



ÉCOLE CENTRALE DES ARTS
ET MANUFACTURES
« ÉCOLE CENTRALE PARIS »

THÈSE
présentée par

Cédric ZACCARDI

pour l'obtention du

GRADE DE DOCTEUR

Spécialité : Sciences de l'ingénieur - Mécanique

Laboratoire d'accueil : MSSMat – UMR ECP /CNRS 8579

SUJET :

**Couplage stochastique-déterministe dans le cadre Arlequin
et estimations d'erreurs en quantités d'intérêt**

soutenue à Chatenay-Malabry le 21 janvier 2013 devant le jury composé de :

M. Serge PRUDHOMME, Ecole Polytechnique de Montréal, MAGI, Canada.....Rapporteur
M. Christophe DESCELIERS, Université Paris-Est, MSME.....Rapporteur
M. Karam SAB, Université Paris-Est, Navier.....Président du Jury
M. Laurent DI VALENTIN, PSA Peugeot Citroën.....Examineur
M. Hachmi BEN DHIA, Ecole Centrale Paris, MSSMat.....Directeur de thèse
M. Régis COTTEREAU, Ecole Centrale Paris, MSSMat.....Co-encadrant
M. Ludovic CHAMOIN, ENS de Cachan, LMT.....Co-encadrant

2013ECAP0008



**THÈSE DE DOCTORAT
DE L'ÉCOLE CENTRALE PARIS**

Présentée par

Cédric Zaccardi

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE CENTRALE PARIS

Domaine

Sciences de l'ingénieur - Mécanique

Sujet de la thèse

**Couplage stochastique-déterministe dans le cadre Arlequin et
estimations d'erreurs en quantités d'intérêt**

Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et Matériaux
UMR ECP/CNRS 8579

Soutenue à Châtenay-Malabry le 21 janvier 2013 devant le jury composé de :

Serge Prudhomme	École Polytechnique de Montréal, MAGI, Canada	Rapporteur
Christophe Desceliers	Université Paris-Est, MSME	Rapporteur
Karam Sab	Université Paris-Est, Navier	Président du jury
Laurent Di Valentin	PSA Peugeot Citroën	Examineur
Hachmi Ben Dhia	École Centrale Paris, MSSMat	Directeur de thèse
Régis Cottureau	École Centrale Paris, MSSMat	Co-encadrant
Ludovic Chamoin	École Normale Supérieure de Cachan, LMT	Co-encadrant

Remerciements

Quatre années d'ENS-ECP, trois années de doctorat, deux écoles, deux laboratoires, et des centaines de personnes rencontrées... Il me faudrait de nombreuses pages supplémentaires pour adresser un mot à chacun.

Je remercie tout d'abord mon directeur de thèse Hachmi Ben Dhia ainsi que mes deux encadrants Régis Cottreau et Ludovic Chamoin pour le sujet de doctorat qu'ils m'ont proposé.

Je souhaite également adresser mes remerciements sincères à l'ensemble du jury, particulièrement à MM. Serge Prudhomme et Christophe Desceliers pour avoir accepté la lourde tâche d'être rapporteurs de mes travaux dans des conditions particulières. Merci à M. Laurent Di Valentin d'avoir apporté une touche industrielle à ma soutenance et à M. Karam Sab d'avoir accepté le rôle de président du jury.

J'ai passé toutes ces années avec des amis, des enseignants devenus collègues, des collègues (ou galériens de thèses) qui ont pu/su m'apporter des idées, du soutien, des fous rires et une bonne humeur constante qui m'ont été indispensables pour traverser cette période plus que délicate. Je les remercie donc tous chaleureusement, des plus vieux :-), Frisou, Eric, Ludo, Fernando, Anne-Sophie, Denis A., Hugo, Quang-Ahn, Nadia, Amélie, Jessica, Joan, Yves, Loulou, Bibou, Flavien, Reno, Bastien (bien évidemment), Fabien, Floflo, Anita, Aude... aux plus jeunes (qui galèrent encore et à qui je souhaite bon courage) Erwan, Adrien, Omar, Luis, Vinicius, Shahram, Tatiana, Silvana, Ana... Je ne peux bien évidemment pas citer tout le monde, mais j'ai apprécié chaque rencontre et échange, que ce soit au sein de l'UJ2CP, pendant un pot, un apéro, ou aux bars du LMT et du MSSMat.

Enfin, car un doctorat n'implique pas que le doctorant (malheureusement pour l'entourage), je tiens à remercier plus que chaleureusement les personnes sans lesquelles ce doctorat aurait été bien plus qu'insupportable : ma famille et mes amis, Bastien (encore!), Constance, Claire, la Kinouille Team Tom, Benj, Ben, Greg, Kousto, Audrey, Pierre.

Summary

With the fast growth of computational performances, numerical simulations have provided an essential tool in engineering studies. Classical deterministic models are widely used and satisfactory for a large range of industrial applications. However, when one is interested in multiscale phenomena, local specific quantities, or local behaviors, these models are either too coarse or require too much information for the identification of their parameters. Stochastic methods have therefore been proposed. Furthermore, in many cases, local defects affect strongly the behavior of a structure in a localized region while the rest of the structure is only slightly modified. In these cases, it is neither reasonable nor tractable to model the structure entirely at a fine scale, and multiscale methods are thus appealing. Three major families can be distinguished in this domain : those based on homogenization techniques, those based on the Partition of Unity Method, and finally, those based on the superposition of fields or models. In this last family, the Arlequin Method proposes a multi-model method with volume coupling. This method is applied here in the case of a coupling between a deterministic continuum model and a stochastic one.

We consider a linear elasticity problem with a random fluctuating mechanical parameter. The exact solution of this problem is used to evaluate a local quantity of interest such as the space average over a given subdomain of the mathematical expectation of the solution or of a given component of its gradient. In practice, this problem is unsolvable. We propose a surrogate model using the Arlequin method which allows to couple the stochastic model (that describes efficiently the area of interest, so-called patch, for an accurate evaluation of the quantity of interest) with the remaining structure which is modeled as an homogeneous deterministic model. The coupling method is based on the following key points : (i) model superposition, (ii) volume coupling of the two models, (iii) distribution of the energy between the two models in the coupling zone.

To control the quality of the approximate solution obtained with such an approach, a goal-oriented method is introduced. Using residual-types estimates and adjoint-based techniques, a strategy for goal-oriented error estimation is presented for this coupling and contributions of various error sources (modeling, space discretization, and discretization along the random dimension) are assessed. In the case of a resolution using FEM and Monte-Carlo technique, the error can be split into a modeling error, a discretization error and a stochastic error. From information on error sources, an adaptive procedure provides for an effective coupling that guaranties a given error tolerance.

Finally, the described method is applied to study the infiltration of resin inside collagen network in the dentine.

Résumé

Avec l'évolution rapide des performances numériques, les simulations numériques sont devenues un outil indispensable dans le domaine de l'ingénierie. Les modèles déterministes, classiquement utilisés, sont en général suffisants pour décrire le comportement moyen d'une structure dans un grand nombre d'applications industrielles. Cependant, dès que l'on s'intéresse à des phénomènes multi-échelles, des quantités d'intérêts locales, ou face à des comportements locaux particuliers, ces modèles sont trop grossiers et demandent une identification importante et précise des paramètres utilisés. C'est pour répondre à cette problématique que les méthodes stochastiques ont été proposées. En outre, dans de nombreux cas, des altérations ou défauts locaux affectent localement le comportement de la structure, alors que le reste n'est que faiblement impacté. Il n'est alors pas raisonnable d'utiliser une échelle d'analyse fine sur l'ensemble de la structure étudiée. Les méthodes multi-échelles donnent alors un cadre pertinent pour résoudre ce genre de problème. Classiquement, ces méthodes sont regroupées en trois familles : les méthodes basées directement sur des techniques d'homogénéisation, les méthodes basées sur la méthode de Partition de l'Unité et les méthodes dites de superposition. Dans cette dernière famille, la méthode Arlequin propose une approche multi-modèles avec un couplage volumique entre les modèles. Cette méthode est utilisée dans ces travaux pour coupler un modèle déterministe continu avec un modèle stochastique continu.

Nous étudions un problème d'élasticité linéaire dont le comportement est piloté par un tenseur stochastique. La solution exacte du problème est utilisée pour évaluer un quantité d'intérêt locale spécifique comme par exemple la moyenne spatiale sur un domaine défini de l'espérance mathématique de la solution ou d'une composante de son gradient. En pratique, ce problème n'est pas solvable en un temps raisonnable. Nous proposons donc d'approcher ce problème en utilisant la méthode Arlequin qui permet de coupler un modèle fin stochastique (utilisé dans la zone d'influence de la quantité d'intérêt, appelé patch) avec le reste de la structure modélisée par un modèle déterministe équivalent. Les points clés de la méthode sont : (i) la superposition de modèle dans la zone de couplage, (ii) le couplage volumique des modèles, (iii) la distribution de l'énergie entre les modèles.

Pour contrôler la qualité de l'approximation obtenue par une telle approche, une méthode d'estimation d'erreur de type *Goal-Oriented* est proposée. En introduisant le résidu du problème de référence et un problème adjoint, une stratégie d'estimation de l'erreur pour l'évaluation d'une quantité d'intérêt par la méthode Arlequin est décrite. Nous étudions aussi les contributions des différentes sources de l'erreur à l'erreur totale (erreur de modèle, erreur de discrétisation, erreur stochastique) et nous proposons une technique pour estimer ces différentes erreurs et piloter un processus d'adaptation afin de contrôler l'erreur totale commise.

Finalement, la méthode décrite est utilisée pour l'étude de l'infiltration de résine médicale dans le cas du traitement de la carie.

Notations et abréviations

Calcul tensoriel et différentiel

Les tenseurs d'ordre 1 sont en gras (\mathbf{u}), les tenseurs d'ordre 2 et 3 en lettre doublée ($\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}, \dots$), les tenseurs d'ordre 4 sont notés avec des lettres capitales en gras (\mathbf{K}). Nous notons :

- $:$, le produit doublement contracté
- ∇u , le gradient de u
- $\nabla_s u$, la partie symétrique du gradient de u
- $\nabla \cdot u$, la divergence de u

Notations algébriques

Les matrices sont en lettres capitales ou entre crochets : A ou $[A]$. Nous notons, quand la matrice est définie :

- M^T , la transposée de la matrice M
- M^{-1} , l'inverse de la matrice M
- M^\dagger , la matrice pseudo-inverse (de Moore-Penrose) de la matrice M

Notations topologiques

Soient A et B des ouverts de \mathbb{R}^r où r est la dimension de l'espace considéré ($r \in \{1, 2, 3\}$). Nous notons :

- ∂A , la frontière de A
- $A \setminus B$, le complémentaire de B dans A
- $\text{mes}(A)$, la mesure d'un domaine A de \mathbb{R}^r

Espaces fonctionnels

Soient O un ouvert de \mathbb{R}^r ($r \in 1, 2, 3$), et X un espace de Banach. Nous notons :

- $\|\cdot\|_X$, la norme naturelle sur l'espace X
- $(\cdot, \cdot)_X$, le produit scalaire naturel sur l'espace de Hilbert X
- $\mathcal{C}^k(O)$, l'espace des fonctions k fois continûment différentiable sur O
- $\mathcal{L}^2(O, X)$, $\{u : O \rightarrow X, u \text{ mesurable sur } O \text{ et } \int_O \|u(x)\|_X^2 dX < \infty\}$
- $\mathcal{L}^2(O) \equiv \mathcal{L}^2(O, \mathbb{R})$: l'espace de Banach des champs dits à énergie finie (ou de carré intégrable) sur O , défini par :

$$\mathcal{L}^2(O) = \left\{ f, \int_O f^2 dO < \infty \right\}$$

de norme naturelle associée $\|f\|_{\mathcal{L}^2(O)} = \sqrt{\int_O f^2 dO}$.

- $\mathcal{H}^1(O)$: espace de Sobolev d'ordre 1, l'espace de Banach des fonctions de carré intégrable et dont le gradient est de carré intégrable sur O , défini par :

$$\mathcal{H}^1(O) = \left\{ f, \int_O f^2 dO < \infty \text{ et } \int_O (\nabla f)^2 dO < \infty \right\}$$

de norme naturelle associée $\|f\|_{\mathcal{H}^1(O)} = \sqrt{\int_O f^2 dO + \int_O (\nabla f)^2 dO}$

Notations sur les grandeurs stochastiques

Soit un espace probabilisé complet (Θ, \mathcal{T}, P) avec Θ un ensemble d'événements, \mathcal{T} une tribu associée à Θ , et $P : \mathcal{T} \rightarrow [0, 1]$ une mesure de probabilité. Nous notons :

- $u(x, \theta)$, un champ stochastique
- $E[u(x, \theta)]$, l'espérance mathématique de u définie par :

$$E[u] = \int_{\Theta} u(x, \theta) dP(u)$$

- $\text{Var}(u(x, \theta)) \equiv E[(u - E[u])^2]$, la variance de u

Abréviations

Nous utilisons les abréviations suivantes :

- p.p. : presque partout
- p.s. : presque sûrement
- MEF : Méthode des Éléments Finis
- PUM : Méthode de Partition de l'Unité
- VER : Volume Élémentaire Représentatif
- GFEM : Méthode des Éléments Finis Généralisés
- XFEM : Méthode des Éléments Finis Étendus
- MFEM : Méthode Éléments Finis Multi-Échelles
- HDPM : Méthode de Projection de Dirichlet Hiérarchique
- MEF-Sto : Méthode des Éléments Finis Stochastiques

Table des matières

Remerciements	i
Summary	iii
Résumé	v
Notations et abréviations	vii
1 Introduction	1
2 Méthodes Multi-Échelles et Estimation d’Erreur	7
2.1 Préambule	8
2.2 État de l’art sur les méthodes multi-échelles	10
2.2.1 Méthodes basées sur l’homogénéisation	10
2.2.2 Méthodes d’enrichissement	15
2.2.3 Méthodes de type sous-domaines	21
2.2.4 Méthode de superposition avec couplage volumique	22
2.3 Précisions sur la méthode Arlequin	24
2.3.1 Formulation Arlequin déterministe mixte	24
2.3.2 Stabilité des formulations continues et discrètes	25
2.3.3 Consistance du problème Arlequin	26
2.3.4 Bilan sur la méthode Arlequin	27
2.4 État de l’art sur les méthodes d’estimation d’erreur	27
2.4.1 Rappel du contexte d’étude	27
2.4.2 Estimation d’erreur globale	29
2.4.3 Estimation d’erreur locale : erreur en quantité d’intérêt	33
2.4.4 Concept d’erreur de modèle	36
3 Couplage stochastique par la méthode Arlequin	41
3.1 Problèmes stochastiques continu et discret	42
3.1.1 Rappel du problème stochastique continu	42
3.1.2 Existence et unicité de la solution	43
3.1.3 Approximation du problème de référence	43
3.1.4 Solvabilité pratique du modèle de référence	45
3.2 Spécificité du couplage stochastique	45
3.2.1 Formulation Arlequin du problème couplé	45
3.2.2 Opérateur et espace de couplage	47
3.2.3 Stabilité de la formulation continue	48
3.3 Approximation numérique du problème couplé	49
3.3.1 Discrétisation spatiale	49
3.3.2 Discrétisation stochastique par la méthode de Monte Carlo	51
3.3.3 Stabilité de la formulation discrète	52
3.4 Exemples simples d’utilisation	53
3.4.1 Problème 1D sans défaut	54

3.4.2	Problème 1D avec défaut	57
3.4.3	Problème 2D	59
3.5	Bilan sur le couplage par la méthode Arlequin	73
4	Estimation d'erreur sur des quantités d'intérêt dans le cadre Arlequin	75
4.1	Contexte d'étude	76
4.2	Estimation d'erreur pour le couplage proposé	77
4.2.1	Problème de référence	77
4.2.2	Problème approché primal	78
4.2.3	Problème adjoint (ou dual)	80
4.2.4	Estimation d'erreur	82
4.2.5	Évaluation du résidu \mathcal{R}	82
4.3	Convergence numérique de la méthode Arlequin	83
4.3.1	Ex A : erreur relative à l'estimation de q_∂	85
4.3.2	Ex B : erreur relative à l'estimation de q_v	87
4.3.3	Étude spécifique des paramètres MC et N_d	89
4.3.4	Conclusion générale sur l'influence des paramètres	91
4.4	Étude de l'approximation du modèle adjoint	92
4.4.1	Influence du paramètre L_s pour l'estimation de q_∂	92
4.4.2	Influence du paramètre MC pour l'estimation de q_∂	93
4.4.3	Influence du paramètre N_d pour l'estimation de q_∂	94
4.4.4	Conclusions générales sur l'approximation du modèle adjoint	95
4.5	Séparation des sources d'erreur et principe d'adaptation	96
4.5.1	Modèles intermédiaires et indicateurs d'erreur associés	97
4.5.2	Stratégie d'adaptation	98
4.6	Résultats d'adaptation	99
4.6.1	Exemple d'adaptation pour un modèle 1D	99
4.6.2	Exemple d'adaptation pour un modèle 2D	103
4.7	Bilan sur l'erreur <i>a posteriori</i> pour le couplage considéré	106
5	Stratégie de couplage en dentisterie restauratrice	109
5.1	Le traitement des caries en dentisterie restauratrice	111
5.2	L'adhésion à la dentine	112
5.3	Influence de la longueur de corrélation du milieu sur la vitesse d'infiltration	113
5.3.1	Présentation des modèles utilisés	113
5.3.2	Évolution de la vitesse en fonction de la longueur de corrélation	118
5.4	Étude d'un cas critique d'infiltration.	119
5.5	Coût numérique du processus d'estimation d'erreur	123
5.6	Bilan sur la stratégie de couplage et d'adaptation	124
6	Conclusions et Perspectives	125
6.1	Résumé et apports des travaux	125
6.2	Perspectives	126
6.3	Communications sur les travaux	128
	Bibliographie	129
	Table des figures	141

Liste des tableaux	143
A Papier de référence : CMAME 2011	145
B Papier de référence : IJNME 2012	175

Introduction

Enjeux de la simulation numérique dans un cadre stochastique

Dans le milieu de l'ingénierie mécanique, la simulation numérique est de plus en plus présente dans le processus de conception des systèmes et d'autant plus présente que ces systèmes sont complexes. Elle permet de réduire les coûts associés au développement, en limitant les essais réels toujours très coûteux (dans le domaine des transports et du génie civile par exemple, *c.f.* figure 2.2). En outre, les essais réels sont rarement réalisés dans l'environnement de fonctionnement du système étudié, mais dans une représentation de cet environnement. La simulation numérique permet de pallier cette limitation en modélisant virtuellement ces systèmes et en simulant numériquement leur comportement. Des modèles mathématiques complexes sont développés pour représenter ces comportements dans des environnements de fonctionnement. Ces modèles sont approchés et calculés numériquement. Cependant, les résultats obtenus sont issus de modèles dégradés approchant la réalité physique des systèmes étudiés. Il est alors primordial de quantifier la qualité de la solution en contrôlant la qualité des modèles approchés utilisés.



FIGURE 1.1 – Exemple de structures à plusieurs échelles d'analyse.

Par exemple, l'utilisation d'essais numériques pour la simulation du comportement de matériaux composites est particulièrement importante et délicate. Ces matériaux présentent en effet une structuration microscopique complexe : artificielle (béton, composite aéronautique, céramique..) ou naturelle (bois, sol, milieux granulaires, os, peau, dent...). L'étude de ces matériaux pour leur tenue mécanique repose généralement sur des critères dimensionnants souvent locaux. Ces quantités locales d'intérêt doivent être évaluées correctement, forçant une représentation à une échelle très fine du comportement local des systèmes. Les problématiques majeures liées à ce contexte concernent :

- *Les différentes échelles en jeu* : Les propriétés matériaux peuvent exhiber deux variations types à des échelles différentes. Les variations rapides ne peuvent pas être négligées car elles influent fortement le comportement local, mais aussi le comportement à des distances plus grandes suivant le problème étudié.

- *Nature statistique de la connaissance des propriétés locales* : Une connaissance fine des propriétés matériaux est nécessaire mais très rarement disponible. Il est en effet impossible de qualifier et quantifier expérimentalement à une échelle fine l'ensemble des composants de la structure. En pratique, nous n'avons accès qu'à un faible nombre de caractéristiques statistiques sur les propriétés (module d'Young moyen, taille moyenne d'hétérogénéités, distribution spatiale des hétérogénéités...). Dès lors, la description de la microstructure peut être modélisée par un champ statistique vérifiant ces caractéristiques statistiques.
- *Incertitudes sur le système* : Les autres sources d'incertitudes sont nombreuses lors de la simulation d'une structure. Nous pouvons notamment prendre en compte l'aléa sur le chargement (naturel : vent, séisme ou systémique : encastrement, application d'effort...), l'aléa sur les liaisons avec d'autres solides ou encore l'aléa sur la géométrie de la structure.

Dès lors, des méthodes de simulation utilisant une description statistique de la géométrie et du comportement doivent être envisagées. Or, pour garantir une résolution avec une précision correcte en un temps raisonnable (quelques jours dans le domaine automobile par exemple), il n'est pas raisonnable de décrire entièrement ces systèmes complexes aux fines échelles. On fait plutôt appel à des méthodes de résolution multi-échelles qui se sont particulièrement développées durant les deux dernières dizaines d'années.

Par ailleurs, quels que soient les modèles qu'elle utilise, la simulation numérique reste une représentation de la réalité. Elle fait appel à des modèles approchés et à une résolution approximative de ces modèles, introduisant une erreur dans la réponse. L'ingénieur cherche à quantifier, évaluer et représenter l'état mécanique du système étudié, lorsque celui-ci est soumis à des sollicitations parfois complexes. Plus précisément, dans le cadre du processus de conception d'un système, l'ingénieur s'intéresse à des quantités d'intérêt en vue du dimensionnement des structures. De ce fait, il devient nécessaire de pouvoir estimer la qualité de la solution approchée pour aboutir à ce dimensionnement en ayant recours aux méthodes d'estimation et de contrôle de l'erreur. La difficulté de ces méthodes d'estimation d'erreur est liée au fait que la solution exacte du problème n'est pas connue *a priori*. Nous ne savons même pas si un problème de référence (dans le sens où il reproduirait exactement le comportement réel) existe vraiment. Mais, depuis les années 70, des méthodes d'estimation d'erreur permettent de garantir une qualité globale de la solution obtenue. Plus récemment, des méthodes plus avancées permettent de contrôler l'erreur commise sur des quantités d'intérêt spécifiques, utilisées comme critères de dimensionnement.

Ainsi, l'analyse pertinente et efficace des systèmes mécaniques complexes requiert une conjugaison d'approches multi-échelles et de méthodes intégrant les aléas sur les différents paramètres de ces systèmes. Ces travaux de doctorat s'inscrivent dans une contribution à cette conjugaison. Nous proposons une méthode permettant d'approcher un problème stochastique par un problème couplant un modèle stochastique, utilisé dans une zone englobant celle d'intérêt, avec un modèle déterministe équivalent sur le restant de la structure. Afin de contrôler l'approximation proposée, nous mettons en place des outils d'estimation d'erreur. Nous définissons l'erreur de modèle, l'erreur de discrétisation et l'erreur stochastique et nous proposons une méthodologie pour l'estimation de ces différentes sources d'erreur.

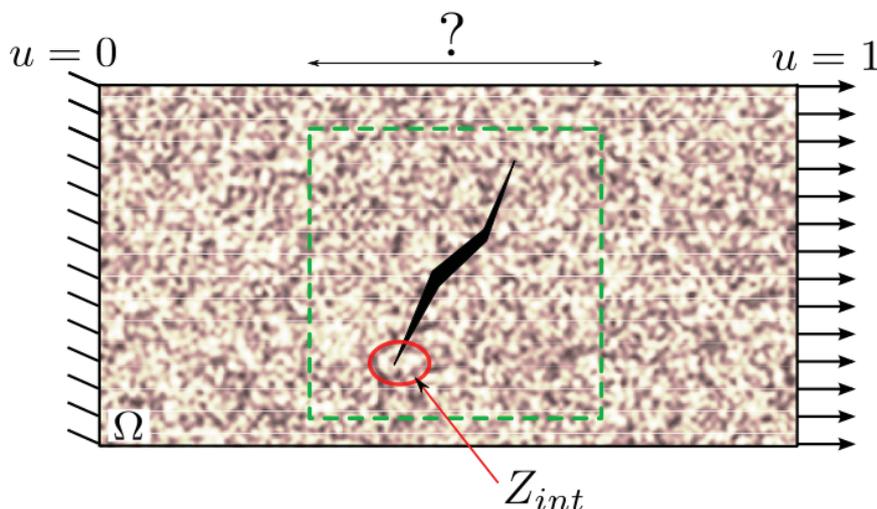


FIGURE 1.2 – Structure hétérogène fissurée type en traction. Une description fine est nécessaire autour de la fissure pour évaluer des grandeurs caractéristiques dans la zone d'intérêt Z_{int} .

Cadre du travail

Plus précisément, nous nous intéressons dans ce manuscrit à l'étude d'une structure hétérogène comme celle représentée sur la figure 1.2. Pour cette structure modèle, nous évaluons une quantité d'intérêt spécifique localisée dans une zone d'intérêt Z_{int} (typiquement une quantité locale proche d'un fond de fissure, dérivant du déplacement). Cette quantité peut être par exemple une contrainte équivalente moyenne, un déplacement maximal ou encore une énergie locale. Nous cherchons de plus à garantir la qualité de l'estimation de cette quantité en utilisant des outils d'estimation d'erreur dédiés.

De par la nature hétérogène du matériau, nous nous plaçons dans le cas où le déplacement solution peut dépendre fortement des fluctuations des propriétés du matériau constituant la structure considérée. Il présente des variations lentes et des variations rapides qui sont liées. Dès lors, dans la zone d'intérêt et proche de la fissure, il est nécessaire de garder tout le spectre de fluctuations des propriétés pour obtenir une approximation pertinente du déplacement. En dehors de la zone d'intérêt, nous supposons qu'une description "moyennée" du milieu est suffisante pour rendre compte de l'effet du reste de la structure sur la quantité cherchée. Afin de limiter le coût lié au calcul ou à une paramétrisation complexe, des méthodes spécifiques d'approximation doivent être utilisées. Les méthodes dites multi-échelles donnent un éventail d'outils permettant un traitement efficace de ce genre de problème.

