérations de S , $\|\vec{g}\|$, et de Δ le Rayon de confiance.

- Résolution du système d'équations non-linéaires $\vec{F}(\vec{x}) = \vec{0}$

$$S(\vec{x}^k) \leq 10^{-12} \quad (21)$$

- Les réductions successives ne sont plus significatives et l'on a atteint un minimum de la fonction objective S .

$$\Delta \leq 10^{-6} \quad (22)$$

4. RÉSULTATS DE CONVERGENCE

Nous présentons ici quelques résultats de convergence obtenus, d'une part pour des écoulements de Poiseuille de fluides viscoélastiques, d'autre part pour des écoulements en filières convergentes [5, 2]. Ces deux problèmes distincts présentent des ordres de convergence différents.

4.1. DEUX TYPES DE CONVERGENCE

Dans le cas d'un écoulement de Poiseuille perturbé (cf. Fig. 3 et 4), la convergence est d'abord linéaire puis devient quadratique sur les trois dernières itérations. La solution \vec{x}^* est alors telle que $S(\vec{x}^*) = 0$ et c'est le deuxième critère de convergence qui est vérifié (cf. 21). On constate que les hypothèses spécifiques de l'algorithme de Région de Confiance (calcul d'un paramètre de Levenberg-Marquardt λ différent de zéro et réduction du rayon de confiance Δ) ont été nécessaires au cours des itérations $n^\circ 2$ et $n^\circ 3$. Ensuite, le rayon de confiance a été doublé constamment au cours des itérations suivantes (cf. Fig. 3). La non-linéarité de S se manifeste lorsque la norme de son gradient augmente entre deux itérations successives, bien que S ait diminué (cf. Fig. 3, les itérations $n^\circ 3, 4, 6, 7$).

Dans le cas des problèmes d'écoulements en filières convergentes, beaucoup plus complexes, la solution n'est pas a priori telle que $S(\vec{x}^*) = 0$, du fait des erreurs de consistance des schémas de discrétisation. La réduction de S est très forte dans les premières itérations puis très lente ensuite (cf. Fig. 5). Le calcul d'un λ différent de zéro, avec ou sans réduction du rayon

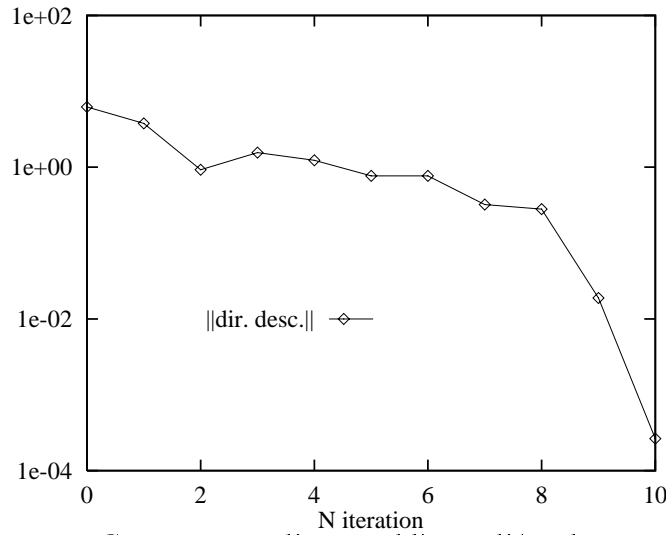


FIGURE 4. Convergence d'un problème d'écoulement de Poiseuille perturbé. Evolution au cours des itérations de la norme de la direction de descente $\|\vec{\delta}\|$.

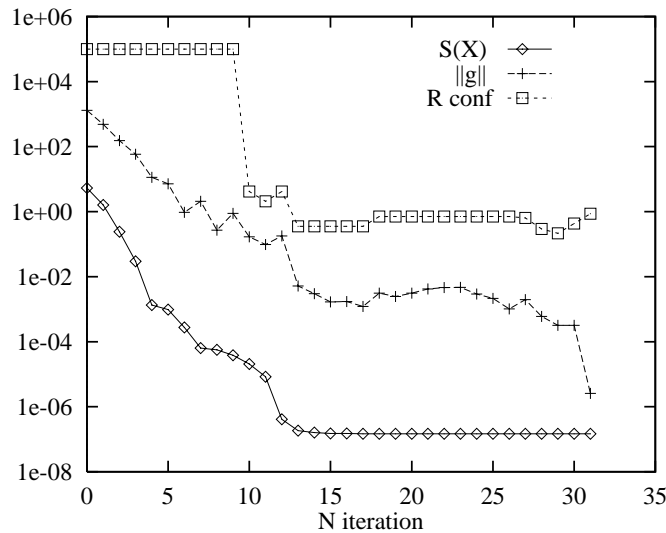


FIGURE 5. Convergence d'un problème d'écoulement en filière convergente à 45° . Evolution au cours des itérations de S , $\|\vec{g}\|$, et de Δ le Rayon de confiance.

de confiance, intervient alors dans la majorité des itérations. C'est le premier critère de convergence, celui de la stationnarité, qui est satisfait : en effet, à l'itération $n^\circ 31$, $\|\vec{g}\| \leq 10^{-5}$

4.2. ORDRE DE CONVERGENCE

Ces deux types de convergence de l'algorithme sont tout à fait conforme à ce que l'on était en droit d'attendre de nos formulations. En effet, dans le cas des problèmes de moindre carrés non-linéaires où la matrice Hessienne est approchée par le produit de la matrice Jacobienne et de sa transposée (11), les ordres de convergence sont donnés par Kowalik et Osborne [7, Chap.IV, p72] : la convergence n'est quadratique que lorsque S est nulle en