Nous utilisons dans ce document le cadre de modélisation Arlequin, introduit par Ben Dhia [Ben Dhia, 1998, Ben Dhia, 1999] adapté au cas d'un couplage d'un modèle déterministe avec un modèle stochastique, initié dans [Cottureau *et al.*, 2010]. La structure est modélisée par un modèle déterministe équivalent, appelé substrat sur lequel nous superposons, dans une zone d'intérêt, un modèle stochastique (appelé patch), englobant la zone d'intérêt Z_{int} , permettant ainsi une description fine du comportement local. Ce modèle permet, moyennant des adaptations éventuelles, l'évaluation de la quantité d'intérêt recherchée.

Nous cherchons ainsi à contrôler la qualité de la solution obtenue par la méthode Arlequin. Nous proposons une technique d'estimation d'erreur du type *Goal-Oriented* afin de maîtriser l'erreur commise sur l'évaluation de la quantité d'intérêt. L'erreur totale est alors estimée grâce à la solution du modèle Arlequin, la solution d'un problème dit adjoint et d'une approximation du résidu associé au problème de référence. La construction du modèle Arlequin, utilisé pour la résolution, à partir du mono-modèle de référence, se fait par étapes. Chaque étape introduit une erreur contribuant à l'erreur totale. Nous distinguons l'erreur de modèle, liée à l'utilisation d'un modèle couplé, l'erreur de discrétisation, liée à la discrétisation spatiale de la structure et l'erreur stochastique, liée au traitement de la dimension aléatoire. Chacune de ces étapes est conduite par les paramètres de la méthode Arlequin. Nous proposons alors une stratégie pour séparer les différentes sources de l'erreur et identifier les erreurs dominantes. Les paramètres correspondant sont ensuite raffinés afin d'atteindre une précision donnée.

Composition du document

Le manuscrit est composé de la présente introduction et de quatre chapitres (numérotés de 2 à 5).

- Le chapitre 2 donne un état de l'art non exhaustif sur les méthodes multi-échelles et sur les méthodes d'estimation d'erreur. Le chapitre a deux objectifs. Le premier est de positionner la méthode Arlequin au sein des autres méthodes de couplage multi-échelles, particulièrement parmi les rares méthodes stochastiques associées. Le second objectif est de balayer les outils d'estimation d'erreur globale et d'erreur sur l'évaluation d'une quantité d'intérêt.
- Le chapitre 3 regroupe et développe les outils liés à l'utilisation de la méthode Arlequin dans le cas du couplage déterministe-stochastique. Nous y traitons entre autre la formulation du problème continu couplé, la discrétisation du problème et les particularités liées à la dimension stochastique. En fin de chapitre, des premiers exemples permettent d'illustrer la méthode développée en dehors du cadre d'estimation d'erreur présentée dans la suite.
- Le chapitre 4 est consacré à la mise en place d'estimateurs d'erreurs de type *Goal-Oriented*. Nous proposons une technique d'estimation d'erreur totale en utilisant un modèle adjoint associé à la quantité d'intérêt. Une série de premiers exemples mono-dimensionnels permet d'illustrer la technique d'estimation d'erreur décrite. Dans la seconde partie du chapitre, une technique de séparation des sources d'erreur est mise en place. Elle permet de définir les erreurs de modèle, de discrétisation et stochastique. En outre, elle permet d'identifier les sources dominantes de l'erreur. Cette technique est utilisée dans le cadre d'adaptation de modèles 1D et 2D.
- Enfin, le chapitre 5 reprend l'ensemble de la démarche pour une étude d'un matériau naturel qu'est la dentine dans le cadre de dentisterie restauratrice. Lors du traitement d'une carie, en remplacement du traditionnel plombage, le chirurgien applique une résine composite dont l'adhésion avec le reste de la dent se fait par micro-infiltration. Nous étudions alors cette adhésion en modélisant le problème d'infiltration par un écoulement monophasique dans un milieu poreux dont les caractéristiques (perméabilité et viscosité) sont modélisées par des champs stochastiques.

Les contributions importantes de ce doctorat concernent trois points principaux :

1. l'extension du couplage de modèles dans le cadre Arlequin au cas d'un couplage entre un modèle déterministe et un modèle stochastique,
2. le contrôle de ce couplage en séparant les différentes sources de l'erreur (de modèle, de discrétisation et stochastique) et en estimant ces erreurs à l'aide d'un problème adjoint approché,
3. l'illustration numérique de notre démarche dans des cas modèles, mais représentatifs.

Méthodes Multi-Échelles et Estimation d'Erreur

Ces travaux de doctorat agrègent trois aspects numériques à savoir l'aspect multi-échelles, celui stochastique et enfin celui d'estimation et contrôle de l'erreur.

Ce chapitre est dédié à des éléments non exhaustifs de bibliographie autour de ces aspects. Nous dressons tout d'abord un état de l'art des travaux portant sur les méthodes multi-échelles, ainsi que des extensions aux problèmes stochastiques. Les méthodes multi-échelles permettent de prendre en compte l'échelle fine sans avoir à effectuer directement le calcul à un niveau d'analyse fin sur l'ensemble de la structure.

Dans un deuxième temps, nous balayons une partie des outils dédiés à l'estimation et le contrôle de l'erreur. Pour l'étude d'un problème complexe, des approximations sont utilisées. Le degré d'approximation doit être évalué afin de contrôler la précision de la solution obtenue. Nous nous intéressons plus particulièrement aux méthodes d'estimation d'erreur de discrétisation, dans le contexte de la Méthode des Éléments Finis, puis des erreurs dites de modèle. Les erreurs induites par l'approximation de la géométrie ou par l'approximation du chargement ou des conditions aux limites ne sont pas considérées.

Sommaire

2.1	Préambule	8
2.2	État de l'art sur les méthodes multi-échelles	10
2.2.1	Méthodes basées sur l'homogénéisation	10
2.2.2	Méthodes d'enrichissement	15
2.2.3	Méthodes de type sous-domaines	21
2.2.4	Méthode de superposition avec couplage volumique	22
2.3	Précisions sur la méthode Arlequin	24
2.3.1	Formulation Arlequin déterministe mixte	24
2.3.2	Stabilité des formulations continues et discrètes	25
2.3.3	Consistance du problème Arlequin	26
2.3.4	Bilan sur la méthode Arlequin	27
2.4	État de l'art sur les méthodes d'estimation d'erreur	27
2.4.1	Rappel du contexte d'étude	27
2.4.2	Estimation d'erreur globale	29
2.4.3	Estimation d'erreur locale : erreur en quantité d'intérêt	33
2.4.4	Concept d'erreur de modèle	36

2.1 Préambule

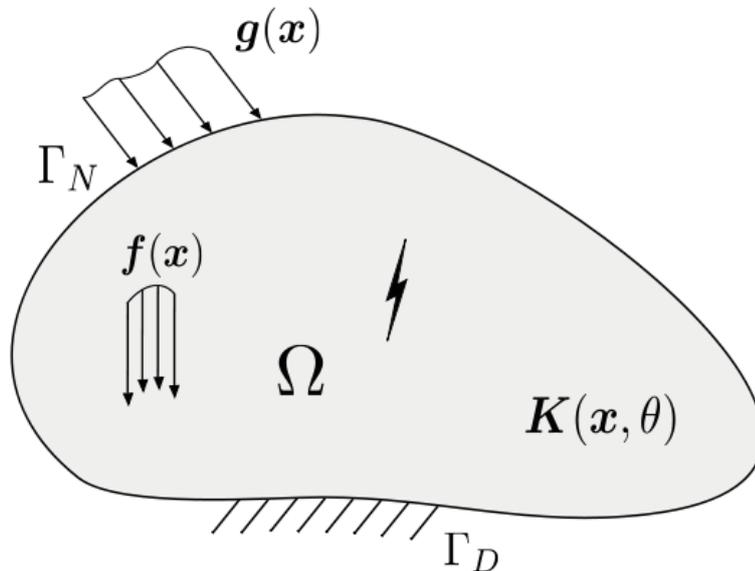


FIGURE 2.1 – Schématisation du problème type étudié.

Dans ce chapitre, les notations concernent le problème générique décrit par la figure 2.1. Il s'agit d'une structure mécanique qui occupe un domaine Ω de \mathbb{R}^r , à frontière régulière $\partial\Omega$ décomposée en une frontière de Dirichlet Γ_D et de Neumann Γ_N , avec $\overline{\Gamma_D} \cup \overline{\Gamma_N} = \partial\Omega$, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ et $\text{mes}(\Gamma_D) > 0$. La structure est soumise à un chargement volumique $\mathbf{f} \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^r$, à un déplacement imposé $\mathbf{u}_D \in (\mathcal{L}^2(\Gamma_D))^r$ sur Γ_D ainsi qu'à un chargement surfacique $\mathbf{g} \in (\mathcal{L}^2(\Gamma_N))^r$ sur Γ_N . En considérant un espace probabilisé complet (Θ, \mathcal{T}, P) avec Θ un ensemble d'événements, \mathcal{T} une tribu associée à Θ , et $P : \mathcal{T} \rightarrow [0, 1]$ une mesure de probabilité, nous supposons que le comportement du matériau constituant la structure est décrit par un tenseur $\mathbf{K}(\cdot, \theta)$, défini sur Ω et que la structure modèle considérée est régie par le problème suivant :

Trouver \mathbf{u} tel que :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta)) + \mathbf{f}(\mathbf{x}) &= 0, \\ \text{presque partout (p.p.) et presque sûrement (p.s.)} \end{aligned}$$

où $\nabla_s \mathbf{u}$ désigne la partie symétrique du tenseur $\nabla \mathbf{u}$ (ou encore la déformation linéarisée) :

$$\nabla_s \mathbf{u} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})$$

Le champ \mathbf{u} recherché vérifie les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{u}_D, & \text{p.p. sur } \Gamma_D \text{ et p.s.} \\ \mathbf{K} \nabla_s \mathbf{u} \mathbf{n} = \mathbf{g} & \text{p.p. sur } \Gamma_N \text{ et p.s.} \end{cases}$$

où \mathbf{n} désigne le vecteur unitaire normal à l'interface Γ_N , extérieur à Ω . Le tenseur de contrainte σ associé, est relié à la déformation par :

$$\sigma = \mathbf{K} \nabla_s \mathbf{u}$$

En définissant les espaces fonctionnels des déplacements admissibles

$$\mathcal{W} = \{ \mathbf{v} \in (\mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega)))^r \mid \mathbf{v} = \mathbf{u}_D \text{ p.p. sur } \Gamma_D \text{ et p.s.} \}$$

et admissibles à zéro

$$\mathcal{W}^0 = \{ \mathbf{v} \in (\mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega)))^r \mid \mathbf{v} = 0 \text{ p.p. sur } \Gamma_D \text{ et p.s.} \} \quad (2.1)$$

la formulation faible en déplacement associée à ce problème s'écrit :

Trouver $\mathbf{u} \in \mathcal{W}$ tel que :

$$A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = L(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}^0 \quad (2.2)$$

où les travaux des efforts extérieurs et intérieurs sont respectivement donnés par :

$$A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} \mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta) : \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Omega \right] \quad (2.3)$$

et

$$L(\mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Omega \right] + \int_{\Gamma_N} \mathbf{g}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Gamma \quad (2.4)$$

L'opérateur de comportement $\mathbf{K}(\cdot, \theta)$ est un tenseur linéaire d'ordre 4 à coefficients stochastiques. On suppose que $\mathbf{K}_{ijkl} \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{C}^0(\Omega))$. On suppose aussi que cet opérateur \mathbf{K} vérifie des conditions de symétries :

$$\mathbf{K}_{ijkl} = \mathbf{K}_{jikl} = \mathbf{K}_{ijlk} = \mathbf{K}_{klij}, \quad \forall 1 \leq i, j, k, l \leq 3$$

et la condition de coercivité qui suit :

$$\begin{cases} \forall \mathbf{u} \in \mathcal{W}, & \nabla_s \mathbf{u} : \mathbf{K} \nabla_s \mathbf{u} \geq 0, \text{ p.s.} \\ \nabla_s \mathbf{u} : \mathbf{K} \nabla_s \mathbf{u} = 0 \Rightarrow \nabla_s \mathbf{u} = 0, \text{ p.s.} \end{cases}$$

Les conditions de symétries réduisent le nombre de composantes indépendantes dans \mathbf{K} à 21 (en 3D). A l'image de [Babuška *et al.*, 2004], nous supposons que $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)$ vérifie qu'il existe $K_{min}, K_{max} \in]0, +\infty[$, tels que :

$$0 < K_{min} \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon} \leq \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{K} \boldsymbol{\varepsilon} \leq K_{max} \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon} < +\infty, \text{ p.p. et p.s.}$$

pour tout tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}$ symétrique d'ordre 2 non nul.

En plus de l'usage d'une méthode de type Éléments Finis, la résolution des problèmes stochastiques comme celui-ci fait appel à des techniques particulières (*c.f. e.g.* [Gardiner, 1983, Lin, 1967, Ghanem et Spanos, 2003]) : méthodes spectrales, méthode de collocation, méthode de perturbations, développement de Neumann, technique de Monte Carlo [Hammersley et Handscomb, 1975], décomposition spectrale généralisée [Nouy, 2009]... Bien que les problèmes Arlequin (auxquels nous aboutirons par usage du cadre de modélisation Arlequin pour coupler un modèle stochastique et un modèle déterministe) peuvent être résolus en utilisant toutes ces méthodes, nous ne donnerons dans la suite, que des indications sur la résolution de ces problèmes par la méthode spectrale et la méthode de Monte Carlo. Nous nous contenterons d'utiliser la méthode de Monte Carlo dans les applications numériques de ces travaux de doctorat.

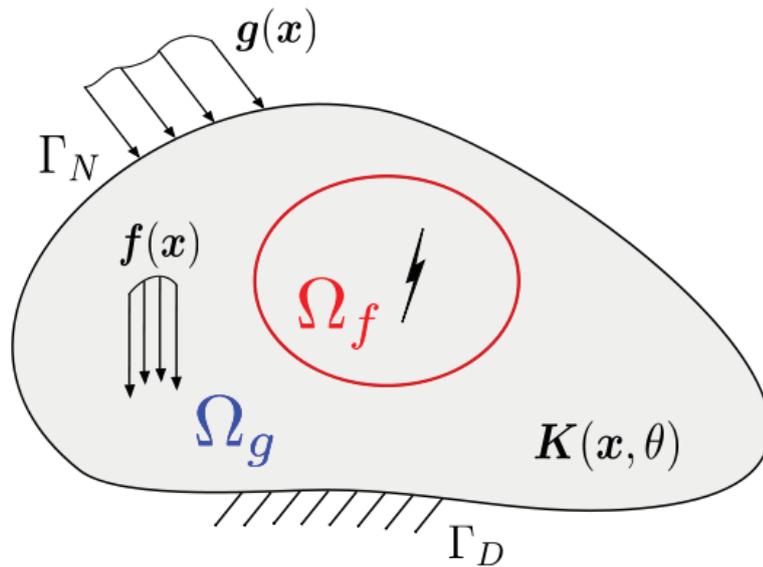


FIGURE 2.2 – Modélisation multi-échelles du problème.

En revanche, comme énoncé dans l'introduction, nous chercherons à évaluer efficacement une quantité d'intérêt locale située dans une zone critique Ω_f (voir figure 2.2).

Nous proposons, dans une première partie de ce chapitre, une revue non exhaustive d'approches multi-échelles, d'abord dans un cas déterministe puis, lorsque que cela se pose, dans un cas stochastique. Ces méthodes permettent d'approcher les fluctuations lentes u_g dans Ω_g et rapides u_f dans Ω_f de la solution. Nous balayerons des méthodes d'homogénéisation, d'enrichissements locaux d'espaces d'approximation, de sous-domaines et enfin de superposition et partition de modèles.

Dans une deuxième partie de ce chapitre, nous nous intéressons aux outils de contrôle de la qualité d'une solution approchée. Le but est de décrire un éventail des méthodes d'estimation utilisées. Nous décrivons tout d'abord les outils liés à l'estimation d'une erreur dite globale qui donnent une idée sur la qualité de la solution globale. Nous distinguons l'estimation d'erreur globale *a priori*, qui permet d'avoir une idée du taux de convergence de la solution, de l'estimation d'erreur globale dite *a posteriori*, qui permet d'obtenir une estimation de l'erreur en utilisant directement la solution approchée. Enfin, nous nous intéressons au contrôle de la qualité de la solution lorsque nous cherchons à évaluer une quantité d'intérêt spécifique. Nous détaillons les méthodes dites *Goal-Oriented*, basées sur l'utilisation d'un problème adjoint. Une attention particulière est portée à la notion d'erreur de modèle. En effet, la méthode Arlequin utilisée dans ces travaux nécessite un paramétrage pertinent pour l'évaluation de quantités d'intérêt spécifique.

2.2 État de l'art sur les méthodes multi-échelles

2.2.1 Méthodes basées sur l'homogénéisation

Introduites par Eshelby [Eshelby, 1957] et Hashin [Hashin, 1962], les méthodes d'homogénéisation sont utilisées pour obtenir un modèle macroscopique dans lequel les détails de la structure ne sont pas directement modélisés, mais obtenus préalablement à partir

d'une description microscopique de la structure. Le couplage entre l'échelle fine (microscopique) et l'échelle supérieure (macroscopique) n'est que faiblement pris en compte. Le problème n'est pas résolu sur les deux échelles en même temps. Les quantités locales (microscopiques) sont calculées par équilibre d'une cellule V , appelée Volume Élémentaire Représentatif (VER), soumise à un chargement spécifique et dans laquelle les caractéristiques microscopiques de la structure sont modélisées. Ce VER permet l'obtention d'un comportement macroscopique après homogénéisation spatiale.

Cette méthode est d'autant plus pertinente que le VER est bien défini. Cependant, cette définition n'est pas toujours simple. En effet, elle doit respecter les contraintes suivantes :

- le VER doit être suffisamment grand pour représenter statistiquement les hétérogénéités locales,
- le VER doit être suffisamment petit pour négliger les petites variations autour de la solution moyenne et pour considérer le modèle macroscopique comme homogène.

La deuxième contrainte est particulièrement délicate à respecter dans des zones où le gradient du déplacement présente des fluctuations rapides comme c'est le cas proche de bords libres de la structure, ou proche de singularités comme des fissures, coin...

En pratique, si l'on considère une structure hétérogène (représentée par la figure 2.3) dans laquelle la description du matériau est connue et où :

- la taille caractéristique des hétérogénéités est notée d ,
- la taille caractéristique de la structure étudiée est notée L ,
- la taille du VER est notée l .

Alors, les conditions précédentes peuvent s'écrire :

$$d \ll l \ll L$$

Dans le cas de la dentine par exemple [Bar-On et Daniel Wagner, 2012] (exemple que nous étudierons au chapitre 5), la taille moyenne des hétérogénéités (d), constituées par des fibres de collagène est de l'ordre du nanomètre, la taille du VER (l) est de l'ordre du micromètre (fortement dépendant de la quantité d'intérêt étudiée) pour une structure macro (zone de dent cariée) dont la taille est de l'ordre du millimètre (L).

Approche asymptotique

Dans le cas particulier d'un milieu périodique, une approche légèrement différente peut être utilisée. On suppose que le milieu est obtenu par répétition du VER. La théorie se base sur une décomposition asymptotique de la solution à l'ordre 1 permettant la définition de deux problèmes, l'un défini à l'échelle macroscopique, et l'autre à l'échelle microscopique sur une maille par exemple.

D'abord proposée par Sanchez-Palencia [Sanchez-Palencia, 1974] et Bensoussan [Bensoussan *et al.*, 1978], l'idée est d'introduire un double système de variables. La variable \mathbf{x} , définie sur l'ensemble de la structure, caractérise les variations lentes du champ macroscopique, tandis que la variable $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\gamma$, indépendante de \mathbf{x} , relative à la périodicité du champ, permet la représentation des oscillations rapides, avec γ représentant le ratio d'échelles entre la taille du VER et la taille du domaine considéré.

En considérant le ratio γ suffisamment petit, l'approche consiste à développer asymptotiquement le champ de déplacement par rapport à ce ratio. En tout point \mathbf{M} de la structure, le déplacement $\mathbf{u}(\mathbf{M})$ est cherché comme une fonction des variables \mathbf{x} et \mathbf{y} :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \gamma \mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + o(\gamma)$$

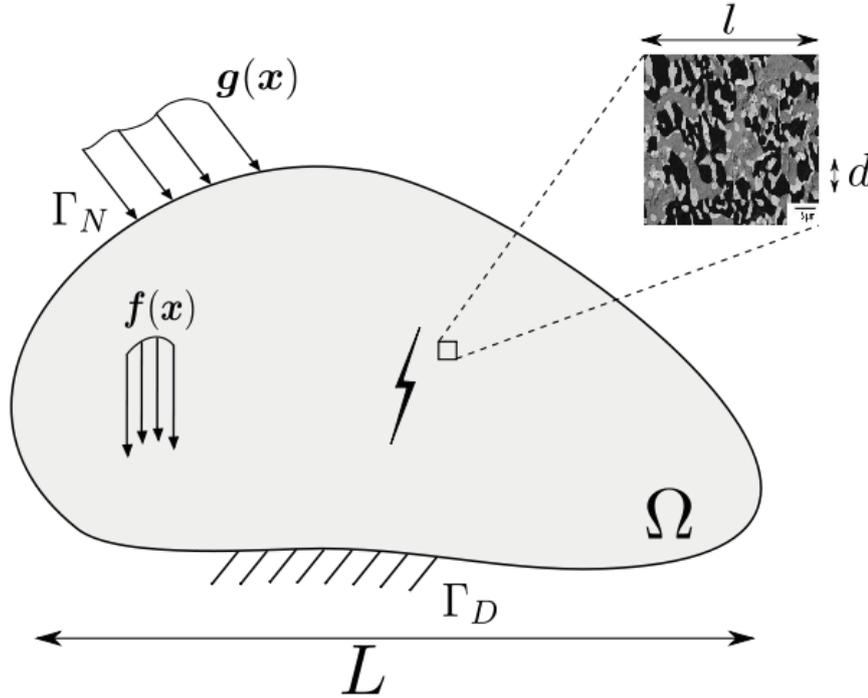


FIGURE 2.3 – Milieu hétérogène et VER.

Cette approche est d'autant plus pertinente que le ratio γ est petit, autrement dit, que les échelles sont bien séparées. Les équations d'équilibre sont alors écrites en fonction de cette expression et les différentes puissances de γ sont identifiées. Tronqués au première ordre, les problèmes macroscopique et microscopique correspondent aux différents termes lié aux puissances de γ (0 et 1, respectivement).

La résolution de ces problèmes permet la construction du champ macroscopique $\mathbf{u}_g \equiv \mathbf{u}^0$ et du champ microscopique $\mathbf{u}_f \equiv \gamma \mathbf{u}^1$. En élasticité linéaire, à l'ordre 0, nous pouvons montrer que \mathbf{u}_g ne dépend que de la variable macroscopique \mathbf{x} [Sanchez-Palencia, 1980].

Le problème à l'ordre 1 est défini sur le VER à \mathbf{x} fixé et à déformation $\varepsilon_g = \varepsilon(\mathbf{u}_g(\mathbf{x}))$ imposée et uniforme. Cela revient alors à chercher une solution périodique microscopique pour chacune des déformations macroscopiques.

\mathbf{u}_f peut ainsi se réécrire :

$$\mathbf{u}_f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = c(\mathbf{y}) : \varepsilon(\mathbf{u}_g)(\mathbf{x})$$

où $c(\mathbf{y})$ est une fonction a périodique déterminée à partir de la résolution du problème local défini sur le VER avec des conditions aux limites périodiques [Sanchez-Palencia, 1980].

Les hypothèses de forte séparation d'échelles et de périodicité sont importantes. En particulier, l'approche asymptotique ne peut être rigoureusement valable que dans des domaines non-bornés. Proche des bords de la structure et des singularités, elle n'est donc plus valable telle quelle. Le problème d'homogénéisation doit être réécrit, en tenant compte des bords. Dans le cadre de notre travail, l'étude de structure microscopique aléatoire est plus délicate car la structure ne peut plus être considérée comme périodique au sens strict.

Homogénéisation des milieux aléatoires

Dans le cadre stochastique, des approches d'homogénéisation sont aussi possibles. En déterministe, le VER doit contenir tous les types d'hétérogénéités présentes dans la structure. La définition du VER doit cependant être repensée comme un Volume Élémentaire *Statistiquement Représentatif* [Jeulin et Ostoja-Starzewski, 2002, Kanit *et al.*, 2003, Jeulin, 2005]. La taille du VER dépend de la variabilité aléatoire seuil que l'on s'autorise pour considérer le milieu comme homogène. Le comportement homogénéisé est alors obtenu en moyennant spatialement le champ de contrainte, de déformation ou l'énergie dans un grand VER et en utilisant un grand nombre de réalisations du milieu (la moyenne se fait en espace mais aussi suivant la dimension stochastique). Cependant, le comportement peut aussi être évalué en utilisant un grand VER et un faible nombre de réalisations, ou en utilisant une taille de VER plus faible et un plus grand nombre de réalisations. Il est alors possible de déterminer a posteriori le nombre minimal de réalisations nécessaire pour un volume donné de VER pour l'estimation du comportement homogénéisé avec une certaine précision. La réponse moyenne de la structure pouvant par la suite être évaluée en utilisant ce comportement.