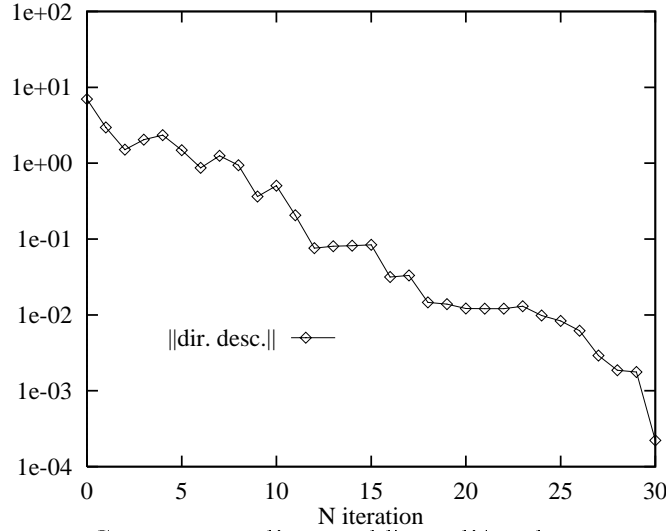


FIGURE 6. Convergence d'un problème d'écoulement en filière convergente à 45° . Evolution au cours des itérations de la norme de la direction de descente $\|\vec{\delta}\|$

son minimum (cas des écoulements de Poiseuille perturbé stables numériquement), elle est au mieux linéaire quand $S(\vec{x}^*)$ est différent de zéro (cas des écoulements en filières convergentes et des écoulements de Poiseuille instables numériquement). Ceci est synthétisé dans l'inégalité (23) suivante, [4]: si $\|\vec{h}^k\| = \|\vec{x}^k - \vec{x}^*\|$ où \vec{x}^k représente le vecteur des inconnues calculé à l'itération k et \vec{x}^* désigne la solution alors :

$$\|\vec{h}^{k+1}\| \leq \|(J^t \bullet J)^{-1}(\vec{x}^*) \bullet \left(\sum_{i=1}^m F_i \nabla^2 F_i(\vec{x}^*) \right) \|\|\vec{h}^k\| + O(\|\vec{h}^k\|^2) \quad (23)$$

Lorsque la matrice $\sum_{i=1}^m F_i \nabla^2 F_i(\vec{x}^*)$ est nulle, comme tel est le cas dès que $S(\vec{x}^*) = 0$, l'ordre de convergence est égal à deux.

Lorsque cette matrice est différente de zéro en \vec{x}^* , l'ordre de convergence est au mieux linéaire. Cet ordre de convergence est affecté par :

- le résidu à la solution : $S(\vec{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m F_i^2(\vec{x})$
- le degré de non-linéarité des équations : $\nabla^2 F_i(\vec{x}^*)$ avec $1 \leq i \leq m$.

5. CONCLUSION

Le problème de la résolution du système d'équations non-linéaires, résultant de la modélisation des équations gouvernantes, a été ramené à un problème d'optimisation sans contraintes. Pour résoudre ce dernier, nous avons utilisé une méthode de Région de Confiance et développé parmi les variantes possibles un algorithme rapide. L'ordre de convergence des calculs est conforme à ce que l'on est en droit d'attendre d'après les résultats de Kovalik et Osborne. L'avantage manifeste des méthodes de Région de Confiance réside dans leur propriété de convergence globale qui garantit la convergence vers un minimum local.

REFERENCES

- [1] Y. BERAUX, J. R. CLERMONT, A. YASSINE . *Numerical Simulation of Viscoelastic Complex Flows Using the Stream-Tube Method and Optimization Algorithms*. Communications in Applied Numerical Methods 11, (1995).
- [2] Y. BERAUX. *Simulation Numerique d'écoulements de fluides Viscoélastique 'a formulation intégrale, par la Méthode des Tubes de Courant*. Thèse de doctorat INPG (1996).
- [3] J. R. CLERMONT, M. E. DE LA LANDE, T. PHAM DINH , A. YASSINE. *Numerical Simulation of Axisymmetric Converging Flows Using the Stream Tube Method and a Trust Region Algorithm*. Eng. Opt. 19, pp. 187-208, (1992).
- [4] R. FLETCHER. *Practical Methods of Optimization*. Wiley (1987).
- [5] J. GUILLET, P. REVENU, Y. BERAUX, J. R. CLERMONT . *Experimental and Numerical Study of Entry Flow of Low-Density Polyethylene Melts*. Rheol. Acta 35. (1996).
- [6] M. D. HEBDEN. *An Algorithm for Minimization Using Exact Second Derivatives*. Atomic Energy Research Establishment report T. P. 515, Harwell, England (1973).
- [7] J. KOWALIK, M. R. OSBORNE. *Methods for Unconstrained Optimization Problems*. Elsevier (1968).
- [8] D. W. MARQUARDT. *An Algorithm for Least Squares Estimation of Non Linear Parameters*. SIAM J. Appl. Math. 11, pp. 431-441 (1963).
- [9] J. MORÉ *The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation theory*. Numerical Analysis. Proceedings of the Biennial Conference, Dundee 1977. Lecture Notes in Mathematics (630), Springer.
- [10] A. YASSINE. Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier, (1989).

†LABORATOIRE DE RHÉOLOGIE (UMR 5520) DOMAINE UNIVERSITAIRE BP 53 38041
 GRENOBLE CEDEX 9 FRANCE, ‡DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES UNIVERSITÉ DE
 NANCY I B.P.239 54506 VANDOEUVRE LES NANCY CEDEX, FRANCE