L'approche asymptotique pour l'homogénéisation de milieux périodiques a été aussi étendu au cas de milieu aléatoire. En utilisant les deux échelles \mathbf{x} et $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\gamma$, le problème étudié est vu comme une petite perturbation aléatoire (représentée par la fonction ϕ) d'un problème déterministe scalaire périodique [Blanc *et al.*, 2007, Costaouec *et al.*, 2010] :

$$-\nabla \cdot (K(\phi^{-1}(\mathbf{y}, \theta)) \nabla u(\mathbf{x}, \theta)) = f, \text{ p.p. dans } \Omega \text{ et p.s.} \quad (2.5)$$

avec $u = 0$ p.p. sur $\partial\Omega$ et p.s., où K est une matrice périodique et où, presque sûrement, ϕ est un difféomorphisme donné de \mathbb{R}^r dans \mathbb{R}^r , dont le gradient vérifie des hypothèses de stationnarité : $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{Z}^r, \nabla \phi(\mathbf{y} + \mathbf{z}, \theta) = \nabla \phi(\mathbf{y}, \tau_{\mathbf{z}}\theta)$, où $\tau_{\mathbf{z}}$ est une action ergodique du groupe $(\mathbb{Z}^r, +)$ sur Θ qui préserve la mesure de probabilité P . Une interprétation possible de (2.5) est que ϕ transforme une structure de référence périodique, en une structure aléatoire stationnaire. Il est alors possible de montrer qu'un problème homogénéisé peut être formulé, avec une matrice homogénéisée K^* qui peut être évaluée. En considérant ϕ comme une perturbation de l'identité, et procédant à la même séparation d'échelles que précédemment lorsque γ est très petit, nous pouvons écrire $\phi(\mathbf{x}, \theta) = \mathbf{x} + \gamma\psi(\mathbf{x}, \theta) + o(\gamma)$ et $u(\mathbf{x}, \theta) = \mathbf{u}^0(\mathbf{x}, \theta) + \gamma\mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \theta) + o(\gamma)$. La matrice homogénéisée K^* est alors approchée par :

$$K^* = K^0 + \gamma K^1 + o(\gamma)$$

où K^0 et K^1 sont estimées à partir des solutions de deux problèmes correcteurs périodiques et déterministes.

Éléments Finis multi-niveaux basés ou homogénéisation numérique

La méthode FE² a été introduite par Feyel [Feyel, 1999, Feyel et Chaboche, 2000] pour simuler le comportement mécanique de composites considérés comme des milieux périodiques. Le comportement complexe non-linéaire de ce genre de structure influence fortement la réponse macroscopique du matériau. Dès lors la distribution des contraintes doit être connue localement de manière fine. Les non-linéarités présentes induisent une relation de comportement locale qui évolue en fonction de l'histoire du chargement. Le comportement du VER utilisé dans l'homogénéisation doit alors systématiquement être mis à jour lors des

itérations du calcul. Confrontés à ce problème, les auteurs cités ci-dessus ont développé une technique permettant d'effectuer, en plus des calculs à l'échelle macroscopique, des calculs locaux sur des cellules chargées par la déformation macroscopique et qui fournissent un comportement macroscopique équivalent.

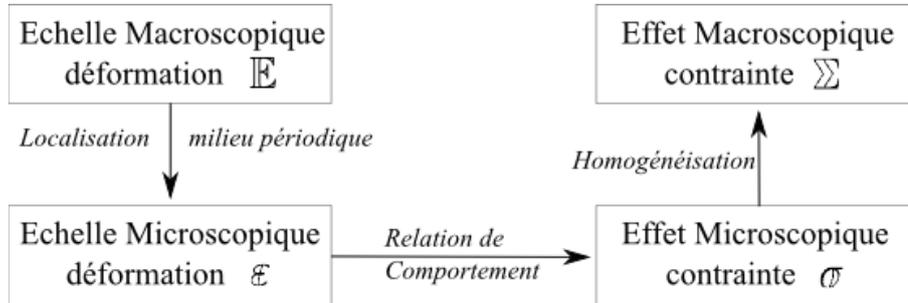


FIGURE 2.4 – Diagramme schématique de la méthode FE².

L'idée principale est d'associer à chaque point d'intégration utilisé pour le calcul des travaux internes macroscopiques, une cellule Ω_f^i permettant d'obtenir le comportement local. Le but est de relier la contrainte macroscopique à la déformation macroscopique correspondante. En chaque point d'intégration, le champ de déplacement défini sur la cellule est cherché sous la forme :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_g(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_f(\mathbf{x}) = \mathbb{E}\mathbf{x} + \mathbf{u}_f(\mathbf{x}) \quad (2.6)$$

où \mathbb{E} est le tenseur de déformation macroscopique. Le champ de contrainte σ s'écrit comme :

$$\sigma(\mathbf{x}) = \Sigma + \sigma_f(\mathbf{x})$$

où Σ désigne la contrainte moyenne sur la cellule : $\Sigma = \langle \sigma(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega_f^i}$. La résolution globale se fait alors de manière itérative, dont chaque itération comprend une étape macroscopique et une étape locale.

1. **Étude macroscopique** : Résolution du problème discrétisé global linéarisé, par exemple : $K_g \delta \mathbf{u}_g = \mathbf{f}_g$.
2. **Étude macroscopique** : Construction d'un incrément $\delta \mathbb{E}$ du tenseur de déformation macroscopique obtenu à partir de l'incrément du déplacement $\delta \mathbf{u}_g$ et poursuite par des sous-étapes (voir figure 2.4) :
 - i *Localisation* : Les conditions aux limites à appliquer sur Ω_f^i sont construites à partir de la condition de périodicité et de l'équation (2.6).
 - ii *Équilibre local* : L'équilibre du problème non-linéaire local est résolu sur la cellule, et un opérateur tangent est construit à l'aide d'une méthode de perturbations.
 - iii *Homogénéisation* : Un incrément $\delta \Sigma$ de la contrainte globale est estimé grâce à : $\Sigma = \langle \sigma_f(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega_f^i}$ et le comportement tangent est construit avec les estimations précédentes.

Les matrices de rigidités élémentaires sont alors construites par intégration numérique de la contrainte globale et du comportement tangent.

Nous remarquons qu'un problème microscopique est défini pour chaque point d'intégration, ce qui rend le processus coûteux. Cependant, ces calculs étant indépendants les uns des autres, cette étape est facilement parallélisable. La FE² permet surtout de traiter des problèmes périodiques (avec découplage d'échelles), fortement non-linéaires.

Bilan sur l'utilisation des techniques d'homogénéisation

Les méthodes d'homogénéisation sont intéressantes et utilisées dans des codes de calcul tel que Zebulon. La plus grande limitation de ces méthodes est qu'elles s'appliquent à des milieux périodiques, infinis. Des problèmes spécifiques peuvent apparaître lorsqu'elles sont utilisées pour des milieux bornés dont les conditions aux limites sont différentes de celles utilisées pour l'équilibre du VER. C'est particulièrement le cas proche des bords libres et des singularités où le fort gradient du déplacement empêche la définition correcte du VER ou l'utilisation de l'approche asymptotique (valable pour des milieux non bornés).

La méthode FE² est une approche pertinente dans le cas complexe de comportement non-linéaire, dans lequel l'homogénéisation doit être "mise à jour" à chaque itération. Ceci se fait à coûts conséquents. Par ailleurs, bien que cette méthode puisse répondre en partie à la problématique posée dans cette thèse, en localisant l'enrichissement, la construction du comportement macroscopique équivalent à partir de problèmes locaux stochastiques n'a pas été étudiée au sein de cette méthode et ne semble pas immédiat.

Observons également que dans le cas d'un milieu stochastique, la séparation des échelles peut ne pas être claire, notamment lorsque les longueurs de variations caractéristiques du champ stochastique ne sont pas très petites. De même, de par la nature aléatoire, la définition d'un VER périodique n'est pas aisée. Mais observons aussi que, dans les travaux présentés dans ce manuscrit, les techniques d'homogénéisation sont utilisées pour construire un modèle équivalent déterministe utilisé loin de la zone d'intérêt.

2.2.2 Méthodes d'enrichissement

Dans le contexte de la mécanique continue et les problèmes multi-échelles, une approche relativement récente cherche à ajouter de la flexibilité à la MEF en permettant la résolution de certains problèmes multi-échelles sur une grille grossière. L'interpolation polynomiale classique utilisée dans la MEF ne permet pas une résolution simple et rapide de phénomènes localisés pour lesquels on souhaite représenter, par exemple, les variations rapides et localisées des gradients de la solution sur une grille grossière. L'idée est d'enrichir localement l'espace d'interpolation avec des fonctions spécifiques. Ainsi, on écrit le champ \mathbf{u} cherché sous la forme :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_g + \mathbf{u}_f \quad (2.7)$$

où le champ grossier \mathbf{u}_g décrit les variations lentes de \mathbf{u} et où \mathbf{u}_f est l'enrichissement (fin et localisé). La variété des méthodes de la littérature que nous allons décrire brièvement, dépend de la manière avec laquelle l'enrichissement \mathbf{u}_f est construit.

2.2.2.1 Méthodes de Partition de l'Unité (PUM)

Initialement proposée par Babuška et Melenk [Babuška *et al.*, 1994, Babuška et Melenk, 1997, Melenk et Babuška, 1996], la Méthode de Partition de l'Unité généralise la MEF en rajoutant aux fonctions de base EF des modes locaux $\{\psi_j^{(i)}\}_{1 \leq j \leq N_f}$, pondérés par des fonctions localisées ϕ_i formant une partition de l'unité du domaine (typiquement les fonctions de bases EF, à supports inclus dans la zone locale d'intérêt) :

$$\sum_i \phi_i = 1$$

Le champ des déplacements est écrit sous la forme :

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_g} u_i \phi_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{N_g} \sum_{j=1}^{N_f} a_{ij} \psi_j^{(i)}(\mathbf{x}) \phi_i(\mathbf{x})$$

où u_i et a_{ij} sont les coefficients inconnus à déterminer, et où $\psi_j^{(i)}(\mathbf{x})$ et $\phi_i(\mathbf{x})$ sont les fonctions spécifiques considérées et les fonctions de formes classiques de la MEF, respectivement (voir figure 2.5). Cette écriture permet de localiser l'enrichissement tout en assurant la continuité \mathcal{C}^0 globale de la solution \mathbf{u}^h . Cela permet notamment d'utiliser n'importe quelle fonction analytique, sans difficulté liée à la définition d'un chargement local, comme dans les méthodes MFEM, HDPM, ou S-Méthode décrites brièvement dans la suite, par exemple.

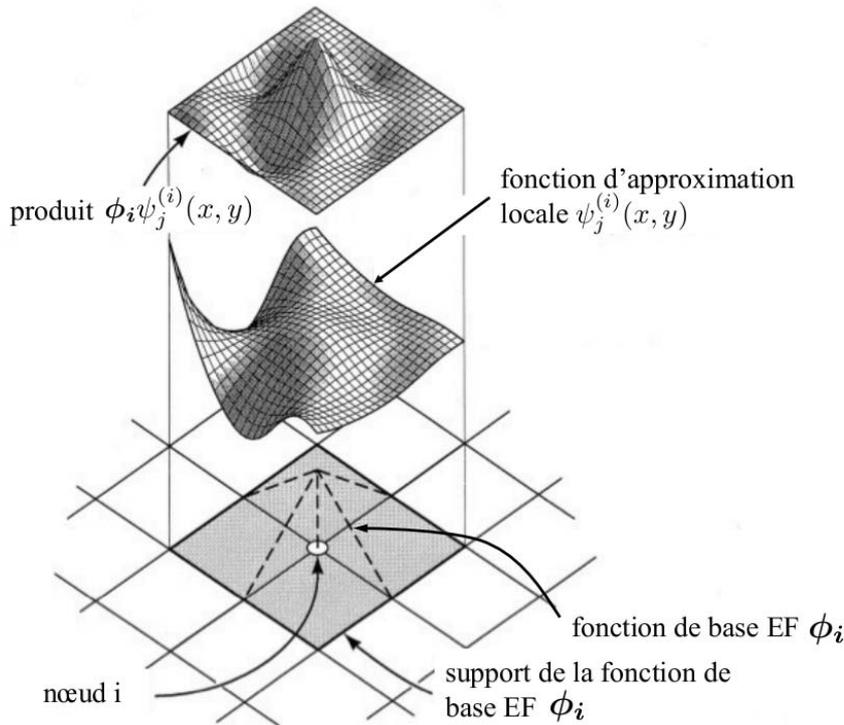


FIGURE 2.5 – Principes des méthodes de Partition de l'Unité (d'après [Strouboulis *et al.*, 2000]).

Dans le contexte des PUM, la Méthode des Éléments Finis Généralisés (GFEM), développée par Strouboulis [Strouboulis *et al.*, 2001], propose d'introduire une information locale sur la solution en prenant comme fonctions spéciales $\psi_j^{(i)}$ des solutions analytiques connues (près des coins et des arêtes [Duarte *et al.*, 2000]), des solutions de problèmes locaux types (de type Helmholtz [Strouboulis *et al.*, 2008]) ou d'autres enrichissements spécifiques (modélisation de jonctions triples entre cristaux dans [Aragón *et al.*, 2010]).

La Méthode des Éléments Finis Étendus (XFEM), introduite par Belytschko et ses collaborateurs [Moës *et al.*, 1999, Belytschko et Black, 1999, Belytschko *et al.*, 2001], utilise aussi le contexte de Partition de l'Unité pour modéliser des discontinuités (des déplacements des lèvres de fissure ou des gradients pour des problèmes d'interfaces) sans

remaillage. L'interface de discontinuité est modélisée en utilisant des techniques de *level-sets*. Elles consistent à représenter une surface Γ par le zéro d'une fonction définie dans un espace à une dimension de plus que Γ , comme par exemple l'interpolation éléments finis de la distance signée ψ_Γ à cette surface :

$$\psi_\Gamma = \begin{cases} d(\mathbf{x}, \Gamma) & \text{si } \mathbf{x} \text{ est dans la région extérieure de } \Gamma \\ -d(\mathbf{x}, \Gamma) & \text{autrement} \end{cases}$$

où $d(\mathbf{x}, \Gamma)$ est la distance entre le point \mathbf{x} et la surface Γ .

Les bases de la XFEM et de la GFEM sont les mêmes. La différence principale réside dans le champ d'application des méthodes, qui demande des techniques spécifiques à chacune d'elle (discontinuités de contraintes ou de déplacement pour la XFEM, plus général pour la GFEM).

Observons qu'une extension au cadre stochastique de la XFEM est proposée dans [Nouy *et al.*, 2008, Nouy et Clément, 2010]. Baptisée X-SFEM, cette méthode utilise les bases de la XFEM pour décrire et calculer l'équilibre de structure dont la géométrie ou une interface matérielle est aléatoire. La représentation de la surface aléatoire $\Gamma(\theta)$ se fait en utilisant des *level-sets* $\psi(\mathbf{x}, \theta)$ aléatoires :

$$\Gamma(\theta) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^r \mid \psi(\mathbf{x}, \theta) = 0\}$$

Observons également que les méthodes basées sur la Partition de l'Unité supposent que l'on dispose d'une information précise locale sur la solution pour enrichir de manière pertinente.

Les méthodes décrites dans la suite proposent des enrichissements de la solution macroscopique différents de ceux des PUM. L'idée reste le rajout d'un enrichissement fin et localisé dans les zones critiques à un champ macroscopique (grossier). Nous allons décrire trois de ces méthodes dans le cadre déterministe et une extension de l'une d'entre elles au cadre stochastique.

2.2.2.2 Méthode Variationnelle Multi-Échelles

Proposée par Hughes [Hughes, 1995], la Méthode Variationnelle Multi-Échelles suppose que le niveau fin de la solution (\mathbf{u}_f) peut être approché par des solutions analytiques de problèmes locaux.

Appliqué au problème de Poisson sur une structure occupant un domaine borné Ω et soumise à des conditions aux limites de type Dirichlet, le niveau grossier correspond à une solution \mathbf{u}_g définie sur une grille éléments finis grossière, alors que la partie fine est obtenue par la formule analytique suivante :

$$\mathbf{u}_f(\mathbf{x}) = - \int_{\Omega} \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) r(\mathbf{u}_g)(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

où $r(\mathbf{u}_g)$ représente le déplacement résiduel de \mathbf{u}_g (distance par rapport à l'équilibre), et où $\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ est la fonction de Green pour l'opérateur de Laplace dans un domaine infini [Hughes, 1995, Hughes *et al.*, 1998].

Le point clé de la méthode est l'approximation de la solution du problème microscopique (la fonction de Green). Dans le cadre des éléments finis, les auteurs proposent d'approcher numériquement la fonction de Green, en utilisant des fonctions bulles. Ces fonctions, qui

sont nulles sur le bord de l'élément grossier, permettent un enrichissement local sur chaque élément macroscopique.

Une autre approche consiste à résoudre des problèmes locaux sur un ensemble de grilles fines incluses dans la grille grossière utilisée pour l'évaluation de \mathbf{u}_g , en annulant la contribution fine sur les bords du maillage grossier par des conditions de Dirichlet. Cette idée a notamment été développée dans la Méthode des Éléments Finis Multi-Échelles (MFEM) proposée par Hou [Hou et Wu, 1997].

2.2.2.3 Méthode de Projection de Dirichlet Hiérarchique (HDFM)

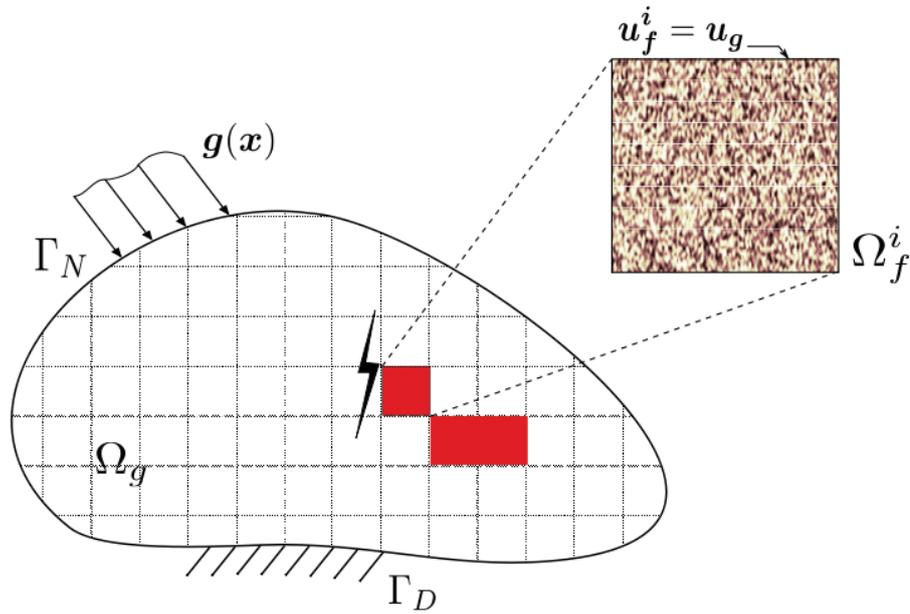


FIGURE 2.6 – Schéma de principe de la Méthode de Projection de Dirichlet Hiérarchique.

Développée par Oden et Zohdi [Zohdi *et al.*, 1996, Oden et Zohdi, 1997] pour des milieux composites, la méthode de Projection de Dirichlet Hiérarchique (*Hierarchical Dirichlet Projection Method*) consiste à enrichir un modèle numérique homogénéisé grossier défini dans Ω_g par des modèles numériques composites localisés, dans des zones Ω_f^i ($1 \leq i \leq N_f$) déterminées par des estimations *a posteriori* de l'erreur. Une condition aux limites de type Dirichlet est utilisée aux bords des zones Ω_f^i , compatible avec le maillage grossier (*c.f.* figure 2.6). Ainsi, le champ de déplacement résultant est écrit sous la forme :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_g + \sum_{i=1}^{N_f} \Pi_{\Omega_f^i \rightarrow \Omega}(\mathbf{u}_f^i - \mathbf{u}_g)$$

où $\Pi_{\Omega_f^i \rightarrow \Omega}$ représente une fonction de prolongement à zéro de champ de Ω_f^i à Ω .

Cette méthode se rapproche des méthodes itératives dans lesquelles la réduction de l'erreur consiste en un raffinement de l'espace d'approximation dans les zones où la solution n'est pas assez précise. La précision de la solution finale est conduite par la pertinence de l'estimateur d'erreur utilisé. Observons toutefois qu'un changement du maillage grossier nécessite une ré-initialisation du processus d'enrichissement.

2.2.2.4 S-Méthode

Dans la S-méthode proposée par Fish [Fish, 1992], un maillage fin d'une zone Ω_f , indépendant du maillage grossier de Ω_g , est localement superposé à ce dernier pour modéliser plus finement un phénomène local (*c.f.* figure 2.7). La continuité des déplacements est assurée par une utilisation de condition de Dirichlet homogène sur le bord Γ_{gf} pour le champ d'enrichissement u_f^h :

$$u_f^h = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma_{gf} \setminus (\Gamma_{gf} \cap \Gamma_u) \quad (2.8)$$

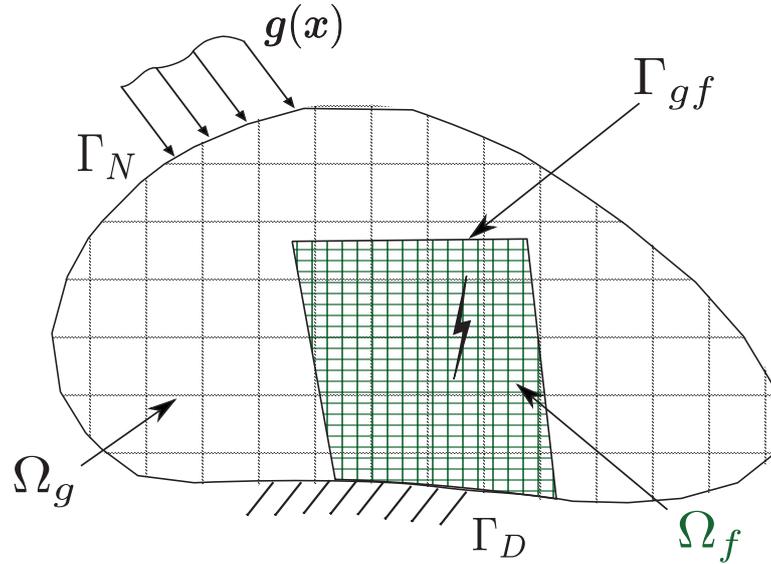


FIGURE 2.7 – Superposition de maillages dans la S-Méthode.

Ainsi, la solution globale est définie à partir des champs discrets solutions :

$$u = \begin{cases} u_g^H & \text{sur } \Omega_g \setminus \Omega_f \\ u_g^H + u_f^h & \text{sur } \Omega_f \end{cases}$$

Dans cette approche, le couplage entre les deux échelles apparaît dans le problème discret. En effet, u_g^H et u_f^h sont (pour un problème linéaire) solution de :

$$\begin{bmatrix} K_g & K_{gf} \\ K_{gf}^T & K_f \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_g^H \\ u_f^h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}$$

Les matrices de rigidités K_g et K_f sont évaluées classiquement en utilisant les maillages global et local, respectivement. La matrice de couplage K_{gf} est évaluée par des techniques d'intégration appropriée.

Observons que (*c.f.* [Ben Dhia et Rateau, 2005]), cette méthode peut souffrir d'un problème de redondance au niveau de la zone de superposition et conduire à des matrices globales non inversibles. Mais notons que, contrairement aux méthodes précédentes, l'enrichissement proposé par la S-méthode est indépendant du maillage grossier : la compatibilité des maillages grossiers et fins n'est pas nécessaire ; ce qui est un avantage pratique certain.

2.2.2.5 Méthode des Éléments Finis Multi-Échelles Stochastique

Observons que l'approche de Hughes *et al* a été étendue dans le cas de problèmes stochastiques [Xu, 2007, Jiang *et al.*, 2010]. L'idée est alors de résoudre localement et de manière indépendante des problèmes stochastiques pour ensuite introduire la variabilité de la réponse à travers les fonctions de formes grossières et ainsi résoudre le problème global homogénéisé sur une grille grossière. Pour préciser, considérons le problème proposé dans le préambule (2.2) avec $\mathbf{u}_D = 0$.

Nous considérons une grille éléments finis grossière. L'idée est d'exprimer le déplacement u^E élémentaire sur un élément E , uniquement à partir des inconnues nodales grossières $u_i^{g,E}$ (avec $i \in [1 \dots N_E]$, avec N_E le nombre de nœuds de l'éléments E) :

$$\mathbf{u}^E = \sum_{i=1}^{N_E} \phi_i^E(\mathbf{x}, \theta) u_i^{g,E}(\theta)$$

L'aléa microscopique est représenté que par les fonctions de formes utilisées. En notant \mathbf{u}_g^E et \mathbf{u}_f^E les déplacements approchés grossiers et fins sur cet élément E , on a :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_g^E &= \sum_{i=1}^{N_E} \phi_i^{g,E}(\mathbf{x}) u_i^{g,E}(\theta) \\ \mathbf{u}_f^E &= \sum_{i=1}^{N_E} \phi_i^{f,E}(\mathbf{x}, \theta) u_i^{g,E}(\theta) \end{aligned}$$

avec $\phi_i^E(\mathbf{x}, \theta) = \phi_i^{g,E}(\mathbf{x}) + \phi_i^{f,E}(\mathbf{x}, \theta)$, où $\phi_i^{g,E}$ sont les fonctions de formes éléments finis classique définies sur la grille grossière. Il suffit alors d'approcher les fonctions ϕ_i^E sur chaque élément de la grille grossière et en utilisant une grille fine pour résoudre :

$$\nabla \cdot (K(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \phi_i^E(\mathbf{x}, \theta)) = 0, \quad \text{sur chaque élément } E$$

Si la taille des éléments sur la grille fine est suffisamment petite, autrement dit si les fonctions de formes grossières $\phi_i^{g,E}$ peuvent être considérées constantes par élément fin, alors le problème ne s'écrit plus qu'en fonction de $\phi_i^{f,E}$:

$$\nabla \cdot (K(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \phi_i^{f,E}(\mathbf{x}, \theta)) = 0, \quad \text{sur chaque élément } E$$

En spécifiant des conditions aux limites sur ∂E_i comme les conditions de Dirichlet $\phi_i^E(\mathbf{x}_j, \theta) = \delta_{ij}$ p.s. (voir [Hou et Wu, 1997, Xu, 2007]), les problèmes locaux (de plus petites tailles et indépendants) peuvent être résolus avec des méthodes classiques de résolution de problème stochastique. Les fonctions de formes $\phi_i^{f,E}$ sont ensuite construites et utilisées pour la résolution du modèle global (toujours aléatoire). L'information de l'échelle fine est alors directement représentée par les fonctions aléatoires ϕ_i^f .

Cette méthode permet ainsi la prise en compte de la fluctuation locale des propriétés dans un calcul défini sur une grille grossière. Les conditions aux limites posées sur les problèmes locaux ne proviennent pas du modèle macroscopique voisin, et peuvent être différentes suivant les problèmes étudiés (des conditions périodiques sont ainsi appliquées dans [Jiang *et al.*, 2010]). De plus, l'enrichissement proposé est fortement lié au maillage grossier. Ainsi, si un défaut, comme une fissure, coupe plusieurs éléments grossiers, l'enrichissement doit se faire sur l'ensemble des éléments concernés. De plus, si le défaut évolue, il faut recalculer les fonctions de formes $\phi_i^{f,E}$.

2.2.2.6 Bilan sur les méthodes d’enrichissement

Les méthodes décrites proposent un enrichissement local et fin \mathbf{u}_f de la solution macroscopique \mathbf{u}_g . Les différentes techniques d’évaluation du champ fin \mathbf{u}_f sont à l’origine des différentes méthodes.

Les PUM introduisent l’enrichissement en rajoutant aux fonctions EF classique des modes pondérés par des fonctions formant une partition de l’unité du domaine. La Méthode Variationnelle de Hughes utilise des expressions analytiques ou numériques des solutions de problèmes locaux (par l’utilisation de l’opérateur de Green). La HDPM permet de localiser les zones dans lesquels un raffinement est nécessaire en utilisant une estimation *a posteriori* de l’erreur. Le couplage entre les deux échelles est réalisé par itération : les problèmes locaux sont chargés par le déplacement \mathbf{u}_g , et le champ global est ensuite corrigé avec l’enrichissement obtenu. La S-Méthode localise l’enrichissement en superposant un maillage fin indépendant du maillage grossier. Les champs fin et grossier coexistent alors dans cette zone et le problème couplé est résolu en une seule fois en prenant en compte les deux échelles d’analyse. Toutefois, en plus du risque de redondance, si un modèle stochastique est utilisé dans Ω_f , les conditions de raccord (2.8) contraignent fortement la solution stochastique localement. Enfin, une extension au cadre stochastique de l’approche de Hughes a été brièvement décrite. Dans cette méthode, l’aléa microscopique est présent dans les fonctions de formes utilisées. Cependant, comme pour l’approche proposée par Hughes, l’enrichissement proposé est fortement dépendant du maillage grossier.

Les méthodes suivantes permettent une superposition de modèle avec un couplage effectué, non plus sur une interface, mais dans un volume.

2.2.3 Méthodes de type sous-domaines

Les méthodes de décomposition de domaine ont été introduites pour le calcul de larges structures pour lesquelles une description fine est nécessaire partout, et donc menant à un nombre très important d’inconnues. Elles permettent le découpage du problème en sous-problèmes couplés mais plus petits dont une partie de la résolution peut se faire de manière parallélisée [Ladevèze et Dureisseix, 1999, Cai, 2003, Gosselet et Rey, 2006]. Une des méthodes de décomposition de domaine la plus connue et la plus utilisée est la méthode FETI [Farhat et Roux, 1991].

Une méthode de décomposition de domaine a notamment été utilisée récemment [Chevreuil *et al.*, 2012] pour la résolution de problème tel que celui que nous considérons dans ce manuscrit. Un mono-modèle stochastique est sous-structuré par deux sous-modèles (voir figure 2.8) : un déterministe homogénéisé (dans Ω_g), l’autre stochastique (dans Ω_f), appelé patch, contenant les incertitudes localisées. Ω_g est alors le complémentaire de Ω_f . Comme dans les méthodes de sous-structuration classique, le couplage entre les deux modèles se fait via une interface Γ par un multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}$. Le travail des efforts liés s’écrit :

$$c(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_f) = \mathbb{E} \left[\int_{\Gamma} \boldsymbol{\lambda} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_f) \right]$$

Observons que lorsque l’interface Γ évolue, le maillage des sous-structures doit être reconstruit. De plus, le couplage des champs sur une surface pose des difficultés, notamment pour le couplage de deux modèles très différents comme ici. Pour un problème 1D par exemple, le couplage se fait sur un point et des caractéristiques propres à l’aléa comme la longueur de corrélation n’intervient alors pas dans le couplage. Dans la section qui

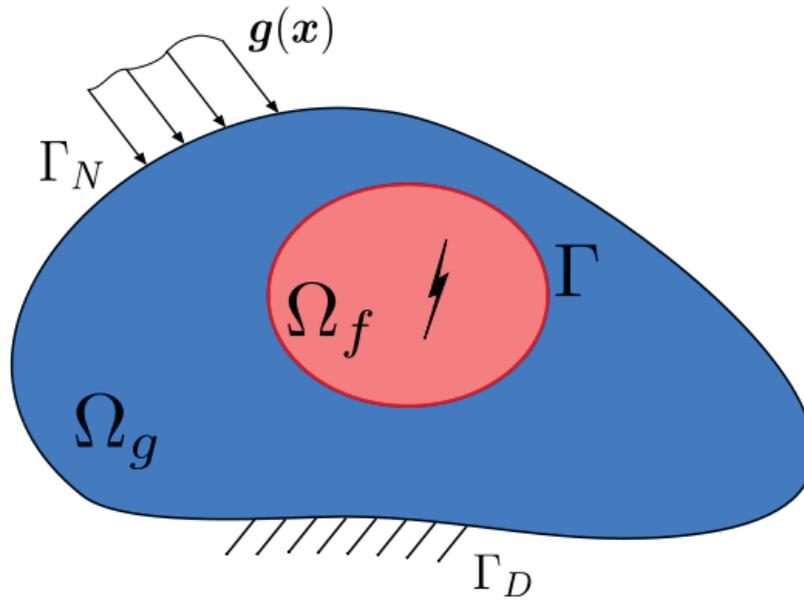


FIGURE 2.8 – Décomposition en deux sous-domaines ($\Omega_d = \Omega \setminus \Omega_f$).

suit, nous décrivons sommairement le cadre de modélisation Arlequin qui nous semble répondre à différentes interrogations soulevées pour les approches rappelées ci-dessus. Ce cadre sera détaillé dans la section 2.3. Observons que l'une des caractéristiques de ce cadre est qu'il permet, non seulement la transmission surfacique standard comme rappelé dans [Ben Dhia, 2006, Ben Dhia, 2008], mais également et surtout un couplage en volume rendu possible par la superposition des modèles.

2.2.4 Méthode de superposition avec couplage volumique : la méthode Arlequin

Introduite par Ben Dhia [Ben Dhia, 1998, Ben Dhia, 1999], la méthode Arlequin propose une technique pour superposer, sur un problème global macroscopique, une analyse plus fine dans une zone d'intérêt. La méthode est basée sur trois points clés :

- une superposition de plusieurs modèles sur une zone commune,
- une distribution des énergies entre les différents modèles superposés,
- un couplage liant faiblement les états mécaniques, en particulier, la méthode Arlequin propose la possibilité d'un couplage via un volume.

Des fonctions de pondération sont utilisées pour distribuer l'énergie totale. Le couplage des deux modèles se fait sous forme faible dans une zone définie. La méthode Arlequin donne un cadre pertinent pour traiter des problèmes multi-échelles mais aussi multi-physiques en permettant l'introduction avec beaucoup de flexibilité de plusieurs altérations locales dans un modèle numérique pré-existant.

Schématiquement l'approche consiste à superposer un patch Ω_f à un domaine global Ω_g (avec, par exemple, $\Omega_f \subset \Omega_g$). Le patch est ensuite partitionné en une zone dite libre Ω_{cf} et une zone de couplage Ω_c , avec $\Omega_f \cap \Omega_c = \emptyset$. Pour distribuer l'énergie mécanique

entre les deux modèles, les coefficients de pondération sont définis comme suit :

$$\begin{cases} \alpha_g, \alpha_f \geq 0 & \text{dans } \Omega_i \quad i \in \{g, f\} \\ \alpha_g, \alpha_f \geq \alpha_0 > 0 & \text{dans } \Omega_{cf} \\ \alpha_g + \alpha_f = 1 & \text{dans } \Omega_g \\ \alpha_g = 1 & \text{dans } \Omega_g \setminus \Omega_f \\ \alpha_g, \alpha_f \text{ constant} & \text{dans } \Omega_{cf} \end{cases} \quad (2.9)$$

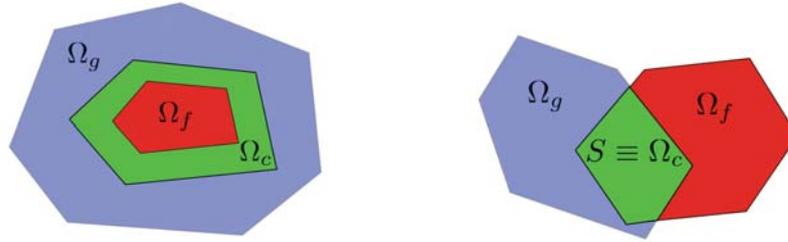


FIGURE 2.9 – Type d'opération de modélisation : substitution à gauche, jonction à droite.

Un opérateur de couplage permet de lier les deux états mécaniques dans la zone de couplage sous forme faible. Dans le cas d'un couplage de volume énergétique, il s'écrit :

$$C(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_f) = \int_{\Omega_c} \boldsymbol{\mu}(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_f) + \kappa \nabla_s \boldsymbol{\mu} : \nabla_s (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_f) d\Omega, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{M}$$

où κ est une constante et où \mathcal{M} est l'espace dit médiateur (*c.f. e.g.* [Ben Dhia, 2008] pour plus de détails). Il s'agit d'une méthode multi-modèles qui peut être utilisée aussi bien pour affiner le modèle localement en superposant un patch, que pour coupler deux modèles totalement distincts, via un volume de couplage (voir figure 2.9).

Ainsi, par exemple, dans le cas particulier d'un couplage d'un modèle continu avec un modèle moléculaire, Belytschko [Belytschko et Xiao, 2003] et Xiao [Xiao et Belytschko, 2004] ont utilisé le cadre Arlequin et nommé l'approche résultante la *Bridging Domain Method* (BDM). De manière tout-à-fait similaire à la méthode Arlequin, l'énergie est distribuée entre les modèles. Celle du modèle continu (noté avec l'indice g) et celle du modèle moléculaire (noté avec l'indice f) sont pondérées par des coefficients β_g et β_f respectivement, tels que :

$$\beta_g = \begin{cases} 0 & \text{dans } \Omega_g \\ \alpha & \text{dans } \Omega_c \\ 1 & \text{dans } \Omega_g \setminus \Omega_c \end{cases}$$

et

$$\beta_f = \begin{cases} 0 & \text{dans } \Omega_f \\ 1 - \alpha & \text{dans } \Omega_c \\ 1 & \text{dans } \Omega_f \setminus \Omega_c \end{cases}$$

où α est un scalaire. Les déplacements des modèles sont contraints dans une zone Ω_c , et pour chaque atome i , par :

$$g_i = \|\mathbf{u}(\mathbf{X}_i) - \mathbf{d}_i\|^2 = 0 \quad (2.10)$$

où \mathbf{X}_i désigne la position de l'atome i . Cette contrainte est aussi prise en compte, comme dans le cas Arlequin, par une méthode de multiplicateur de Lagrange augmentée par pénalisation.

Le Lagrangien augmenté s'écrit alors (en statique ici) :

$$W = W^{int} - W^{ext} + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g} + \frac{1}{2} p \mathbf{g}^T \mathbf{g}$$

où W^{int} et W^{ext} sont les travaux des forces intérieures et extérieures, respectivement $\boldsymbol{\lambda}$ est le vecteur des multiplicateurs de Lagrange pour la condition (2.10) et p est un paramètre de pénalisation. Le problème mécanique est obtenu en écrivant la stationnarité de W .

2.3 Précisions sur la méthode Arlequin

Avant d'étendre la méthode Arlequin au couplage d'un modèle déterministe avec un modèle stochastique, une description plus détaillée de la méthode, dans le cas d'un couplage déterministe-déterministe, est rappelée ici. Ceci permettra de mieux dégager les problématiques et les outils de la méthode.

Cette méthode a déjà été utilisée efficacement pour de nombreuses études (plaque percée ou entaillée [Ben Dhia et Rateau, 2005, Ben Dhia, 2008], couplage coque-3D [Ben Dhia et Rateau, 2005, Rateau, 2003], poutre-2D [Ben Dhia, 1998, Ben Dhia, 1999], propagation de fissures [Ben Dhia et Jamond, 2010], instabilités géométriques [Hu *et al.*, 2011], problème de contact [Ben Dhia et Zammali, 2004, Ben Dhia et Torkhani, 2011] couplage continu-particulaire en déterministe [Bauman *et al.*, 2008, Prudhomme *et al.*, 2008, Ben Dhia *et al.*, 2011] et dans le domaine stochastique [Chamoïn *et al.*, 2008, Cottureau *et al.*, 2010, Cottureau *et al.*, 2011]).

Pour la clarté, nous nous intéressons dans la suite à l'application de la méthode Arlequin dans le cas particulier du problème mécanique continu linéaire déterministe, défini dans le préambule (2.2).

2.3.1 Formulation Arlequin déterministe mixte

La méthode Arlequin permet de modéliser précisément le défaut local, en gardant un modèle grossier loin de celui-ci. L'idée est donc de superposer un patch Ω_f avec défaut, à un domaine sain Ω_g sans défaut. La zone de superposition est partitionnée en une zone libre Ω_{cf} et une zone de couplage Ω_c , ici de mesure non nulle, avec $\Omega_{cf} \cap \Omega_c = \emptyset$. La méthode Arlequin permet alors un couplage et une communication entre ces deux modèles à travers la résolution d'un problème mixte [Ben Dhia, 1998, Ben Dhia, 1999].

En définissant les espaces fonctionnels, $\mathbf{V}_g = \{\mathbf{v} \in (\mathcal{H}^1(\Omega_g))^r, v = 0 \text{ sur } \Gamma_D\}$, $\mathbf{V}_f = (\mathcal{H}^1(\Omega_f))^r$ et $\mathbf{V}_c = (\mathcal{H}^1(\Omega_c))^r$, le problème Arlequin se formule :

Trouver $(\mathbf{u}_g, \mathbf{u}_f, \boldsymbol{\lambda})$ dans $\mathbf{V}_g \times \mathbf{V}_f \times \mathbf{V}_c$ tel que :

$$\begin{cases} a_g(\mathbf{u}_g, \mathbf{v}_g) + \underline{\mathcal{C}}(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}_g) &= \ell_g(v_g), \quad \forall \mathbf{v}_g \in \mathbf{V}_g \\ a_f(\mathbf{u}_f, \mathbf{v}_f) - \underline{\mathcal{C}}(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}_f) &= \ell_f(v_f), \quad \forall \mathbf{v}_f \in \mathbf{V}_f \\ \underline{\mathcal{C}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_f) &= 0, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathbf{V}_c \end{cases} \quad (2.11)$$

où les formes bilinéaires $a_g : \mathbf{V}_g \times \mathbf{V}_g \rightarrow \mathbb{R}$, $a_f : \mathbf{V}_f \times \mathbf{V}_f \rightarrow \mathbb{R}$, et les fonctions linéaires $\ell_g : \mathbf{V}_g \rightarrow \mathbb{R}$ et $\ell_f : \mathbf{V}_f \rightarrow \mathbb{R}$ sont respectivement définies par :

$$a_g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_g} \alpha_g(\mathbf{x}) \mathbf{K}_g \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Omega_g$$

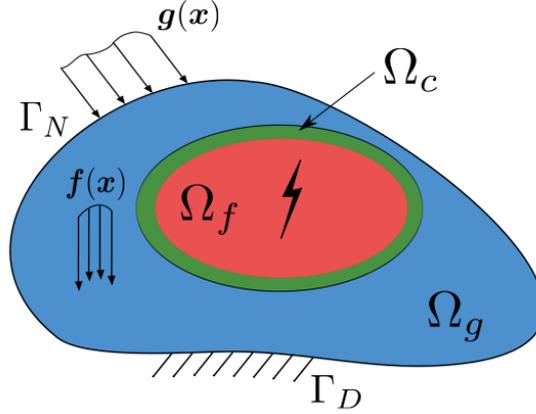


FIGURE 2.10 – Exemple de configuration pour le problème couplé dans le contexte Arlequin.

$$a_f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_f} \alpha_f(\mathbf{x}) \mathbf{K}_f(\mathbf{x}) \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Omega_f$$

$$\ell_g(\mathbf{v}) = \int_{\Omega_g} \beta_g(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Omega + \int_{\Gamma_N} \beta_g(\mathbf{x}) \mathbf{g}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Gamma$$

et

$$\ell_f(\mathbf{v}) = \int_{\Omega_f} \beta_f(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Omega$$

L'opérateur $\underline{C} : \mathbf{V}_c \times \mathbf{V}_c \rightarrow \mathbb{R}$ assurant le couplage de deux champs sous forme faible peut être choisi comme le produit scalaire naturel de $\mathcal{H}^1(\Omega_c)$:

$$\underline{C}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_c} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \kappa \nabla_s \mathbf{u} : \nabla_s \mathbf{v}) d\Omega,$$

où κ est une constante assurant l'homogénéité des grandeurs. D'autres choix d'opérateur peuvent être faits (voir par exemple [Ben Dhia, 2008]).

Nous rappelons que les fonctions de pondération (α_g, α_f) (et (β_g, β_f)) sont choisies en respectant :

$$\begin{cases} \alpha_g, \alpha_f \geq 0 & \text{dans } \Omega_i, \quad i \in \{g, f\} \\ \alpha_g + \alpha_f = 1 & \text{dans } \Omega_g \\ \alpha_g = 1 & \text{dans } \Omega_g \setminus \Omega_f \\ \alpha_g, \alpha_f \text{ constant} & \text{dans } \Omega_{cf} \\ \exists \alpha_0 > 0; \quad \alpha_i \geq \alpha_0, & \text{dans } \Omega_{cf}, \quad i \in \{g, f\} \end{cases} \quad (2.12)$$

Ces hypothèses, concernant les fonctions (α_g, α_f) et (β_g, β_f) , sont nécessaires à la stabilité de la formulation Arlequin (*c.f.* [Rateau, 2003, Ben Dhia, 2008]). Sous sa formulation continue, nous pouvons vérifier que le choix des α_i (et β_i) dans la zone de couplage (fonction constante, linéaire ou quadratique (voir figure 2.11)) n'influe pas sur les solutions \mathbf{u}_g et \mathbf{u}_f .

2.3.2 Stabilité des formulations continues et discrètes

Sous des conditions classiques de régularité des domaines $\Omega_g, \Omega_f, \Omega_c$, sous les hypothèses sur le patch et la zone de couplage, sous les hypothèses (2.12) sur les fonctions de pondération, et finalement sous les conditions classiques sur les formes bilinéaires a_g, a_f (continuité,

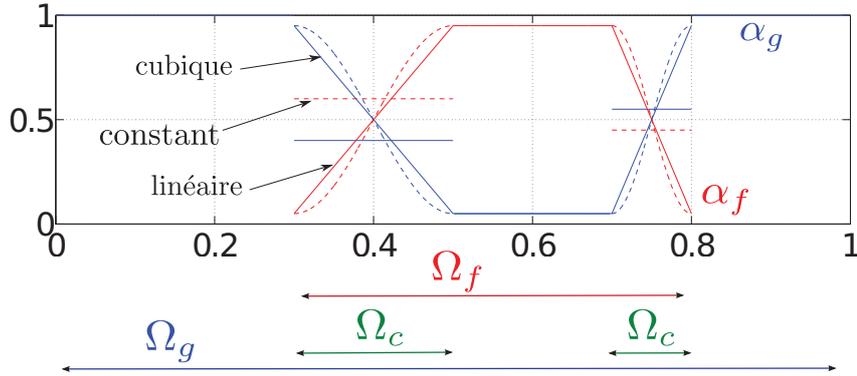


FIGURE 2.11 – Exemples de fonctions de pondérations possible pour un problème mono-dimensionnel (fonctions constantes, linéaire ou cubique dans la zone de couplage).

coercivité), sur la forme linéaire ℓ_g (continuité) et sur les paramètres matériaux \mathbf{K}_g et \mathbf{K}_f , le problème Arlequin défini par (2.11) admet un unique triplet solution $(\mathbf{u}_g, \mathbf{u}_f, \boldsymbol{\lambda})$ dans $\mathcal{V}_g \times \mathcal{V}_f \times \mathcal{V}_c$ (voir [Ben Dhia et Rateau, 2001, Rateau, 2003, Ben Dhia, 2008] pour la démonstration).

En utilisant une discrétisation spatiale classique du problème, par la méthode des Éléments Finis par exemple, nous notons \mathcal{V}_g^h , \mathcal{V}_f^h et \mathcal{V}_c^h les espaces d'approximation EF respectif de \mathcal{V}_g , \mathcal{V}_f et \mathcal{V}_c . Nous supposons de plus les hypothèses suivantes vérifiées :

$$\mathcal{V}_c^h \subset \mathcal{V}_g^h|_{\Omega_c} \text{ ou } \mathcal{V}_c^h \subset \mathcal{V}_f^h|_{\Omega_c} \quad (2.13)$$

où $\mathcal{V}_i^h|_{\Omega_c} = \{v|_{\Omega_c}, v \in \mathcal{V}_i^h, i \in \{g, f\}\}$. Sous les conditions (2.13), et sous les conditions précédentes de stabilité du problème mixte continu, le problème Arlequin discrétisé est un problème bien posé, et nous pouvons montrer que l'erreur vérifie [Ben Dhia et Rateau, 2001, Rateau, 2003, Ben Dhia, 2008] :

$$\exists C > 0,$$

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{V}^h} + \|\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}^h\|_{\mathcal{V}_c^h} \leq C \left\{ \inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}^h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_{\mathcal{V}^h} + \inf_{\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{V}_c^h} \|\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\mu}\|_{\mathcal{V}_c^h} \right\}$$

avec $\mathcal{V} = \mathcal{V}_g \times \mathcal{V}_f$ et $\mathcal{V}^h = \mathcal{V}_g^h \times \mathcal{V}_f^h$.

2.3.3 Consistance du problème Arlequin

La consistance est la notion, en déterministe, suivant laquelle lorsque l'on choisit le même modèle pour le patch Ω_f , pour le substrat $\Omega_g \equiv \Omega$ que pour le mono-modèle initial, nous retrouvons les résultats de cohérence suivants. La consistance a été démontrée lors de précédents travaux de Ben Dhia [Ben Dhia, 2008]. Sous les hypothèses (2.12), et en supposant que les fonctions de pondérations sont constantes dans la zone libre Ω_{cf} , la solution du problème Arlequin défini par (2.11), vérifie :

$$\mathbf{u}^{arl} = \mathbf{u}_0 \quad \text{dans } \Omega$$

où \mathbf{u}_0 est l'unique solution du problème mono-modèle, et où \mathbf{u}^{arl} est défini comme :

$$\mathbf{u}^{arl} = \begin{cases} \mathbf{u}_g & \text{dans } \Omega_g \setminus \Omega_f \\ \alpha_g \mathbf{u}_g + \alpha_f \mathbf{u}_f & \text{dans } \Omega_f \end{cases}$$

2.3.4 Bilan sur la méthode Arlequin

La méthode Arlequin rappelée ici offre un cadre de modélisation permettant de repousser les frontières de la méthode des éléments finis classique. De plus, comme les nombreux travaux associés le montrent, elle permet de considérer le couplage efficace entre deux modèles très différents.

Dans la suite des travaux présentés dans ce manuscrit, nous proposons l'extension de cette méthode au cas d'un couplage entre un modèle déterministe et un modèle stochastique. L'utilisation de cette technique permettra notamment d'évaluer une grandeur d'intérêt, localisée dans le patch, sans avoir à modéliser entièrement la structure par un modèle stochastique. Cependant, l'approximation faite devra être contrôlée. La section suivante fait un état des lieux non exhaustif des outils développés pour évaluer l'erreur introduite par l'usage d'un modèle grossier approché plutôt qu'un modèle fin de référence.

2.4 État de l'art sur les méthodes d'estimation d'erreur

2.4.1 Rappel du contexte d'étude

Les outils d'estimation d'erreur donnés dans cette section concerneront le problème mécanique déterministe général suivant. Nous considérons une structure occupant un domaine Ω de \mathbb{R}^r , à frontière régulière $\partial\Omega$ décomposée en une frontière de Dirichlet Γ_D et de Neumann Γ_N , avec $\overline{\Gamma_D} \cup \overline{\Gamma_N} = \partial\Omega$, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ et $\Gamma_D \neq \emptyset$. Elle est soumise à un chargement volumique $\mathbf{f} \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^r$, à un déplacement imposé $\mathbf{u}_D \in (\mathcal{L}^2(\Gamma_D))^r$ sur Γ_D ainsi qu'à un chargement surfacique $\mathbf{g} \in (\mathcal{L}^2(\Gamma_N))^r$ sur Γ_N . En définissant l'espace fonctionnel :

$$\Sigma = \{\sigma \in \mathcal{M}_r(\mathbb{R}) \mid \sigma_{ij} \in \mathcal{L}^2(\Omega), 1 \leq i, j \leq r\}$$

où $\mathcal{M}_r(\mathbb{R})$ est l'espace des matrices carrées réelles de taille r . Le problème consiste à trouver le couple de solutions (\mathbf{u}, σ) vérifiant :

- les équations cinématiques

$$\mathbf{u} \in (\mathcal{H}^1(\Omega))^r, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_D \text{ sur } \Gamma_D, \quad \varepsilon(\mathbf{u}) = \nabla_s \mathbf{u} \quad (2.14)$$

- les équations d'équilibre (ou statiques)

$$\sigma \in \Sigma, \quad \int_{\Omega} \sigma : \varepsilon(\mathbf{v}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.15)$$

où $\mathcal{V}^0 = \{\mathbf{v} \in (\mathcal{H}^1(\Omega))^r \mid \mathbf{v} = 0 \text{ sur } \Gamma_D\}$,

- la relation de comportement

$$\sigma = \mathbf{K} \varepsilon(\mathbf{u}), \quad \text{dans } \Omega \quad (2.16)$$

où \mathbf{K} est le tenseur des rigidités vérifiant les hypothèses classiques de symétrie et de coercivité (*c.f. e.g.* [Duvaut et Lions, 1972]).

Ce problème admet un unique couple solution noté $(\mathbf{u}_{ex}, \sigma_{ex})$.

La formulation sous forme faible en déplacement du problème s'écrit :

Trouver $\mathbf{u} \in \mathcal{V}$, avec $\mathcal{V} = \{\mathbf{v} \in (\mathcal{H}^1(\Omega))^r \mid \mathbf{v} = \mathbf{u}_D \text{ sur } \Gamma_D\}$ tel que :

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.17)$$

où la forme bilinéaire (travail des efforts internes) $a : \mathcal{V} \times \mathcal{V}^0 \rightarrow \mathbb{R}$ et la forme linéaire (travail des efforts externes) $\ell : \mathcal{V}^0 \rightarrow \mathbb{R}$ sont respectivement définies par :

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{K} \varepsilon(\mathbf{u}) : \varepsilon(\mathbf{v}) d\Omega$$

et

$$\ell(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} d\Gamma$$

En pratique, la solution \mathbf{u}_{ex} n'est cherchée que sous forme approchée. La MEF peut, par exemple, être utilisée pour obtenir une approximation de la solution notée \mathbf{u}_h contenue dans un espace d'approximation notée \mathcal{V}^h . Nous pouvons aussi reconstruire une approximation de σ_{ex} , notée σ_h , à partir de \mathbf{u}_h en utilisant l'équation (2.16).

Supposons que nous souhaitons contrôler la qualité d'approximation de la solution en estimant l'erreur définie par :

$$\mathbf{e}^u = \mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_h, \quad \text{dans } \Omega$$

En l'injectant dans l'équation (2.15), nous obtenons l'équation dite du résidu :

$$\int_{\Omega} \mathbf{K} \varepsilon(\mathbf{e}^u) : \varepsilon(\mathbf{v}) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} d\Gamma - \int_{\Omega} \mathbf{K} \varepsilon(\mathbf{u}_h) : \varepsilon(\mathbf{v}) d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.18)$$

qui peut être ré-écrite de manière plus simple sous la forme :

$$a(\mathbf{e}^u, \mathbf{v}) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0$$

où \mathcal{R} désigne le résidu par rapport au problème (2.17) avec $\mathcal{R}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}) - a(\mathbf{u}, \mathbf{v})$. Nous pouvons remarquer que cette équation est aussi définie sur le problème de référence. En définissant les produits scalaires (sur $(\mathcal{H}^1(\Omega))^r$ et Σ respectivement) suivants :

$$(\bullet, \bullet)_{\mathbf{K}, \Omega} = \int_{\Omega} \mathbf{K} \varepsilon(\bullet) : \varepsilon(\bullet) d\Omega$$

$$(\bullet, \bullet)_{\mathbf{K}^{-1}, \Omega} = \int_{\Omega} \mathbf{K}^{-1} \bullet : \bullet d\Omega$$

nous cherchons à évaluer des mesures de \mathbf{e}^u comme par exemple la mesure en norme énergétique définie par :

$$\|\mathbf{e}^u\|_{\mathbf{K}, \Omega} = \|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_h\|_{\mathbf{K}, \Omega} = \|\sigma_{ex} - \sigma_h\|_{\mathbf{K}^{-1}, \Omega}$$

où $\|\bullet\|_{\mathbf{K}, \Omega}^2 = (\bullet, \bullet)_{\mathbf{K}, \Omega}$ et $\|\bullet\|_{\mathbf{K}^{-1}, \Omega}^2 = (\bullet, \bullet)_{\mathbf{K}^{-1}, \Omega}$.

Cependant, les ingénieurs s'intéressent davantage à des quantités spécifiques et locales liées au dimensionnement d'une structure telles que la contrainte moyenne dans une zone ou un déplacement maximal. Dès lors, la solution approchée doit bien représenter cette quantité locale, notée $q(\cdot)$. L'erreur induite pour l'approximation de cette quantité d'intérêt est dite erreur locale. Elle est définie par :

$$\eta = q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h)$$

Dans la suite, des techniques classiques de la littérature d'estimation de ces erreurs sont rappelées brièvement.

2.4.2 Estimation d'erreur globale

2.4.2.1 Erreur *a priori*

Historiquement, l'erreur *a priori* fut la première à être étudiée. Développés depuis les années 70 [Azziz et Babuška, 1972, Ciarlet, 1978], les travaux sur l'estimation d'erreur *a priori* globale ont principalement été menés dans le cadre des équations linéaires aux dérivées partielles et en utilisant les Éléments Finis. Cette erreur a été qualifiée d'erreur *a priori* car elle s'exprime en fonction de la solution exacte. Une borne supérieure de la norme $\|\mathbf{e}^u\|_{\mathbf{K},\Omega}$ est donnée par :

$$\|\mathbf{e}^u\|_{\mathbf{K},\Omega} \leq Ch^q$$

avec :

h : une taille caractéristique du maillage utilisé pour la discrétisation,

q : un coefficient positif relatif à la régularité de la solution exacte,

C : une constante, indépendante de h et q mais dépendante du type des éléments, de la géométrie, etc.

Par exemple dans le cas d'une solution régulière, q est égal au degré maximal de l'interpolation éléments finis choisie. Sinon, $q = \min(p, \alpha)$ où α est l'ordre de la singularité ($\alpha = \frac{1}{2}$ dans le cas d'une fissure par exemple).

Cette méthode dite *a priori* fournit une information sur le taux de convergence mais elle ne donne qu'une indication grossière sur l'erreur. De plus, dans le cas de matériaux hétérogènes ou aléatoires, la mise en place de cette estimation n'est pas directe et conduit à de nombreuses complications.

2.4.2.2 Erreur *a posteriori*

Afin d'améliorer la qualité d'estimation de l'erreur globale, des méthodes utilisant directement la solution approchée (\mathbf{u}_h, σ_h) furent développées. Ce sont les méthodes *a posteriori*. Elles sont utilisées en post-traitement d'un calcul pour en vérifier la qualité. Nous distinguons trois familles de méthodes d'estimation d'erreur *a posteriori* : celles basées sur le défaut d'équilibre, celles basées sur le défaut de régularité et enfin celles basées sur l'erreur en relation de comportement.

Méthode basée sur le défaut d'équilibre

Introduite par Babuška [Babuška et Rheinboldt, 1978b], cette méthode dite de l'équilibre résiduel est basée sur le fait que l'équation (2.15) est respectée de façon faible uniquement au sens des éléments finis par σ_h . En intégrant par partie l'équation (2.18) sur chaque élément, nous pouvons écrire :

$$\int_{\Omega} \mathbf{K}\varepsilon(\mathbf{e}^u) : \varepsilon(\mathbf{v}) d\Omega = \sum_E \int_E \mathbf{r}_E \cdot \mathbf{v} dE - \sum_{\Gamma} \int_{\Gamma} \mathbf{t}_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.19)$$

$$= \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.20)$$

où E et Γ désignent respectivement l'ensemble des éléments et l'ensemble des faces (ou arêtes en 2D) du maillage utilisé. Les termes de chargement \mathbf{r}_E et \mathbf{t}_{Γ} sont définis par :

$$\mathbf{r}_E = (\nabla \cdot \sigma_h + \mathbf{f})|_E$$

$$\mathbf{t}_\Gamma = \begin{cases} \sigma_{h|E_1} \mathbf{n}_{E_1} + \sigma_{h|E_2} \mathbf{n}_{E_2} & (\text{si } \Gamma \text{ est entre deux éléments } E_1 \text{ et } E_2) \\ \sigma_{h|E} \mathbf{n}_E - \mathbf{g} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.21)$$

Dans (2.21), \mathbf{n}_E désigne le vecteur normal sortant de Γ .

Observons que :

$$\mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}) = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0^h \quad (2.22)$$

où \mathcal{V}_0^h est l'espace vectoriel associé à l'espace d'approximation \mathcal{V}^h .

Méthode explicite

Une première classe d'indicateur dit explicite est défini en utilisant directement l'équation (2.20) ("*Global Explicit Residual Based Error Estimator*" [Babuška et Rheinboldt, 1978b]). En introduisant les normes \mathcal{L}^2 naturelles de \mathcal{V} :

$$\|\bullet\|_E^2 = \int_E \bullet \cdot \bullet dE \quad \text{et} \quad \|\bullet\|_\Gamma^2 = \int_\Gamma \bullet \cdot \bullet d\Gamma$$

on peut montrer qu'une estimation de l'erreur peut être donnée par :

$$\|e^u\|_{\mathbf{K}, \Omega} \leq \rho = C \left[\sum_E h_E^2 \|\mathbf{r}_E\|_E^2 + \sum_\Gamma l_\Gamma \|\mathbf{t}_\Gamma\|_\Gamma^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

où h_E et l_Γ sont respectivement des mesures de E et Γ , et où C est une constante positive, indépendante de h , évaluée numériquement et/ou analytiquement en résolvant des problèmes annexes. L'estimation ρ peut être décomposée en une somme de contributions par élément : $\rho = \sum_E \rho_E$. La constante C constitue le point clé de cette approche de par sa dépendance au problème de référence, à la forme des éléments et aux fonctions d'interpolation.

Remarque 1 *Plus de détails sur cet estimateur peuvent être trouvés dans la littérature. Cependant, des études tendent à montrer que cette estimation est assez pessimiste pour l'erreur réelle (voir par exemple [Verfürth, 1996]).*

Méthodes implicites

Bien que plus coûteuses que la précédente, les méthodes implicites donnent une estimation plus fine de l'erreur. En partant de nouveau de l'équation (2.18), l'idée est d'approcher e^u , localement : par élément ou groupe d'éléments (patch). Les problèmes locaux sont résolus avec un coût acceptable et permettent une estimation de l'erreur globale.

La première méthode implicite a été proposée par Babuška en 1978 ("*Subdomain Residual Method*" [Babuška et Rheinboldt, 1978a, Babuška et Miller, 1987]). L'approximation de e^u se fait en utilisant un patch d'éléments Ω_i dont les éléments ont en commun un nœud i , et dont la frontière extérieure est soumise à une condition de Dirichlet homogène. En restreignant l'équation (2.18) sur Ω_i et en intégrant par parties sur chaque élément du patch Ω_i , les problèmes locaux s'écrivent pour chaque patch considéré :

Trouver $e_i \in \mathcal{V}_i^0$ tel que :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_i} \mathbf{K} \varepsilon(e_i) : \varepsilon(\mathbf{v}) d\Omega &= \mathcal{R}_{|\Omega_i}(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}) & \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_i^0 \\ \int_{\Omega_i} \mathbf{K} \varepsilon(e_i) : \varepsilon(\mathbf{v}) d\Omega &= \sum_{E \subset \Omega_i} \int_E \mathbf{r}_E \cdot \mathbf{v} dE - \sum_{\Gamma \subset \Omega_i} \int_\Gamma \mathbf{t}_\Gamma \cdot \mathbf{v} d\Gamma & \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_i^0 \end{aligned}$$

avec $\mathcal{V}_i^0 = \{\mathbf{v} \in (\mathcal{H}^1(\Omega_i))^r \mid \mathbf{v} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_i\}$.

L'estimation de l'erreur globale $\|\mathbf{e}^u\|_{\mathbf{K},\Omega} \approx \rho$ est alors donnée par :

$$\rho^2 = \sum_i \int_{\Omega_i} \mathbf{K} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{e}_i) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{e}_i) d\Omega$$

qui peut aussi être écrite comme une somme de contributions élémentaires ρ_E telles que $\rho^2 = \sum_E \rho_E^2$, avec :

$$\rho_E^2 = \sum_{i \in E} \int_E \mathbf{K} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{e}_i) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{e}_i) d\Omega$$

La méthode décrite ici utilise des conditions de Dirichlet et donne une sous-estimation de l'erreur réelle $\|\mathbf{e}^u\|_{\mathbf{K},\Omega}$. Une borne supérieure peut être obtenue en appliquant des conditions de Neumann aux problèmes locaux en utilisant des patches d'éléments [Strouboulis et Haque, 1992], ou directement sur chaque élément ("*Element Residual Method*" [Demkowicz et al., 1984]).

Afin d'éviter le calcul du saut d'effort \mathbf{t}_Γ (2.21), plus récemment, dans [Prudhomme et al., 2004, Cottreau et al., 2009] par exemple, une partition de l'unité est utilisée pour résoudre des problèmes locaux auto-équilibrés ("*Flux-Free Method*"). Cette dernière technique conduit à un estimateur qui est une borne supérieure garantie de l'erreur vraie.

Méthode basée sur le défaut de régularité

Introduite dans [Zienkiewicz et Zhu, 1987, Zienkiewicz et Zhu, 1992], cette méthode est basée sur le fait que le tenseur des contraintes σ_h , approché par la méthode des éléments finis \mathcal{C}^0 , présente des discontinuités aux interfaces des éléments et ne converge pas vers σ_{ex} en tout point du domaine Ω avec le même taux de convergence. L'idée est alors de construire une solution régulière σ^r du tenseur des contraintes, appelée solution lissée. Si cette solution a une meilleure régularité que celle directement obtenue par éléments finis, alors on a :

$$\|\sigma_{ex} - \sigma^r\|_{\mathbf{K}^{-1},\Omega} \leq A \|\sigma_{ex} - \sigma_h\|_{\mathbf{K}^{-1},\Omega}, \quad 0 \leq A \leq 1$$

de plus :

$$\|\mathbf{e}^u\|_{\mathbf{K},\Omega} = \|\sigma_{ex} - \sigma_h\|_{\mathbf{K}^{-1},\Omega} \leq C \|\sigma^r - \sigma_h\|_{\mathbf{K}^{-1},\Omega} \quad \text{avec } C = \frac{1}{1-A} \geq 1$$

L'erreur globale peut alors être estimée par $\|\sigma^r - \sigma_h\|_{\mathbf{K}^{-1},\Omega}$. Cependant, la constante A est rarement parfaitement connue. C'est pourquoi, le résultat précédent, bien qu'efficace, ne permet d'avoir qu'une indication de l'erreur, et non une véritable estimation. La pertinence de cette estimation est donc liée à la manière de construire la solution lissée σ^r . Citons par exemple la méthode "ZZ1" [Zienkiewicz et Zhu, 1987] dans laquelle la contrainte σ^r est cherchée sous la forme :

$$\sigma^r = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i \tag{2.23}$$

où $\{\alpha_i\}_{1 \leq i \leq N}$ désignent des tenseurs constants symétriques, $\{\phi_i\}_{1 \leq i \leq N}$ les fonctions de formes éléments finis classiques et N le nombre de nœuds du maillage. La détermination des tenseurs α_i peut se faire de deux manières :

- par projection globale, en minimisant l'écart aux moindres carrés entre les champs de contraintes éléments finis et lissé $\|\sigma^r - \sigma_h\|_{\mathbf{K}^{-1},\Omega}^2$

– en moyennant localement sur les nœuds du maillage, pour prendre en compte les contributions du champ de contrainte σ_h des éléments entourant le nœud considéré. Ces méthodes simples sont très populaires dans l'ingénierie car le coût de calcul qu'elles engendrent reste faible et elle s'appliquent à tout type de problème. Cependant, elles ne sont pas très performantes, en particulier lorsque le maillage utilisé est assez grossier.

La méthode "ZZ2" ou "SPR" [Zienkiewicz et Zhu, 1992] apporte des améliorations dans le calcul des termes α_i pour obtenir une estimation de meilleure qualité. Ce calcul se fait en deux étapes. On cherche tout d'abord, sur chaque patch d'éléments Ω_i (associés à la fonction de forme ϕ_i), à minimiser l'écart aux moindres carrés entre la solution σ_h et un champ, défini par patch, polynomial σ_i^r (défini de manière similaire à (2.23)) sur un ensemble de points de contrôle \mathbf{x}_c . Ces points de contrôle sont confondus avec les points de superconvergence du maillage lorsque ceux-ci sont connus (points de Gauss en 1D). Les termes de α_i sont ensuite construits en prenant une moyenne sur l'ensemble des patches des valeurs de σ_i^r prises au nœud i .

Enfin, citons une variante apportée à la méthode "SPR" initiale, nommée "SPR-E" [Wiberg et Abdulwahab, 1993], qui vise à forcer la contrainte lissée σ^r à respecter l'équilibre locale sous forme faible ou forte dans chaque patch. Plus récemment, la méthode "SPR-C" [Ródenas et al., 2007] vise aussi à satisfaire les conditions de compatibilité sur chaque patch et les conditions aux limites en efforts sur la frontière des patches.

Méthode basée sur l'erreur en relation de comportement

Cette méthode, introduite par Ladevèze [Ladevèze, 1975, Ladevèze et Pelle, 2005], permet d'obtenir des bornes garanties de l'erreur globale. D'abord développée dans le cadre de la thermique et de l'élasticité linéaire en 2D [Ladevèze et al., 1991], cette méthode a ensuite été étendue au cas d'élasticité incompressible [Ladevèze et al., 1991] et en 3D [Coorevits et al., 1998].

L'idée principale est simple. De la solution approchée, la première étape est de construire un nouveau champ de déplacement $\hat{\mathbf{u}}$ vérifiant (2.14) ainsi qu'un champ de contrainte $\hat{\sigma}$ vérifiant (2.15). Alors, une mesure est définie pour estimer l'erreur introduite par le couple $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\sigma})$ dans la validation de l'équation (2.16). Cette mesure est définie comme :

$$e_{cr}^2(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\sigma}) = \frac{1}{2} \|\hat{\sigma} - \mathbf{K}\varepsilon(\hat{\mathbf{u}})\|_{\mathbf{K}^{-1}, \Omega}^2$$

En outre, l'erreur en relation de comportement vérifie :

$$e_{cr}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\sigma}) = 0 \iff (\hat{\mathbf{u}}, \hat{\sigma}) = (\mathbf{u}_{ex}, \sigma_{ex})$$

et

$$\|\mathbf{u}_{ex} - \hat{\mathbf{u}}\|_{\mathbf{K}, \Omega}^2 + \|\sigma_{ex} - \hat{\sigma}\|_{\mathbf{K}^{-1}, \Omega}^2 = 2 e_{cr}^2(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\sigma})$$

Cette dernière propriété est connue sous le nom du théorème de Prager-Synge [Prager et Synge, 1947]. Elle permet d'obtenir directement des bornes garanties de $\|\mathbf{u}_{ex} - \hat{\mathbf{u}}\|_{\mathbf{K}, \Omega}$ et de $\|\sigma_{ex} - \hat{\sigma}\|_{\mathbf{K}^{-1}, \Omega}$.

En notant $(\hat{\mathbf{u}}_h, \hat{\sigma}_h)$ une solution reconstruite de (\mathbf{u}_h, σ_h) vérifiant (2.14, 2.15), avec $\mathbf{u}_h = \hat{\mathbf{u}}_h$, une estimation de l'erreur globale peut-être définie par :

$$\rho = \sqrt{2} e_{cr}(\hat{\mathbf{u}}_h, \hat{\sigma}_h)$$

Remarque 2 Cette méthode propose des bornes garanties supérieures de l'erreur. Cependant, la construction des champs $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\sigma})$ vérifiant (2.14) et (2.15) est un point clé de la méthode et requiert une attention particulière.

2.4.3 Estimation d'erreur locale : erreur en quantité d'intérêt

Une estimation d'erreur globale ne donne qu'une information globale sur la qualité de la solution. Dans le cadre du dimensionnement d'une structure, les ingénieurs s'intéressent davantage à des quantités d'intérêt locales. En effet, les critères classique de dimensionnement concernent des quantités locales comme la contrainte de Von Mises ou un déplacement maximal dans une zone.

Nous nous intéressons à l'erreur η induite sur la quantité locale q reliée au champ de déplacement \mathbf{u} :

$$\eta = q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h)$$

L'idée principale pour l'estimation d'erreur locale est d'utiliser des opérateurs de Green pour se reporter aux techniques d'estimation d'erreur globale. Les premiers travaux concernant les techniques d'extraction sont datés de plus de cinquante ans [Greenberg, 1948]. Cependant, les techniques d'extraction dans le cadre des éléments finis pour évaluer l'erreur locale sur quantité d'intérêt sont plus récents [Babuška et Miller, 1984, Becker et Rannacher, 1996]. Pour simplifier, la méthode est détaillée ici sur un modèle d'élasticité statique.

2.4.3.1 Extraction

La première étape consiste à écrire la quantité locale q sous une forme globale :

$$q(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}_{xo} d\Omega, \quad \text{ou } q(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \sigma_{xo} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) d\Omega$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}_{xo}$ et $\sigma_{xo} = \mathbf{K}\boldsymbol{\varepsilon}_{xo}$ sont des opérateurs, appelés extracteurs, ou opérateurs d'extraction. Par exemple, l'extracteur intervenant pour l'estimation de la composante σ_{11} moyenne sur un élément E d'un maillage en 2D s'écrit :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{xo} = \frac{1}{|E|} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Remarque 3 Pour une quantité d'intérêt locale q , l'opérateur d'extraction n'est pas unique.

2.4.3.2 Problème adjoint

Dans un cas pour lequel la quantité d'intérêt q est linéaire par rapport au déplacement, l'extracteur ne dépend pas de la solution du problème de référence $(\mathbf{u}_{ex}, \sigma_{ex})$. On peut alors écrire :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h) = q(\mathbf{e}^u) = \int_{\Omega} \sigma_{xo} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{e}^u) d\Omega \quad (2.24)$$

Remarque 4 Dans le cas d'une quantité non-linéaire, une des techniques consiste à linéariser $q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h)$ autour de \mathbf{u}_h en écrivant [Johnson et Hansbo, 1992] :

$$\begin{aligned} q(\mathbf{u}_{ex}) &= q(\mathbf{e}^u + \mathbf{u}_h) = q(\mathbf{u}_h) + q'(\mathbf{u}_h; \mathbf{e}^u) + o(\mathbf{e}^u) \\ &\Rightarrow q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h) \approx q'(\mathbf{u}_h; \mathbf{e}^u) \end{aligned}$$

où $\mathbf{e}^u = \mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_h$ et où $q'(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{q(\mathbf{u} + t\mathbf{v}) - q(\mathbf{u})}{t}$ est l'opérateur tangent à partir duquel l'extracteur sera défini (suivant l'équation (2.24)). Dans [Ladevèze et Chamoin, 2010],

les auteurs proposent une approche différente pour des quantités ponctuelles, évitant la linéarisation, et donc en gardant les termes d'ordres plus élevés. L'idée est d'exprimer $q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h)$ dans une base définie et de construire les extracteurs associés. En calculant des bornes pour chaque terme, des bornes de $q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h)$ sont obtenues.

Le problème adjoint, appelé aussi problème dual, est entièrement défini par le modèle de référence et l'opérateur d'extraction. Dans le cas étudié ici, cela conduit à :

Trouver $(\mathbf{p}_u, p_\sigma) \in (\mathcal{V}^0 \times \mathbb{S})$ vérifiant :

– les équations cinématiques

$$\mathbf{p}_u \in \mathcal{V}^0, \quad \mathbf{p}_u(\mathbf{x}) = 0 \text{ sur } \Gamma_D, \quad \varepsilon(\mathbf{p}_u) = \nabla_s \mathbf{p}_u$$

– les équations d'équilibre

$$p_\sigma \in \mathbb{S}, \quad \int_{\Omega} (p_\sigma - \sigma_{x_0}) : \varepsilon(\mathbf{v}) \, d\Omega = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.25)$$

– la relation de comportement

$$p_\sigma = \mathbf{K} \varepsilon(\mathbf{p}_u), \quad \text{dans } \Omega$$

Remarque 5 Parfois, l'opérateur d'extraction peut être difficile à obtenir. Pour des quantités locales telles que la composante d'un déplacement (i.e. la k -ième composante de \mathbf{u}), la quantité d'intérêt peut être écrite :

$$q(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{u} \, d\Omega$$

où \mathbf{f}_k est définie par : $(\mathbf{f}_k)_i = \delta_{ik}$ (où δ_{ik} est le symbole de Kronecker). Dans ce cas, l'équation d'équilibre (2.25) du problème adjoint s'écrit simplement :

$$\int_{\Omega} p_\sigma : \varepsilon(\mathbf{v}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{v} \, d\Omega$$

Le problème adjoint est alors très similaire au problème de référence : seul le chargement et les conditions aux limites sont différents.

Sous une formulation faible en déplacement, le problème adjoint associé à la quantité d'intérêt $q(\mathbf{u})$ s'écrit :

Trouver $\mathbf{p} \in \mathcal{V}^0$ tel que :

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{p}) = q(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.26)$$

La solution exacte de ce problème est notée \mathbf{p}_{ex} et on note \mathbf{p}_h une solution approchée. L'erreur pour ce problème adjoint est défini comme $\varepsilon^p = \mathbf{p}_{ex} - \mathbf{p}_h$.

Rappelons que le problème de référence (ou primal) est :

Trouver $\mathbf{u} \in \mathcal{V}$ tel que :

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0$$

En notant \mathbf{u}_{ex} , la solution exacte de ce problème et \mathbf{u}_h la solution approchée, l'erreur globale est notée $e^u = \mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_h$.

2.4.3.3 Estimation de l'erreur locale

Dans le cas d'une quantité d'intérêt linéaire, on peut écrire :

$$\eta = q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h) = q(\mathbf{e}^u)$$

L'introduction du problème adjoint permet d'obtenir le résultat suivant :

$$\begin{aligned} \eta = q(\mathbf{e}^u) &= a(\mathbf{e}^u, \mathbf{p}_{ex}) \quad ((2.26) \text{ en prenant } \mathbf{v} = \mathbf{e}^u) \\ &= \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_{ex}) \quad (c.f. (2.18)) \end{aligned}$$

Ainsi, si le problème adjoint est résolu "parfaitement", l'estimation d'erreur est exacte au sens où elle donne l'erreur vraie. En pratique, le problème adjoint est aussi résolu de manière approchée et nous pouvons réécrire le résultat précédent comme :

$$\begin{aligned} \eta &= \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_{ex}) \\ &= \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_h) + \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_{ex} - \mathbf{p}_h) \end{aligned}$$

Dès lors, deux stratégies peuvent être employées :

1. le problème adjoint est résolu avec suffisamment de précision (*i.e.* $\|\mathbf{p}_{ex} - \mathbf{p}_h\| \ll \|\mathbf{p}_h\|$) : le second terme peut alors être négligé et l'erreur est estimée par $\eta \approx \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_h)$,
2. le problème adjoint est approché, en utilisant par exemple la même discrétisation spatiale que pour approcher \mathbf{u}_h . Dans ce cas, comme le second terme $\mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_{ex} - \mathbf{p}_h)$ ne peut être évalué, il est nécessaire de l'encadrer par des bornes. Des techniques d'encadrement sont données à titre d'information dans la suite de la section.

Dans le second cas, lorsque le problème adjoint est résolu avec la même discrétisation spatiale que pour l'approximation du problème primal, nous avons $\mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_h) = 0$ et on peut écrire :

$$q(\mathbf{e}^u) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_h) + \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\varepsilon}^p) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\varepsilon}^p)$$

Comme $\mathcal{R}(\mathbf{u}_{ex}, \boldsymbol{\varepsilon}^p) = 0$, on a :

$$|q(\mathbf{e}^u)| = \mathcal{R}(\mathbf{e}^u, \boldsymbol{\varepsilon}^p)$$

En utilisant l'orthogonalité (2.22) et l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient :

$$\begin{aligned} |q(\mathbf{e}^u)| &= a(\mathbf{e}^u, \boldsymbol{\varepsilon}^p) \quad \text{en utilisant l'équation (2.18)} \\ &\leq \|\mathbf{e}^u\|_{\mathbf{K}, \Omega} \|\boldsymbol{\varepsilon}^p\|_{\mathbf{K}, \Omega} \end{aligned}$$

Une borne supérieure peut alors être obtenue en utilisant les techniques d'estimation d'erreur globale. Le calcul de cette borne peut être assez facilement implanté dans les codes éléments finis possédant déjà des outils d'estimation d'erreur globale. Il existe d'autres techniques permettant d'obtenir des bornes inférieures et supérieures de l'erreur η (*c.f.* *e.g.* [Prudhomme et Oden, 1999]).

2.4.4 Concept d'erreur de modèle

Dans tout ce qui précède, seule l'erreur de discrétisation a été prise en compte. Nous étendons dans cette partie l'estimation d'erreur à la notion d'erreur de modèle. Nous supposons pour cela qu'une hiérarchie de modèles mathématiques peut être identifiée (voir figure 2.12). Le plus fin est supposé suffisamment précis pour capter et représenter efficacement la quantité d'intérêt. En pratique, ce modèle fin est trop complexe pour être directement utilisé et des modèles plus grossiers, dérivant du premier, sont donc considérés. Ces modèles sont par la suite approchés en utilisant diverses techniques. L'erreur induite sur l'évaluation de la quantité d'intérêt peut alors être divisée en deux contributions : l'erreur de discrétisation (due aux techniques de discrétisations utilisées pour résoudre les modèles grossiers) et l'erreur de modèle (due à l'utilisation des représentations grossières du modèle fin initial).

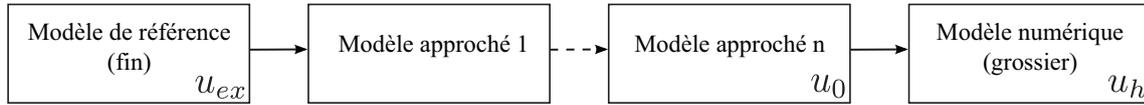


FIGURE 2.12 – Décomposition du processus d'approximation.

2.4.4.1 Erreur globale de modèle

Comme nous l'avons vu, la première erreur, dite de discrétisation, est étudiée depuis plus de trente ans alors que l'étude de la seconde erreur est plus récente. Elle a notamment été étudiée dans le cas des plaques et des coques en élasticité tridimensionnelle [Destuynder, 1986, Ainsworth, 1998, Cho et Oden, 1996]. Nous pouvons aussi citer les travaux d'Oden et de son équipe [Oden et Zohdi, 1997, Zohdi *et al.*, 1996] pour des estimations globales de cette erreur. On étudie le problème de référence décrit par l'équation (2.17). Afin d'approcher la solution exacte \mathbf{u}_{ex} , le problème de référence est approché par le suivant :

Trouver $\mathbf{u}_0 \in \mathcal{V}_0$ tel que :

$$a_0(\mathbf{u}_0, \mathbf{v}) = \ell_0(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0$$

où \mathcal{V}_0 est l'espace des déplacements admissibles. La solution exacte de ce problème est notée \mathbf{u}_0 . En pratique cette solution est approchée en utilisant la MEF par exemple et nous notons \mathbf{u}_h la solution approchée.

L'erreur globale peut être majorée par la somme de deux erreurs comme suit :

$$\|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_h\|_{\mathcal{V}} \leq \|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_0\|_{\mathcal{V}} + \|\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_h\|_{\mathcal{V}}$$

où $\|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_0\|_{\mathcal{V}}$ et $\|\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_h\|_{\mathcal{V}}$ désignent respectivement l'erreur de modèle et l'erreur de discrétisation. Dans certains cadres, il est alors possible d'obtenir directement un encadrement de $\|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_0\|_{\mathcal{V}}$. C'est notamment le cas pour l'étude de l'équilibre d'une structure hétérogène sous un chargement général lorsqu'un modèle homogénéisé est utilisé pour approcher le problème scalaire de référence décrit par les travaux des efforts intérieurs et extérieurs [Oden et Zohdi, 1997] :

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \mathbb{K} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega$$

$$\ell(v) = \int_{\Omega} f v \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} t v \, d\Gamma$$

où f et t sont des efforts distribués, et où les propriétés matériau sont caractérisées par le tenseur \mathbf{K} . Le modèle approché est, quant à lui, décrit par les travaux :

$$\ell_0(v) = \int_{\Omega} f v \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} t v \, d\Gamma$$

et

$$a_0(u_0, v) = \int_{\Omega} \mathbb{K}_0 \nabla u_0 \cdot \nabla v \, d\Omega$$

où \mathbb{K}_0 désigne l'homogénéisé de \mathbb{K} . En définissant, $\mathbb{I}_0 = (\mathbb{I} - \mathbb{K}^{-1}\mathbb{K}_0)$ (où \mathbb{I} est le tenseur identité), il est montré dans ce cas que [Oden et Zohdi, 1997, Oden et Vemaganti, 2000, Zohdi *et al.*, 1996] :

$$\zeta_{inf} \leq \|u_{ex} - u_0\|_{\mathcal{V}} \leq \zeta_{sup} \quad (2.27)$$

avec

$$\zeta_{inf} = \frac{|\mathcal{R}(u_0, u_0)|}{\|u_0\|_{\mathcal{V}}}$$

et

$$\zeta_{sup} = \|\mathbb{I}_0 \nabla u_0\|_{\mathcal{V}}$$

2.4.4.2 Erreur de modèle pour l'évaluation de quantité d'intérêt

Ce n'est que plus récemment encore que l'erreur de modèle pour l'évaluation des quantités d'intérêt a été étudiée dans des cas variés comme des matériaux hétérogènes [Oden et Vemaganti, 2000, Vemaganti et Oden, 2001], des problèmes visco-élastiques [Oden et Prudhomme, 2002] ou encore pour un écoulement incompressible [Oden et Prudhomme, 2002]. En reprenant le problème précédent, pour contrôler l'erreur $\eta = q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_h)$ relative à l'évaluation de la quantité d'intérêt $q(\cdot)$, l'erreur est décomposée en deux contributions :

$$\eta = [q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0)] + [q(\mathbf{u}_0) - q(\mathbf{u}_h)] = \eta_m + \eta_h$$

où η_m donne une estimation de l'erreur de modèle et η_h une estimation de l'erreur de discrétisation. Nous nous intéressons ici plus particulièrement à l'erreur de modèle η_m . En suivant la démarche proposée dans la section précédente, le problème adjoint général est introduit :

Trouver $\mathbf{p} \in \mathcal{V}^0$ tel que :

$$a'(\mathbf{u}; \mathbf{v}, \mathbf{p}) = q'(\mathbf{u}; \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \quad (2.28)$$

où a' et q' sont les dérivées au sens de Gâteaux de a et q , définies respectivement par $a'(\mathbf{u}; \mathbf{v}, \mathbf{p}) = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} (a(\mathbf{u} + t\mathbf{v}, \mathbf{p}) - a(\mathbf{u}, \mathbf{p}))$ et $q'(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} (q(\mathbf{u} + t\mathbf{v}) - q(\mathbf{u}))$. Par extension, on définit les dérivées d'ordres supérieurs comme $q''(\mathbf{u}; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} (q'(\mathbf{u} + t\mathbf{v}_2; \mathbf{v}_1) - q'(\mathbf{u}; \mathbf{v}_1)) \dots$ La solution exacte de ce problème est notée \mathbf{p}_{ex} .

Comme pour l'équation (2.17), ce problème est approché par un modèle plus simple :

Trouver $\mathbf{p} \in \mathcal{V}_0^0$ tel que :

$$a'_0(\mathbf{u}; \mathbf{v}, \mathbf{p}) = q'(\mathbf{u}; \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0^0$$

La solution de ce problème est notée \mathbf{p}_0 .

Avec les notations proposées, on peut alors quantifier comment les solutions $(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0)$ vérifient respectivement les équations (2.17) et. (2.28).

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{v}) &= \ell(\mathbf{v}) - a(\mathbf{u}_0, \mathbf{v}), & \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0 \\ \bar{\mathcal{R}}(\mathbf{p}_0, \mathbf{u}_0; \mathbf{v}) &= q'(\mathbf{u}_0; \mathbf{v}) - a'(\mathbf{u}_0; \mathbf{v}, \mathbf{p}_0), & \mathbf{v} \in \mathcal{V}^0\end{aligned}$$

En définissant $\mathbf{e}_0 = \mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_0$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_0 = \mathbf{p}_{ex} - \mathbf{p}_0$, l'erreur de modèle s'écrit :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0) + \frac{1}{2} (\mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) + \bar{\mathcal{R}}(\mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0)) + r(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) \quad (2.29)$$

où le terme $r(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0)$ est du second ordre par rapport à \mathbf{e}_0 et $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ [Oden et Prudhomme, 2002, Bauman *et al.*, 2009, Prudhomme *et al.*, 2006, Prudhomme *et al.*, 2009] :

$$r(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) = \frac{1}{2} \int_0^1 \{q'''(\mathbf{u}_0 + s\mathbf{e}_0; \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_0) - 3a''(\mathbf{u}_0 + s\mathbf{e}_0; \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) - a'''(\mathbf{u}_0 + s\mathbf{e}_0; \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_0, \mathbf{p}_0 + s\boldsymbol{\varepsilon}_0)\}(s-1)ds$$

En exprimant le résidu $\bar{\mathcal{R}}$ en fonction de celui de \mathcal{R} , l'erreur peut se ré-écrire :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0) + \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) + \frac{1}{2} \Delta \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) + r(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) \quad (2.30)$$

ou encore :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}) + \frac{1}{2} \Delta \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) + r(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) \quad (2.31)$$

où $\Delta \mathcal{R}$ est un terme du second ordre en $(\mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0)$:

$$\Delta \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0) = \int_0^1 a''(\mathbf{u}_0 + s\mathbf{e}_0; \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_0, \mathbf{p}_0 + s\boldsymbol{\varepsilon}_0)ds - \int_0^1 q''(\mathbf{u}_0 + s\mathbf{e}_0; \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_0)ds$$

Seuls les termes s'exprimant par rapport à \mathbf{u}_0 et \mathbf{p}_0 peuvent être évalués. Comme dans la section 2.4.3 pour l'erreur de discrétisation, plusieurs stratégies peuvent être adoptées pour estimer $q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0)$. La première est de chercher à expliciter tous les termes de (2.31) afin d'obtenir des bornes de l'erreur $q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0)$. La seconde est de négliger, quand cela est possible, les termes du second ordre en $(\mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0)$. Enfin, une troisième stratégie consiste à résoudre le problème adjoint de manière fine afin de négliger les termes en $\boldsymbol{\varepsilon}_0$

Stratégie 1 : Obtention de bornes de l'erreur

Dans le cas du problème précédent [Oden et Vemaganti, 2000, Oden et Prudhomme, 2002, Romkes *et al.*, 2006], pour des quantités d'intérêts spécifiques, l'équation (2.29) peut s'écrire :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0) + a(\mathbf{e}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0)$$

Les auteurs proposent alors un encadrement de $q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0)$, notamment en utilisant les bornes de \mathbf{e}_0 et $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ donnés précédemment (2.27). Cependant, ces bornes peuvent être établies uniquement pour des cas particuliers de quantités d'intérêt et de problèmes (homogénéisation par exemple). Les autres techniques d'estimations consistent alors à négliger les termes dépendant de \mathbf{e}_0 et $\boldsymbol{\varepsilon}_0$.

Stratégie 2 : Termes du second ordre négligés

Dans [Oden et Prudhomme, 2002, Oden *et al.*, 2006] ou encore [Bauman *et al.*, 2009] dans le cas d'un couplage de modèle continu avec un modèle atomistique, les termes du second ordre des expressions (2.30) ou (2.31) sont négligés et l'erreur est estimée par :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0) \approx \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p})$$

Les auteurs dans [Bauman *et al.*, 2009] proposent alors de construire une suite de problèmes grossiers adjoints dont la solution p_0^k tend rapidement vers p pour évaluer l'erreur de modèle.

Stratégie 3 : Résolution fine du problème adjoint

La troisième stratégie consiste à résoudre le problème adjoint avec une précision suffisante et d'utiliser l'approximation de l'erreur de modèle :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0) \approx \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0) + \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0)$$

Le problème adjoint est résolu sur un modèle plus fin que le modèle primal mais encore bien plus grossier qu'un modèle fin de référence afin de négliger le second terme $\mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0)$ (voir [Prudhomme *et al.*, 2006, Prudhomme *et al.*, 2009] pour des problèmes atomistiques). L'erreur de modèle est alors estimée par :

$$q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_0) \approx \mathcal{R}(\mathbf{u}_0, \mathbf{p}_0)$$

Séparation des sources de l'erreur

L'estimation de l'erreur de modèle et de l'erreur de discrétisation peut se faire séparément sans coût supplémentaire important. Dans [Oden *et al.*, 2005], les auteurs proposent une séparation des sources d'erreur pour l'évaluation d'une quantité d'intérêt en distinguant l'erreur de modélisation, l'erreur de discrétisation et l'erreur d'incertitude. Les deux premières erreurs sont estimées en suivant la démarche préalablement proposée dans ce chapitre alors que l'erreur d'incertitude est obtenue par la théorie des perturbations du premier ordre. Les travaux présentés dans [Ladevèze et Chamoin, 2011], concernant la vérification de modèles réduits utilisant la Décomposition Généralisée Propre (PGD), proposent l'introduction de modèle intermédiaire pour séparer l'erreur de discrétisation spatio-temporelle de l'erreur de modèle. Dès lors, l'erreur globale est décomposée suivant deux sources :

$$\|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_{hm}\|_{\mathcal{V}}^2 = \|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_h\|_{\mathcal{V}}^2 + \|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{hm}\|_{\mathcal{V}}^2$$

où \mathbf{u}_{hm} est l'approximation de \mathbf{u}_{ex} après discrétisation spatio-temporelle et réduction par la méthode PGD, alors que \mathbf{u}_h désigne la solution après discrétisation seule. Ainsi, $\|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_h\|_{\mathcal{V}}$ représente l'erreur de discrétisation et $\|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{hm}\|_{\mathcal{V}}$ l'erreur de modèle. Les auteurs utilisent l'erreur en relation de comportement pour évaluer $\|\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}_{hm}\|_{\mathcal{V}}$, mais aussi $\|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{hm}\|_{\mathcal{V}}$, l'erreur liée à la discrétisation étant ensuite obtenue par différence.

Dans les travaux de ce doctorat, la méthode Arlequin est utilisée pour approcher un modèle stochastique fin. Cette méthode est appliquée pour évaluer une quantité d'intérêt locale dont la zone d'influence est incluse dans le patch Arlequin. En plus de contrôler la discrétisation suivant la dimension spatiale et stochastique, l'idée est d'optimiser la taille du patch utilisé. Les techniques décrites précédemment inspireront une démarche particulière pour optimiser les outils de la méthode Arlequin dans le cadre d'une évaluation d'une quantité spécifique. Cette approche sera basée sur une séparation des sources des erreurs et une estimation de celles-ci (voir chapitre 4).

Couplage stochastique par la méthode Arlequin

Ce chapitre donne les ingrédients nécessaires à l'utilisation de la méthode Arlequin dans le cadre du couplage d'un modèle déterministe continu avec un modèle stochastique continu. Le problème Arlequin résultant est discrétisé suivant ses dimensions stochastique et spatiale. Des exemples directs d'utilisation, dans lesquels les solutions obtenues par la méthode proposée sont comparées aux solutions obtenues par un mono-modèle, sont présentés en fin de chapitre.

Sommaire

3.1 Problèmes stochastiques continu et discret	42
3.1.1 Rappel du problème stochastique continu	42
3.1.2 Existence et unicité de la solution	43
3.1.3 Approximation du problème de référence	43
3.1.4 Solvabilité pratique du modèle de référence	45
3.2 Spécificité du couplage stochastique	45
3.2.1 Formulation Arlequin du problème couplé	45
3.2.2 Opérateur et espace de couplage	47
3.2.3 Stabilité de la formulation continue	48
3.3 Approximation numérique du problème couplé	49
3.3.1 Discrétisation spatiale	49
3.3.2 Discrétisation stochastique par la méthode de Monte Carlo	51
3.3.3 Stabilité de la formulation discrète	52
3.4 Exemples simples d'utilisation	53
3.4.1 Problème 1D sans défaut	54
3.4.2 Problème 1D avec défaut	57
3.4.3 Problème 2D	59
3.5 Bilan sur le couplage par la méthode Arlequin	73

3.1 Problèmes stochastiques continu et discret

3.1.1 Rappel du problème stochastique continu

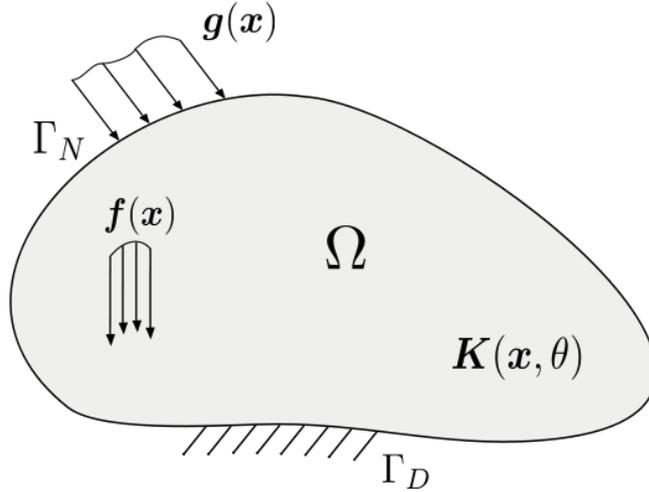


FIGURE 3.1 – Mono-modèle stochastique de référence avec caractéristiques matériau aléatoires.

Le problème stochastique de référence (figure 3.1) décrit dans la section 2.1 du chapitre 2 consiste à chercher $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta)$ tel que :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta)) + \mathbf{f}(\mathbf{x}) &= 0, \\ \text{presque partout (p.p.) et presque sûrement (p.s.)} \end{aligned}$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{u} = 0, & \text{p.p. sur } \Gamma_D \text{ et p.s.} \\ \mathbf{K} \nabla_s \mathbf{u} \mathbf{n} = \mathbf{g} & \text{p.p. sur } \Gamma_N \text{ et p.s.} \end{cases}$$

où \mathbf{n} désigne le vecteur unitaire normal à l'interface Γ_N , extérieur à Ω .

Nous définissons l'espace fonctionnel des déplacements admissibles comme :

$$\mathcal{W} = \{ \mathbf{v} \in (\mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega)))^r, \mathbf{v} = 0 \text{ p.p. sur } \Gamma_D, \text{ et p.s.} \} \quad (3.1)$$

Nous munissons cet espace du produit scalaire $(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{\mathcal{W}} = \mathbb{E} [\int_{\Omega} \nabla_s \mathbf{u} : \nabla_s \mathbf{v} d\Omega]$, ainsi que de la norme associée $\|\mathbf{u}\|_{\mathcal{W}} = \sqrt{(\mathbf{u}, \mathbf{u})_{\mathcal{W}}}$. Nous rappelons que $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)$ vérifie qu'il existe $K_{min}, K_{max} \in]0, +\infty[$, tels que :

$$0 < K_{min} \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon} \leq \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{K} \boldsymbol{\varepsilon} \leq K_{max} \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon} < +\infty, \text{ p.p. et p.s.} \quad (3.2)$$

pour tout tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}$ symétrique d'ordre 2 non nul.

La formulation faible du problème s'écrit :

Trouver $\mathbf{u} \in \mathcal{W}$ tel que :

$$\mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathcal{L}(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W} \quad (3.3)$$

$\mathcal{A} : \mathcal{W} \times \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$ et $\mathcal{L} : \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$ désignant respectivement les travaux virtuels des forces intérieures et extérieures qui sont définies par :

$$\mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} \mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta) : \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Omega \right] \quad (3.4)$$

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Omega \right] + \mathbb{E} \left[\int_{\Gamma_N} \mathbf{g}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Gamma \right] \quad (3.5)$$

Remarque 6 *A des fins de clarté, nous avons pris des conditions de Dirichlet homogènes sur Γ_D et un chargement stochastique, sans restriction sur la méthode proposée ici. Dans le cas d'une condition non homogène comme $\mathbf{u} = \mathbf{u}_D \in (\mathcal{L}^2(\Gamma_N))^r$, nous pouvons nous ramener à la formulation donnée ici en utilisant un relèvement $\tilde{\mathbf{u}}_D$ de \mathbf{u}_D sur $(\mathcal{H}^1(\Omega))^r$ et chercher $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}_D \in \mathcal{W}$.*

3.1.2 Existence et unicité de la solution

Il est établi dans [Babuška *et al.*, 2004] que, sous les hypothèses classiques de régularité sur les données du problème (3.1-3.5) avec l'hypothèse (3.2), le problème (3.3) admet une solution unique que nous noterons \mathbf{u}_{ex} . Ce résultat est établi en utilisant le théorème de Lax-Milgram.

3.1.3 Approximation du problème de référence

Une approximation de \mathbf{u}_{ex} peut être obtenue en utilisant la Méthode des Éléments Finis Stochastiques (MEF-Sto) [Ghanem et Spanos, 2003, Babuška *et al.*, 2004, Stefanou, 2009], ou en utilisant une approche de Monte Carlo [Hammersley et Handscomb, 1975, Robert et Casella, 2004] associée à la MEF classique. Les différentes étapes d'utilisation de ces méthodes sont rappelées dans les sections suivantes.

3.1.3.1 Discrétisation par la méthode des Éléments Finis

Le domaine Ω est recouvert par à un maillage \mathcal{T} , composé d'éléments E_t (tétraèdres, hexaèdres (en 3D), triangles, quadrangles (en 2D)...). Ceci permet de définir un premier espace d'approximation EF :

$$\mathcal{V}^h = \{ \mathbf{v} \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^r, \mathbf{v}|_{E_t} \in (P_i(E_t))^r, \forall E_t \in \mathcal{T}, \mathbf{v} = 0 \text{ sur } \Gamma_D \}$$

composé de champs-vecteurs de polynômes de degré i définis sur chaque élément. En choisissant $\{\phi_{\mathbf{k}}\}_{1 \leq \mathbf{k} \leq N_h}$, N_h fonctions déterministes, formant une base de l'espace vectoriel \mathcal{V}^h , le déplacement s'écrit :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta) = \sum_{k=1}^{N_h} u_k(\theta) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (3.6)$$

Le problème discrétisé dans sa dimension spatiale s'écrit alors :

$$\mathbb{E} [[A(\theta)] [\mathbf{U}(\theta)]] = [\mathbf{F}] \quad (3.7)$$

où les coefficients de la matrice aléatoire $A(\theta)$ (de taille $N_h \times N_h$) sont donnés par $A_{ij} = \mathcal{A}(\phi_i, \phi_j)$, les composantes du vecteur déterministe \mathbf{F} (de taille N_h) sont donnés par $\mathbf{F}_i = \mathcal{L}(\phi_i)$, et où la k -ième composante du vecteur aléatoire $\mathbf{U}(\theta)$ (de taille N_h) est $u_k(\theta)$.

3.1.3.2 Discrétisation par la méthode des Éléments Finis Stochastiques

Pour résoudre le problème (3.7), une première méthode est de discrétiser $A(\theta)$ et $\mathbf{U}(\theta)$ selon la dimension stochastique en utilisant les Éléments Finis Stochastiques.

L'approche classique [Ghanem et Spanos, 2003] consiste à décomposer $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)$ par la méthode de Karhunen-Loeve [Karhunen, 1946, Loève, 1955, Lévy, 1992] en une somme de produits de fonctions spatiales connues par des variables aléatoires, et de développer ces dernières sur des polynômes du chaos. Les composantes du vecteur inconnu $\mathbf{U}(\theta)$ sont ensuite développées sur la même base de chaos polynomiaux. La base précédemment utilisée pour la discrétisation spatiale est complétée par un espace engendré par un ensemble de polynômes du chaos choisis de degré p : $\{\Gamma_l[\xi(\theta)]\}_{1 \leq l \leq N_\theta}$, où N_θ est le nombre d'éléments dans la base des polynômes, $\xi(\theta)$ un vecteur de variables aléatoires indépendantes données (dont le nombre dépend du problème considéré), et où Γ_l sont les polynômes de degré p correspondants [Soize et Ghanem, 2004]. Par exemple nous pouvons choisir les polynômes d'Hermite des variables aléatoires gaussiennes $\xi(\theta)$. Les inconnues nodales du déplacement sont ainsi décomposées sur cette base connue :

$$u_i(\theta) = \sum_{p=1}^{N_\theta} U_{ip} \Gamma_p(\xi(\theta)) \quad (3.8)$$

où $u_i(\theta)$ est la i -ème composante du vecteur $\mathbf{U}(\theta)$ et où U_{ip} sont les composantes déterministes inconnues à évaluer. Les coefficients stochastiques de $A(\theta)$ sont aussi exprimés dans la base $\{\Gamma_l[\xi(\theta)]\}_{1 \leq l \leq N_\theta}$ pour finalement obtenir le système déterministe suivant :

$$[A^{sp}] [\mathbf{U}^{sp}] = [\mathbf{F}^{sp}]$$

où \mathbf{U}^{sp} est de taille $N_h \times N_\theta$, et dont les composantes sont définies par l'équation (3.8). La matrice A^{sp} est définie par :

$$(A^{sp})_{ik,jl} = \sum_{p=1}^{N_\theta} c_{pkl} \int_{\Omega} \mathbf{K}_p(\mathbf{x}) \nabla_s \phi_i(\mathbf{x}) : \nabla_s \phi_j(\mathbf{x}) d\Omega$$

avec $c_{pkl} = \mathbb{E}[\Gamma_p(\xi(\theta))\Gamma_k(\xi(\theta))\Gamma_l(\xi(\theta))]$ et $\mathbf{K}_p(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)\Gamma_p(\xi(\theta))]$. La finesse de l'approximation de l'espace stochastique dépend du nombre et du type de germes $\xi(\theta)$, et de l'ordre des polynômes utilisés. Cette méthode transforme le problème discret initial en un problème dont la matrice à inverser est bien plus grande (de taille $(N_h \times N_\theta)^2$).

3.1.3.3 Méthode de Monte Carlo

Une autre manière de traiter la discrétisation suivant la dimension stochastique est d'utiliser la méthode de Monte Carlo [Hammersley et Handscomb, 1975, Robert et Casella, 2004, Binder et Heermann, 2010]. Elle consiste à construire $MC(\equiv N_\theta)$ réalisations de $A(\theta)$ définie dans (3.7) en suivant une loi de probabilité appropriée (loi Gamma, loi uniforme...) puis pour chaque réalisation, à résoudre un problème déterministe :

$$[A_{iMC}] [\mathbf{U}_{iMC}] = [\mathbf{F}] \quad (3.9)$$

où A_{iMC} représente une réalisation de $A(\theta)$ et où \mathbf{U}_{iMC} représente une réalisation de $\mathbf{U}(\theta)$ obtenue par inversion du système déterministe (3.9). Les moments statistiques de

$U(\theta)$ peuvent ensuite être évalués grâce aux réalisations U_{iMC} . Le théorème central limite assure la convergence de l'estimation de la moyenne avec un taux de $1/\sqrt{MC}$. De plus, comme les systèmes déterministes sont indépendants, le processus peut facilement être parallélisable. Cependant, cette technique donne de bonnes estimations seulement pour les moments d'ordre faible.

Son implémentation est facile puisqu'elle ne demande qu'une construction des réalisations de $A(\theta)$. La construction du système à inverser est quant à elle identique à celle effectuée en déterministe. Cette méthode permet ainsi de traiter un grand nombre de cas facilement.

3.1.4 Solvabilité pratique du modèle de référence

Pour obtenir une approximation précise de $\mathbf{u}_{e\mathbf{x}}$, c'est-à-dire de l'ensemble de ses lois marginales, ou des moments d'ordres élevés, un nombre important de degrés de liberté (nombre de germes conséquent pour les Éléments Finis Stochastiques) ou un temps de calcul conséquent (pour un grand nombre de tirages de Monte Carlo) peut être nécessaire [Robert et Casella, 2004].

L'utilisation des Éléments Finis Stochastiques conduit ainsi à l'inversion d'une très grande matrice (de taille $(N_h \times N_\theta)^2$) tandis que la méthode de Monte Carlo conduit à l'inversion d'un grand nombre de matrices de taille N_h^2 si nous voulons évaluer des moments d'ordre élevé. C'est pourquoi en pratique, nous ne chercherons pas à résoudre directement le problème de référence.

Afin de réduire la taille du problème, nous approchons le problème initial par un problème de taille réduite. Comme écrit ci-dessus, nous supposons que la modélisation stochastique du modèle est nécessaire uniquement proche de la zone dite d'intérêt dans laquelle nous souhaitons évaluer des quantités locales spécifiques, alors que le reste de la structure peut être modélisé par un problème déterministe homogénéisé. La méthode Arlequin est utilisée pour coupler les deux modèles.

3.2 Spécificité du couplage stochastique

3.2.1 Formulation Arlequin du problème couplé

Nous souhaitons réduire la taille du problème décrit par l'équation (3.3) en représentant globalement la structure par un modèle déterministe équivalent décrit sur $\Omega_d \equiv \Omega$ (le substrat) dont le comportement est décrit par un opérateur déterministe d'ordre 4 : \mathbf{K}_d , obtenu à partir de $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)$ par des techniques d'homogénéisation ; en superposant à Ω un patch dans une zone d'intérêt ou d'influence $\Omega_s \subset \Omega$ décrit par un modèle stochastique et dont le comportement reste décrit par l'opérateur stochastique $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)$ restreint sur Ω_s et noté $\mathbf{K}_s(\mathbf{x}, \theta)$. La méthode Arlequin assure la communication entre les deux modèles sous forme faible dans une zone Ω_c , construite à partir d'une partition du patch Ω_s en une zone libre Ω_f et une zone couplée Ω_c de mesure non-nulle ($\text{mes}(\Omega_c) > 0$) sous les hypothèses :

$$\Omega_f \cup \Omega_c = \Omega_s \quad (3.10)$$

$$\Omega_f \cap \Omega_c = \emptyset \quad (3.11)$$

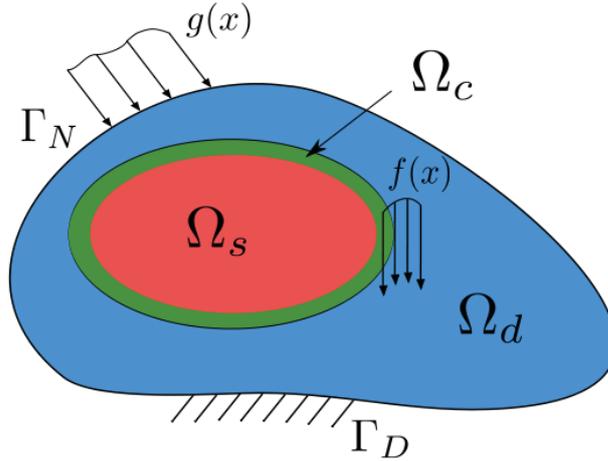


FIGURE 3.2 – Exemple de configuration de couplage stochastique par la méthode Arlequin. Ω_s (rouge et vert) superposé à Ω_d (bleu). Zone de couplage Ω_c en vert.

Nous définissons de plus les frontières $\Gamma_N^d = \Gamma_N \cap \partial\Omega_d$, $\Gamma_N^s = \Gamma_N \cap \partial\Omega_s$, $\Gamma_D^d = \Gamma_D \cap \partial\Omega_d$ et $\Gamma_D^s = \Gamma_D \cap \partial\Omega_s$. En notant les espaces fonctionnels :

$$\mathcal{V}_d = \left\{ \mathbf{v} \in (\mathcal{H}^1(\Omega_d))^r \mid \mathbf{v} = 0 \text{ sur } \Gamma_D^d \right\} \quad (3.12)$$

$$\mathcal{W}_s = \left\{ \mathbf{v} \in (\mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega_s)))^r \mid \mathbf{v} = 0 \text{ p.p. sur } \Gamma_D^s \text{ et p.s.} \right\} \quad (3.13)$$

le problème couplé Arlequin s'écrit :

Trouver $(\mathbf{u}_d, \mathbf{u}_s, \boldsymbol{\lambda})$ dans $\mathcal{V}_d \times \mathcal{W}_s \times \mathcal{W}_c$ tel que :

$$\begin{cases} a_d(\mathbf{u}_d, \mathbf{v}_d) + C(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}_d) = \ell_d(\mathbf{v}_d), & \forall \mathbf{v}_d \in \mathcal{V}_d \\ \mathcal{A}_s(\mathbf{u}_s, \mathbf{v}_s) - C(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}_s) = \mathcal{L}_s(\mathbf{v}_s), & \forall \mathbf{v}_s \in \mathcal{W}_s \\ C(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}_d - \mathbf{u}_s) = 0, & \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{W}_c \end{cases} \quad (3.14)$$

Les travaux virtuels des efforts intérieurs $a_d : \mathcal{V}_d \times \mathcal{V}_d \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathcal{A}_s : \mathcal{W}_s \times \mathcal{W}_s \rightarrow \mathbb{R}$, et ceux des efforts extérieurs $\ell_d : \mathcal{V}_d \rightarrow \mathbb{R}$ et $\mathcal{L}_s : \mathcal{W}_s \rightarrow \mathbb{R}$ s'écrivent, respectivement :

$$a_d(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_d} \alpha_d(\mathbf{x}) \mathbf{K}_d \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Omega$$

$$\mathcal{A}_s(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_s} \alpha_s(\mathbf{x}) \mathbf{K}_s(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta) : \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Omega \right]$$

et

$$\ell_d(\mathbf{v}) = \int_{\Omega_d} \beta_d(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Omega + \int_{\Gamma_N^d} \beta_d(\mathbf{x}) \mathbf{g}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\Gamma$$

$$\mathcal{L}_s(\mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_s} \beta_s(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Omega \right] + \mathbb{E} \left[\int_{\Gamma_N^s} \beta_s(\mathbf{x}) \mathbf{g}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, \theta) d\Gamma \right]$$

Les fonctions de pondération (α_d, α_s) (et (β_d, β_s)) respectent les mêmes conditions qu'en déterministe (2.12).

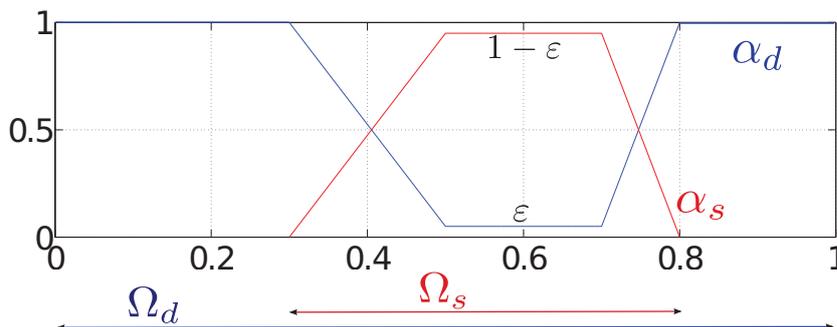


FIGURE 3.3 – Définition du paramètre de poids ε pour la distribution des énergies dans un problème 1D.

3.2.2 Opérateur et espace de couplage

La superposition de modèles dans la méthode Arlequin repose sur le dédoublement de la représentation des champs mécaniques et le contrôle, de manière faible dans un volume défini Ω_c , de l'écart entre ces représentants. Dans le cas du couplage déterministe-stochastique proposé ici, l'espace de couplage \mathcal{W}_c et l'opérateur de couplage C doivent être judicieusement choisis pour assurer une communication appropriée, au sens de la stabilité (section 3.2.3), entre deux champs évoluant dans des espaces fonctionnels différents.

En s'inspirant du couplage, dit énergétique, proposé dans le cas déterministe [Ben Dhia, 2008], il a été choisi d'utiliser comme opérateur de couplage $C : \mathcal{W}_c \times \mathcal{W}_c \rightarrow \mathbb{R}$ le produit scalaire de $\mathcal{W}_c \times \mathcal{W}_c$, défini par :

$$C(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_c} \kappa_0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \kappa_1 \nabla_s \mathbf{u} : \nabla_s \mathbf{v} d\Omega \right] \quad (3.15)$$

où les deux paramètres κ_0 et κ_1 ont pour but de rendre les deux termes de l'intégrale homogènes à des énergies. Nous munissons \mathcal{W}_c de la norme $\|u\|_{\mathcal{W}_c} = \sqrt{C(u, u)}$.

Plusieurs choix peuvent être envisagés pour l'espace de couplage (cf. [Ben Dhia et Rateau, 2001]). Nous pouvons, en particulier, considérer les deux choix pratiques suivants :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{c,1} &= (\mathcal{H}^1(\Omega_c))^r \\ \mathcal{W}_{c,2} &= \mathcal{L}^2(\Theta, (\mathcal{H}^1(\Omega_c))^r) \end{aligned}$$

Le premier choix permet un couplage simple et naturel des champs. En effet, injecter dans la troisième ligne de l'équation (3.14), en définissant l'opérateur $\underline{C} : \mathcal{W}_{c,1} \times \mathcal{W}_{c,1} \rightarrow \mathbb{R}$ par $\underline{C}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_c} \kappa_0 \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \kappa_1 \nabla_s \mathbf{u} : \nabla_s \mathbf{v} d\Omega$, ce premier choix permet d'écrire :

$$C(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}_d - \mathbf{u}_s) = \underline{C}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}_d - \mathbb{E}[\mathbf{u}_s])$$

qui traduit une égalité au sens faible du champ déterministe avec l'espérance du champ stochastique dans la zone de couplage. Avec cet espace de couplage, le couplage ne se fait que sur la partie déterministe (ou moyenne) des champs. Ce choix peut soulever la question de l'unicité de la solution du problème Arlequin.

Le second choix permet une description stochastique du champ médiateur $\boldsymbol{\lambda}$. Cependant, dans ce cas, nous nous rapprochons des considérations exprimées dans [Rateau, 2003], et ce couplage impose alors un verrouillage du champ \mathbf{u}_s sur le champ \mathbf{u}_d dans la zone Ω_c .

Finalement, la description du champ médiateur a été choisie en prenant l'espace de dimension la plus faible assurant la stabilité du problème mixte (cf. [Cottreanu *et al.*, 2010, Cottreanu *et al.*, 2011]). Cet espace intermédiaire entre $\mathcal{W}_{c,1}$ et $\mathcal{W}_{c,2}$ permet entre autres d'opérer une transition d'un champ dont la variabilité est forte à un champ dont la variabilité est nulle, à travers Ω_c . L'espace de couplage \mathcal{W}_c est composé de fonctions aléatoires, parfaitement corrélées en espace, et à moyenne non homogène :

$$\mathcal{W}_c = \left\{ \boldsymbol{\psi} + \sum_{i=1}^{n_c} \omega_i \boldsymbol{\psi}_i^c \mid \boldsymbol{\psi} \in (\mathcal{H}^1(\Omega_c))^r, \omega_i \in \mathcal{L}^2(\Theta), \boldsymbol{\psi}_i^c \in (\mathcal{H}^1(\Omega_c))^r, \nabla_s \boldsymbol{\psi}_i^c = 0 \right\} \quad (3.16)$$

où $\{\boldsymbol{\psi}_i^c\}$ avec $i \in [1..n_c]$ est une base du noyau de l'opérateur ∇_s défini par $\{\boldsymbol{\psi}^c \in (\mathcal{H}^1(\Omega_c))^r, \nabla_s \boldsymbol{\psi}^c = 0\}$ et que l'on note $\mathcal{N}(\nabla_s)$. En fonction de la dimension spatiale r de l'espace des déplacements admissibles \mathcal{W}_s , nous avons :

- en 1D : $r = 1$, le noyau est l'ensemble des fonctions constantes, alors $n_c = 1$ et $\boldsymbol{\psi}_1^c = \mathbb{I}_{\Omega_c}$ où \mathbb{I}_{Ω_c} est la fonction caractéristique de Ω_c ($\mathbb{I}_{\Omega_c}(\mathbf{x}) = 1$ si $\mathbf{x} \in \Omega_c$, et 0 sinon),
- en 2D : $r = 2$, le noyau est l'ensemble des mouvements de corps rigides (soit 2 translations et 1 rotation), alors $n_c = 3$,
- en 3D : $r = 3$, le noyau est l'ensemble des mouvements de corps rigides (soit 3 translations et 3 rotations), alors $n_c = 6$.

Dans la suite, nous notons $\boldsymbol{\omega}$ le vecteur aléatoire de taille n_c dont la i -ème composante est ω_i . La structure particulière de l'espace de couplage \mathcal{W}_c permet alors une ré-écriture de la troisième ligne de l'équation (3.14) :

$$\begin{aligned} C(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}_d - \mathbf{u}_s) &= \underline{C}(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{u}_d - \mathbb{E}[\mathbf{u}_s]) + \sum_{i=1}^{n_c} \mathbb{E} \left[\omega_i \int_{\Omega_c} \boldsymbol{\psi}_i^c(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_s) d\Omega \right] \\ &= 0, \forall (\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\omega}) \in (\mathcal{H}^1(\Omega_c))^r \times (\mathcal{L}^2(\Theta))^{n_c} \end{aligned}$$

Ce choix de structure pour l'espace \mathcal{W}_c correspond à imposer une continuité de l'espérance mathématique (avec le premier terme de l'équation), et à imposer une homogénéisation globale de la variabilité à l'intérieur de la zone de couplage (avec le second terme).

3.2.3 Stabilité de la formulation continue

L'existence et l'unicité de la solution du problème défini par (3.14), de type mixte, peuvent être montrées en suivant les développements de Ben Dhia et Rateau [Ben Dhia et Rateau, 2001] (cf. également [Ben Dhia, 2008] pour un cadre plus général) dans le cas de couplage Arlequin déterministe-déterministe; ces développements consistant à vérifier les hypothèses d'application du théorème de Brezzi [Brezzi, 1974] (inscrit dans l'esprit de la théorie de Babuška pour les problèmes mixtes). Pour cela, et afin de se rapprocher des notations utilisées par Brezzi, observons que le problème (3.14) peut s'écrire sous la forme :

Trouver $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \in \hat{\mathcal{V}} \times \mathcal{W}_c$ tel que :

$$\begin{cases} A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \hat{C}(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}) = L(\mathbf{v}), & \forall \mathbf{v} \in \hat{\mathcal{V}} \\ \hat{C}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}) = 0, & \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{W}_c \end{cases} \quad (3.17)$$

avec $\hat{\mathcal{V}} = \mathcal{V}_d \times \mathcal{W}_s$, $A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = a_d(\mathbf{u}_d, \mathbf{v}_d) + \mathcal{A}_s(\mathbf{u}_s, \mathbf{v}_s)$, $L(\mathbf{v}) = \ell_d(\mathbf{v}_d) + \mathcal{L}_s(\mathbf{v}_s)$, $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_d, \mathbf{u}_s) \in \hat{\mathcal{V}}$ et $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_d, \mathbf{v}_s) \in \hat{\mathcal{V}}$, et avec $\hat{C}(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}) = C(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}_d - \mathbf{v}_s)$. Le noyau de \hat{C} par

rapport à l'argument de droite est défini comme :

$$N_{\mathcal{W}_c}(\hat{C}) = \left\{ \mathbf{u} \in \hat{\mathcal{V}} \mid \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{W}_c, \hat{C}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}) = 0 \right\}$$

Nous pouvons alors établir que le problème Arlequin (3.17) couplant un modèle stochastique à un modèle déterministe est bien posé sous des hypothèses classiques de régularité des données. Tout en renvoyant pour les détails à [Ben Dhia et Rateau, 2001, Ben Dhia, 2008] (pour le couplage déterministe-déterministe dans le cadre de l'élasticité), ainsi qu'à [Cottreanu *et al.*, 2011] (pour le couplage stochastique-déterministe dans le cadre d'un opérateur de Laplace scalaire, *cf.* annexe A), nous nous contentons ici de mentionner les étapes de la démonstration. La linéarité de forme $L(\cdot)$ et la bilinéarité des formes A et \hat{C} étant triviales, en utilisant le caractère hilbertien des espaces fonctionnels considérés et grâce essentiellement à l'inégalité de Cauchy Schwarz, nous pouvons facilement établir la continuité de ces formes pour le problème considéré. Les deux points plus délicats à vérifier sont la coercivité de A dans $N_{\mathcal{W}_c}$ et la condition dite Inf-Sup. Or, avec les hypothèses considérées sur les données, les démonstrations de ces deux points suivent quasiment celles développées dans [Ben Dhia et Rateau, 2001]; l'enrichissement de l'espace médiateur \mathcal{W}_c par des champs stochastiques comme réalisé dans [Cottreanu *et al.*, 2011] ne servant qu'à supprimer les mouvements de solides rigides stochastiques infinitésimaux lorsque ces derniers sont admissibles pour le problème Arlequin considéré.

3.3 Approximation numérique du problème couplé

Comme pour le mono-modèle de référence, le problème Arlequin est un problème stochastique. Nous proposons dans cette section une méthode d'approximation de la solution $(\mathbf{u}_d, \mathbf{u}_s, \boldsymbol{\lambda})$ du problème (3.14). La discrétisation des dimensions spatiales est effectuée en utilisant la MEF, alors que la dimension stochastique est discrétisée en utilisant une approche de Monte Carlo.

3.3.1 Discrétisation spatiale

Les domaines Ω_d , Ω_s et Ω_c sont recouverts par les maillages \mathcal{T}_d , \mathcal{T}_s et \mathcal{T}_c , composés des éléments E_d , E_s et E_c respectivement (tétraèdres, hexaèdres (en 3D), triangles, quadrangles (en 2D)...). Nous définissons les premiers espaces d'approximations par :

$$\mathcal{V}_d^h = \left\{ \mathbf{v} \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^r, \mathbf{v}|_{E_d} \in (P_i(E_d))^r, \forall E_d \in \mathcal{T}_d, v = 0 \text{ sur } \Gamma_D^d \right\}$$

$$\mathcal{V}_s^h = \left\{ \mathbf{v} \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^r, \mathbf{v}|_{E_s} \in (P_i(E_s))^r, \forall E_s \in \mathcal{T}_s, v = 0 \text{ sur } \Gamma_D^s \right\}$$

et

$$\mathcal{V}_c^h = \left\{ \mathbf{v} \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^r, \mathbf{v}|_{E_c} \in (P_i(E_c))^r, \forall E_c \in \mathcal{T}_c \right\}$$

Ils sont composés de polynômes de degré i , définis sur chaque élément. En choisissant $\{\phi_{\mathbf{k}}^d\}$, $\{\phi_{\mathbf{k}}^s\}$ et $\{\phi_{\mathbf{k}}^c\}$ comme des bases des espaces vectoriels \mathcal{V}_d^h , \mathcal{V}_s^h et \mathcal{V}_c^h respectivement, nous définissons les matrices de rigidité des deux modèles, déterministe et stochastique, ainsi que celles de couplage par :

$$A_{d,ij} = \int_{\Omega_d} \alpha_d(\mathbf{x}) \mathbf{K}_d \nabla_s \phi_i^d(\mathbf{x}) : \nabla_s \phi_j^d(\mathbf{x}) d\Omega$$

$$\begin{aligned}
A_{s,ij}(\theta) &= \int_{\Omega_s} \alpha_s(\mathbf{x}) \mathbf{K}_s(\mathbf{x}, \theta) \nabla_s \phi_i^s(\mathbf{x}) : \nabla_s \phi_j^s(\mathbf{x}) d\Omega \\
C_{d,ij} &= \int_{\Omega_c} \kappa_0 \phi_i^d(\mathbf{x}) \cdot \phi_j^c(\mathbf{x}) + \kappa_1 \nabla_s \phi_i^d(\mathbf{x}) : \nabla_s \phi_j^c(\mathbf{x}) d\Omega \\
C_{s,ij} &= \int_{\Omega_c} \kappa_0 \phi_i^s(\mathbf{x}) \cdot \phi_j^c(\mathbf{x}) + \kappa_1 \nabla_s \phi_i^s(\mathbf{x}) : \nabla_s \phi_j^c(\mathbf{x}) d\Omega
\end{aligned}$$

et les matrices S_d et S_s par :

$$\begin{aligned}
S_{d,ij} &= \int_{\Omega_c} \kappa_0 \psi_j^c(\mathbf{x}) \cdot \phi_i^d(\mathbf{x}) d\Omega \\
S_{s,ij} &= \int_{\Omega_c} \kappa_0 \psi_j^c(\mathbf{x}) \cdot \phi_i^s(\mathbf{x}) d\Omega
\end{aligned}$$

La discrétisation de l'espace \mathcal{W}_c demande d'imposer une condition supplémentaire pour une discrétisation univoque. En effet, d'après la définition de l'espace \mathcal{W}_c , le noyau de l'opérateur ∇_s peut être décrit de plusieurs manières différentes totalement équivalente. Prenons, pour illustration, le cas d'un problème scalaire ($r = 1$). L'espace de couplage s'écrit $\mathcal{W}_c = \{\psi + \omega \mathbb{I}_{\Omega_c} \mid \psi \in \mathcal{H}^1(\Omega_c), \omega \in \mathcal{L}^2(\Theta)\}$. Le noyau de \mathcal{W}_c est constitué des fonctions constantes. Elles peuvent être décrites, soit en prenant ($\psi = 0, \omega = 1$) où $\omega = 1$ est la fonction Dirac suivant la dimension stochastique, soit en prenant ($\psi = \mathbb{I}(x), \omega = 0$). Afin de lever cette redondance, nous cherchons de plus à vérifier l'une des deux conditions suivantes :

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\omega}] = 0$$

soit

$$\int_{\Omega_c} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) d\Omega = 0 \quad (3.18)$$

Dans le cas d'une résolution par la technique de Monte Carlo, comme proposé dans la section 3.3.2, la première condition pose des difficultés car elle implique l'ensemble des réalisations. Nous choisissons de vérifier la condition (3.18). Cette condition est imposée par la méthode des lagrangiens et entraîne la définition du vecteur S_c , de coordonnées :

$$S_{c,Ii} = \int_{\Omega_c} \phi_{Ii}^c(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_i d\Omega$$

où le double indice Ii renvoie au degré de liberté associé au nœud I et à la direction \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_i étant un des vecteurs orthonormés formant une base de l'espace euclidien d'étude \mathbb{R}^r).

Le problème discrétisé peut s'écrire :

$$\mathbb{E} \left[\begin{bmatrix} A_d & 0 & C_d & S_d & 0 \\ 0 & A_s(\theta) & -C_s & -S_s & 0 \\ C_d^T & -C_s^T & 0 & 0 & S_c \\ S_d^T & -S_s^T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_c^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_d \\ \mathbf{U}_s(\theta) \\ \boldsymbol{\psi} \\ \boldsymbol{\omega}(\theta) \\ \boldsymbol{\Lambda} \end{bmatrix} \right] = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_d \\ \mathbf{F}_s \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

où les composantes des vecteurs \mathbf{F}_d et \mathbf{F}_s sont données par $F_{d,i} = \ell_d(\phi_i^d)$ et par $F_{s,i} = \mathcal{L}_s(\phi_i^s)$. \mathbf{U}_d , \mathbf{U}_s et $\boldsymbol{\psi}$ sont les composantes de \mathbf{u}_d , \mathbf{u}_s et de la partie déterministe de $\boldsymbol{\mu}$, exprimées dans les bases \mathcal{V}_d^h , \mathcal{V}_s^h et \mathcal{V}_c^h respectivement. Enfin, le vecteur $\boldsymbol{\Lambda}$ décrit les multiplicateurs de Lagrange utilisés pour assurer la condition (3.18). Dans ce système final, seuls A_s , \mathbf{U}_s et $\boldsymbol{\omega}$ sont des matrices (ou vecteurs) aléatoires.

3.3.2 Discrétisation stochastique par la méthode de Monte Carlo

Une manière de traiter la dimension stochastique est d'utiliser une technique de Monte Carlo. Cependant, elle ne peut pas être appliquée directement au système (3.19) comme pour le système (3.7). En effet, seuls A_s , \mathbf{U}_s et $\boldsymbol{\omega}$ sont aléatoires. Les champs déterministes ne dépendent pas que d'une réalisation mais de l'ensemble des réalisations. Dès lors, il est nécessaire de reformuler le problème discrétisé. Dans un premier temps, nous exprimons les champs déterministes en fonction des champs stochastiques inconnus \mathbf{U}_s et $\boldsymbol{\omega}$ pour obtenir un système du type :

$$\mathbb{E} \left[K^*(\theta) \begin{bmatrix} \mathbf{U}_s(\theta) \\ \boldsymbol{\omega}(\theta) \end{bmatrix} \right] = \mathbf{F}^* \quad (3.20)$$

où K^* et \mathbf{F}^* sont respectivement la matrice de rigidité condensée et le vecteur de force condensée. Dans un second temps, des réalisations de A_s permettent la résolution du problème condensé. Enfin, le troisième temps consiste à retourner au problème initial pour remonter aux champs déterministes.

Pour établir la condensation, nous ré-organisons le problème (3.9) :

$$\mathbb{E} \left[\begin{bmatrix} A_d & C_d & 0 & 0 & S_d \\ C_d^T & 0 & S_c & -C_s^T & 0 \\ 0 & S_c^T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -C_s & 0 & A_s(\theta) & -S_s \\ S_d^T & 0 & 0 & -S_s^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_d \\ \boldsymbol{\psi} \\ \boldsymbol{\Lambda} \\ \mathbf{U}_s(\theta) \\ \boldsymbol{\omega}(\theta) \end{bmatrix} \right] = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_d \\ 0 \\ 0 \\ \mathbf{F}_s \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

Nous exprimons, dans le cas où B_d , définie ci-dessous, est inversible, $\mathbf{V}_d = [\mathbf{U}_d^T \boldsymbol{\psi}^T \boldsymbol{\Lambda}^T]^T$ en fonction du reste :

$$\mathbf{V}_d = B_d^{-1} (\mathbf{F}_d^* - C^* \mathbb{E}[\mathbf{V}_s])$$

avec

$$B_d = \begin{bmatrix} A_d & C_d & 0 \\ C_d^T & 0 & S_c \\ 0 & S_c^T & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{F}_d^* = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_d \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$C^* = \begin{bmatrix} 0 & S_d \\ -C_s^T & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

et $\mathbf{V}_s = [\mathbf{U}_s^T \boldsymbol{\omega}^T]^T$.

En notant $\mathbf{F}_s^* = [\mathbf{F}_s^T \ 0]^T$ et

$$B_s = \begin{bmatrix} A_s & -S_s \\ -S_s^T & 0 \end{bmatrix}$$

la matrice condensée K^* et le vecteur force condensé \mathbf{F}^* de (3.20) s'écrivent :

$$K^* = B_s - C^{*T} B_d^{-1} C^* \quad (3.22)$$

et

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{F}_s^* - C^{*T} B_d^{-1} \mathbf{F}_d^* \quad (3.23)$$

Cette condensation fait intervenir une inversion de matrice. En pratique, cette matrice peut ne pas être inversible. C'est notamment le cas lorsqu'aucune condition de Dirichlet n'est imposée sur le modèle déterministe mais également plus généralement parce que les formes particulières de C_d et S_c autorisent des solutions \mathbf{V} non-nulles telles que $B_d \mathbf{V} = 0$. Le noyau de B_d et sa taille dépendent des dimensions considérées (à travers notamment la définition de S_d). Dans ces cas, une technique spéciale, comme dans la méthode FETI, est utilisée (voir par exemple [Farhat et Roux, 1991]). Revenons sur le problème initial défini par l'équation (3.21) :

$$\begin{cases} B_d \mathbf{V}_d + C^* \mathbf{E}[\mathbf{V}_s] = \mathbf{F}_d^* & \text{(a)} \\ C^{*T} \mathbf{V}_d + \mathbf{E}[B_s \mathbf{V}_s] = \mathbf{F}_s^* & \text{(b)} \end{cases} \quad (3.24)$$

Pour illustrer la méthode, nous supposons ici que la matrice B_d n'est pas inversible. Un degré de liberté additionnel $\boldsymbol{\delta}$, dont la taille dépend du noyau de B_d , est alors introduit pour décrire le noyau de la matrice. Nous avons alors :

$$\mathbf{V}_d = B_d^\dagger (\mathbf{F}_d^* - C^* \mathbf{E}[\mathbf{V}_s]) + R \mathbf{E}[\boldsymbol{\delta}] \quad (3.25)$$

où \dagger désigne un pseudo-inverse et où les colonnes de la matrice R forment une base du noyau de B_d . Physiquement, R représente une base du noyau de B_d et le vecteur $\boldsymbol{\delta}$ est une combinaison linéaire des vecteurs composant R . Comme B_d est symétrique, l'équation (3.24)(a) admet une solution au moins si le membre de droite ($\mathbf{F}_d^* - C^* \mathbf{E}[\mathbf{V}_s]$) est orthogonal au noyau de B_d . Cela permet d'écrire :

$$R^T (\mathbf{F}_d^* - C^* \mathbf{E}[\mathbf{V}_s]) = 0$$

Finalement, l'équation (3.20) peut être ré-écrite :

$$\mathbf{E} \left[\begin{bmatrix} K^* & C^{*T} R \\ R^T C^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_s \\ \boldsymbol{\omega} \\ \boldsymbol{\delta} \end{bmatrix} \right] = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_d^* \\ R^T \mathbf{F}_d^* \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

où K^* et \mathbf{F}_d^* sont maintenant définis en utilisant les pseudo-inverses des matrices concernées à partir des équations (3.22) et (3.23), respectivement.

Sous cette forme, le système défini par l'équation (3.26) peut alors être résolu en utilisant la technique de Monte Carlo. MC réalisations de $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)$ sont construites en suivant sa loi de probabilité qui est une donnée du problème. Plusieurs méthodes de simulation de processus ou de champs stochastiques comme $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \theta)$ existent. Dans tous les travaux proposés dans ce manuscrit, une méthode de représentation spectrale des champs [Shinozuka et Deodatis, 1991] a été choisie pour simuler ces réalisations. Ces réalisations permettent de reconstruire MC réalisations de A_s et le problème (3.26) est alors résolu pour chaque réalisation. Dès lors, un nombre suffisant [Hammersley et Handscomb, 1975, Robert et Casella, 2004, Binder et Heermann, 2010] de réalisations permet l'approximation des moments statistiques du vecteur solution $[\mathbf{U}_s^T \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\delta}^T]^T$. Le reste des inconnues $[\mathbf{U}_d^T \boldsymbol{\psi}^T \boldsymbol{\Lambda}^T]^T$ est alors évalué à partir de l'équation (3.25).

3.3.3 Stabilité de la formulation discrète

Comme pour la stabilité du problème continu, on peut établir l'existence et l'unicité d'une solution au problème Arlequin discret, défini ci-dessus, en suivant les développements

réalisés par Ben Dhia et Rateau [Ben Dhia et Rateau, 2001] pour un problème Arlequin mixte, couplant deux modèles déterministes (*cf.* également [Rateau, 2003] pour plus de détails).

3.4 Exemples simples d'utilisation

Cette section présente des exemples simples de couplage entre un modèle déterministe continu et un modèle stochastique continu.

1. L'exemple de la section 3.4.1 concerne l'étude d'un problème 1D dont l'espérance de la solution et de son gradient sont connues analytiquement. Le but est de comparer la solution obtenue par la méthode Arlequin avec la solution analytique, ainsi qu'avec la solution obtenue avec un mono-modèle stochastique. Deux séries de résultats sont présentées et comparées, pour deux choix possibles de discrétisation de Ω_c (en utilisant la discrétisation spatiale de Ω_d ou celle de Ω_s).
2. Le deuxième exemple, section 3.4.2, est semblable au premier problème, sans force distribuée, dans lequel nous avons introduit artificiellement un défaut. Ce défaut est modélisé par un affaiblissement de la rigidité locale de la structure. Il s'agit essentiellement, dans cet exemple, de montrer que la méthode Arlequin permet de représenter les effets de ce défaut localement lorsqu'un poids suffisant est donné au patch. Les résultats seront de nouveau comparés à la solution obtenue avec un mono-modèle.
3. Enfin, dans la section 3.4.3, un exemple 2D est donné pour montrer l'extension de la méthode décrite à un cas bidimensionnel. De même que pour le premier exemple, nous montrons les résultats obtenus avec une discrétisation de Ω_c basée sur celle de Ω_d ou Ω_s . Enfin, nous vérifions qu'en augmentant la taille du patch, et donc du modèle stochastique, la solution obtenue est meilleure, dans le sens où elle est plus proche de la solution obtenue par mono-modèle.

Dans tous ces exemples, les fonctions de pondérations (β_d, β_s) associées aux travaux des efforts extérieurs sont les mêmes que les fonctions (α_d, α_s) associées aux travaux des efforts intérieurs. Elles ont été choisies comme des fonctions linéaires. Sauf mention contraire, le poids ε (*cf.* figure 3.3) est fixé à 10^{-3} . Les paramètres κ_0 et κ_1 intervenant dans l'opérateur de couplage (3.15), sont ici choisis arbitrairement égaux à 1 et 10^{-3} , respectivement (*cf.* thèse de Nadia Elkhodja [Elkhodja, 2010], pour des choix plus physiques). Enfin, la dimension stochastique est traitée en utilisant la méthode de Monte Carlo. Tous ces choix ne constituent pas des restrictions de la méthode. Ils peuvent être différents.

L'optimisation de la méthode en terme de temps et de mémoire n'a pas été abordée durant ces travaux de doctorat. Nous renvoyons à deux thèses réalisées dans le laboratoire MSSMat sur ce sujet [Elkhodja, 2010, Touzeau, 2012]. Les différents paramètres des modèles utilisés sont choisis arbitrairement. Nous proposons dans la suite du manuscrit (chapitre 4) une méthode de choix des paramètres pour l'évaluation de quantités d'intérêt choisies.

Nous observons, pour tous les exemples, l'espérance d'une variable aléatoire u (en général déplacement ou gradient du déplacement), et l'intervalle de confiance à 90% défini par :

$$\text{IC} = \text{E}[u] \pm \frac{\sigma(u)}{\sqrt{1-0.9}}$$

où $\sigma(u)$ désigne l'écart-type de u . L'intervalle de confiance désigne le fait que la probabilité d'avoir $u(x, \theta)$ dans cette intervalle est de 0.9. Il symbolise la variabilité de la solution u dans la structure.

3.4.1 Problème 1D sans défaut

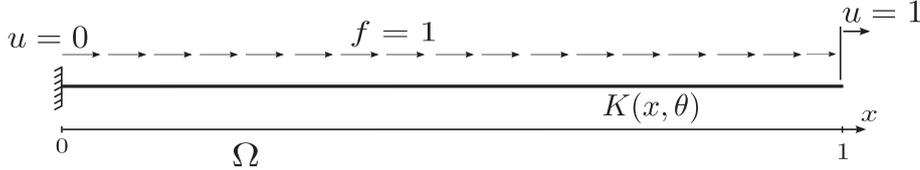


FIGURE 3.4 – Mono-modèle 1D stochastique de référence.

Nous considérons une barre de longueur unitaire soumise à un déplacement imposé et chargée par une force distribuée unitaire (figure 3.4). Le mono-modèle stochastique est contrôlé par un champ stochastique $K(x, \theta)$, modélisé par un champ suivant une loi marginale uniforme de bornes $[0.3013, 2.3601]$ (de moyenne arithmétique $E[K(x, \theta)] = 1.3307$ et de moyenne harmonique $1/E[1/K(x, \theta)] = 1$). Le champ $K(x, \theta)$ vérifie en outre les conditions (3.2). Le champ suit de plus un modèle de corrélation de type sinus cardinal au carré ($sinc^2$) avec une longueur de corrélation $L_{cor} = 10^{-2}$. Les fonctions de corrélation et de densité spectrale sont données dans la figure 3.5. La corrélation n'est fonction que de la distance entre les points considérés. La longueur de corrélation L_{cor} représente alors une distance limite au-delà de laquelle les valeurs locales de K peuvent être considérées décorrélées.

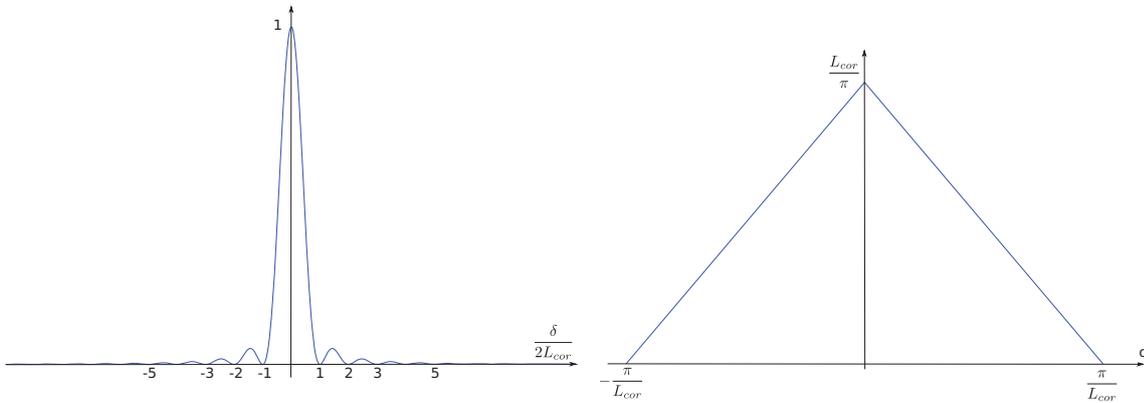


FIGURE 3.5 – Structure de corrélation choisie et densité spectrale associée.

Le champ de déplacement stochastique vérifie, p.p. et p.s. :

$$\frac{d}{dx} \left(K(x, \theta) \frac{du(x, \theta)}{dx} \right) + 1 = 0$$

avec les conditions de Dirichlet : $u(0, \theta) = 0$ et $u(1, \theta) = 1$, presque sûrement. La solution de ce problème mono-modèle s'écrit :

$$u(x, \theta) = \int_0^x \frac{K^* - x'}{K(x', \theta)} dx'$$

où K^* vérifie $1 = \int_0^1 \frac{K^* - x'}{K(x', \theta)} dx'$ p.s. .

Avec les paramètres précédents, et en considérant que $K^* \approx 1/\mathbb{E}[1/K(x, \theta)] = 1$, presque sûrement, (notamment car la longueur de corrélation est bien plus faible que la longueur totale de la barre), le champ de déplacement vérifie $\mathbb{E}[u] = x(3 - x)/x$, $\mathbb{E}[du/dx] = 3/2 - x$. La variance et d'autres moments statistiques peuvent être évalués numériquement (en utilisant la technique de Monte Carlo par exemple).

Dans les résultats suivants, les solutions numériques du mono-modèle sont validées par la solution analytique moyenne. L'espérance du déplacement $\mathbb{E}[u]$ ainsi que l'intervalle de confiance à 90% évalués à partir de 100 000 réalisations de $K(x, \theta)$ sont tracés en bleu dans la figure 3.7. Ce problème est approché par la méthode Arlequin (figure 3.6) dans laquelle nous superposons à un modèle déterministe un patch dans lequel le comportement est décrit par un modèle stochastique.

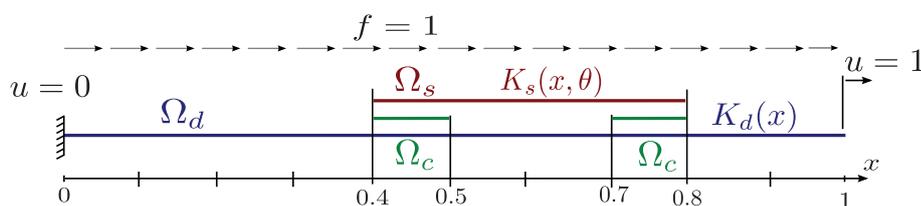


FIGURE 3.6 – Modèle approché en utilisant la méthode Arlequin.

Nous considérons un domaine $\Omega_d = [0, 1]$, un domaine $\Omega_s = [0.4, 0.8]$, et une zone de couplage $\Omega_c = [0.4, 0.5] \cup [0.7, 0.8]$. Le domaine Ω_d est discrétisé en utilisant 20 éléments de taille constante 0.05. Le domaine Ω_s est discrétisé par 200 éléments de taille constante 0.002. Dans cette section, l'espace de couplage \mathcal{W}_c défini par (3.16) est discrétisé spatialement avec le même maillage que Ω_s . La dimension stochastique est traitée par une approche de Monte Carlo, comme décrite dans la section 3.3.2 en utilisant 100 000 réalisations de $K_s(x, \theta)$.

Le déplacement u_d (sur le domaine $\Omega_d = [0, 1]$), le déplacement moyen $\mathbb{E}[u_s]$ (sur le domaine $\Omega_s = [0.4, 0.8]$) ainsi que l'intervalle de confiance à 90% correspondant sont tracés et comparés avec les résultats obtenus avec un mono-modèle stochastique dans la figure 3.7. Dans la zone de couplage $\Omega_c = [0.4, 0.5] \cup [0.7, 0.8]$, la solution déterministe u_d et le déplacement moyen $\mathbb{E}[u_s]$ sont bien superposés. Dans la zone libre du patch ($\Omega_f = [0.5, 0.7]$), les deux champs co-existent et nous observons bien de la variabilité sur u_s (exemple de réalisation en rouge).

Une remarque importante concerne la discrétisation spatiale de l'espace de couplage. En choisissant ici la même discrétisation que Ω_s (plus fine que celle de Ω_d), dans la zone de couplage, la description spatiale de u_s est bloquée sur le maillage grossier. Le gradient dans cette zone indique ce verrouillage. Il est défini sur les éléments fins, mais reste constant par élément grossier (comme $\frac{du_s}{dx}$), réalisation par réalisation (voir figure 3.7 bas). Pour éviter ce phénomène de verrouillage, une possibilité est d'utiliser un autre support de discrétisation pour \mathcal{W}_c , comme par exemple le maillage grossier (voir plus loin).

La comparaison avec la solution mono-modèle permet deux observations principales. La première est le fait que le champ déterministe u_d ne correspond pas sur toute la longueur à la moyenne de la solution mono-modèle $\mathbb{E}[u]$. En effet, u_d n'est pas la solution d'un problème déterministe seul. Ce champ est impacté par la présence du patch, qui propage l'information de variabilité locale à l'ensemble de la structure. Cependant, dans la zone libre du patch, l'écart relatif entre l'espérance du déplacement issu du mono-modèle et l'espérance du déplacement issu du modèle Arlequin est faible (moins de 0.5% d'écart

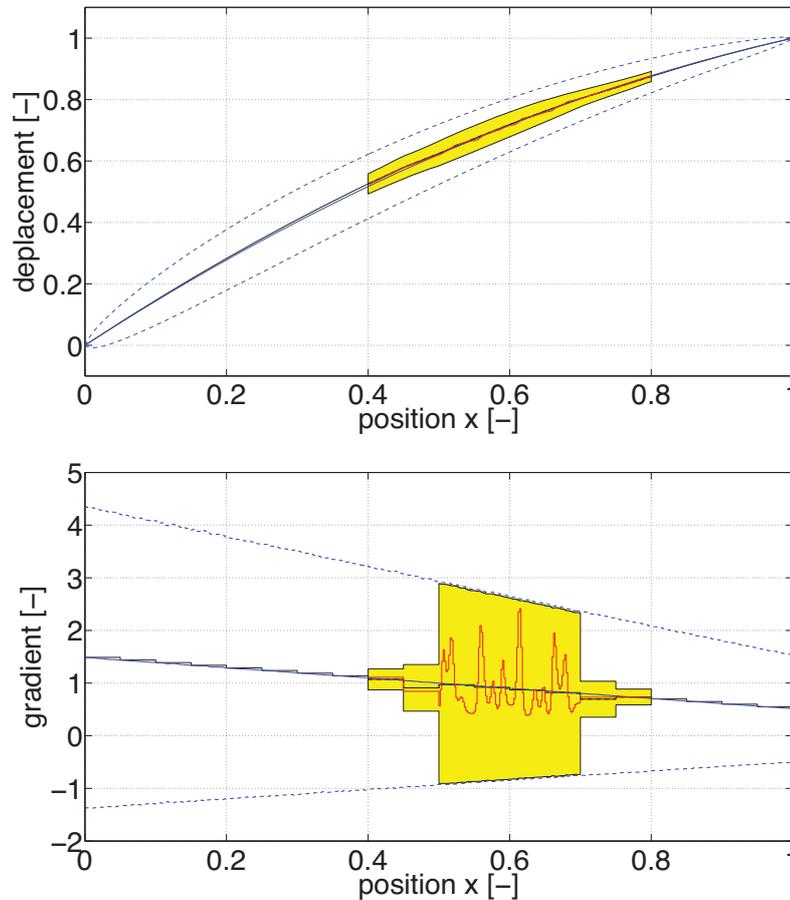


FIGURE 3.7 – Comparaison, en terme de déplacement (haut) et de gradient du déplacement (bas) de la solution Arlequin (u_d ou du_d/dx (ligne continue noire), $E[u_s]$ ou $E[du_s/dx]$ (tirets noirs), exemple de réalisation de u_s ou du_s/dx (ligne continue rouge), et intervalle de confiance à 90% sur u_s ou du_s/dx (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle ($E[u]$ ou $E[du/dx]$ (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% de u ou du/dx (tirets bleus)).

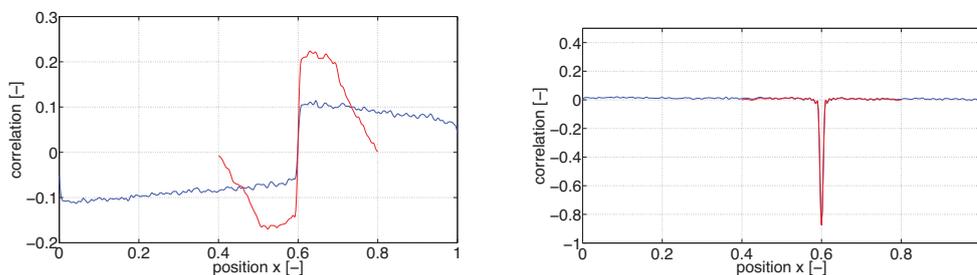


FIGURE 3.8 – Valeur de l'indice de corrélation entre le champ stochastique $K(x, \theta)$ en tous points et le déplacement évalué à $x = 0.6$ (figure de gauche) et le gradient évalué à $x = 0.6$ (figure de droite), pour le mono-modèle de référence en noir, et pour le modèle Arlequin en rouge.

relatif). De même, pour le gradient, l'écart relatif entre les gradients du déplacement mono-modèle et $E[du_s/dx]$ est inférieur à 0.5%.

La seconde observation concerne la variabilité de la solution obtenue. Il semblerait que même avec une taille de patch de 40% de la longueur totale, la variabilité du gradient est parfaitement reproduite par le modèle Arlequin (99% de l'intervalle de confiance de référence obtenu), alors que celle du déplacement beaucoup moins bien (moins de 35% de l'intervalle de confiance représenté avec la solution Arlequin). En premier élément d'analyse, nous étudions dans la figure 3.8 l'évolution de l'indice de corrélation de la solution avec le champ de propriété. A gauche est tracé l'indice de corrélation entre la valeur du déplacement $u(x = 0.6, \theta)$ issu du mono-modèle avec les valeurs de $K(x, \theta)$ en tous points, et entre $u_s(x = 0.6, \theta)$ issu du modèle Arlequin avec les valeurs de $K(x, \theta)$ en tous points ($K(x, \theta)$ n'étant alors défini que sur $[0.4, 0.8]$, la courbe est limitée à cet intervalle). La figure 3.8 de droite regroupe les corrélations entre les gradient en $x = 0.6$ et $K(x, \theta)$ en tous points. Nous observons que le gradient en $x = 0.6$ peut être vu comme une quantité locale dans le sens où elle n'est pas influencée par les variabilités de $K(x, \theta)$ en des points distants. Au contraire, ces variabilités impactent le déplacement en $x = 0.6$, même loin de cette position. Pour le cas du déplacement, le patch étant trop petit, l'influence de la variabilité de $K(x, \theta)$ pour les points en dehors du patch n'est pas prise en compte et explique l'écart des intervalles de confiance. Il semblerait donc que la méthode Arlequin est à même de reproduire les variabilités d'une quantité dès lors que le support de la fonction de corrélation entre l'origine des fluctuations (ici $K(x, \theta)$) et la quantité d'intérêt est relativement compact et incluse dans la zone libre du patch. Ainsi, la méthode est à même de reproduire des grandeurs locales spécifiques comme le gradient dans ce cas.

Dans le chapitre 4, nous nous intéresserons plus particulièrement à l'espérance et à la variance du gradient au milieu de la structure.

Changement du support de discrétisation pour Ω_c

L'espace de couplage \mathcal{W}_c est ici discrétisé spatialement avec le même maillage que Ω_d . Cela permet de laisser davantage de "liberté" à la solution stochastique dans l'espace de couplage. Le gradient du déplacement est donné dans la figure 3.9. La précision est sensiblement la même. Cependant, nous pouvons remarquer des valeurs élevées pour l'intervalle de confiance sur les bords du patch. Plus précisément, cet effet de bord apparait sur les éléments extrêmes du patch. En diminuant d'avantage la taille des éléments, la variabilité augmente. Pour l'instant, cet effet de bord n'a pas été étudié plus en détail. Cet effet de bord disparaît notamment si nous prenons des fonctions de pondération constantes dans la zone de couplage. Cet effet est lié à la faiblesse de la rigidité locale lorsque la taille des éléments est petite et que la fonction de pondération α_s tend vers une valeur faible proche du bord du patch.

3.4.2 Problème 1D avec défaut

La méthode Arlequin permet de représenter des défauts de structure sans avoir à remailler l'ensemble de la structure. Dans cet exemple, la méthode est testée pour représenter la solution lorsqu'un défaut est introduit dans le modèle précédent, sans force distribuée. Le défaut est modélisé par un affaiblissement du paramètre matériau $K(x, \theta)$ dans une zone définie par $x \in [0.45, 0.5]$. Dans cette zone, le module matériau K de l'exemple précédent est divisé par un facteur 10. La solution obtenue par un mono-modèle dans lequel le défaut apparait directement est donnée en bleu dans les figures 3.10 et 3.11.

En suivant la philosophie de la méthode Arlequin, le défaut n'est représenté que dans

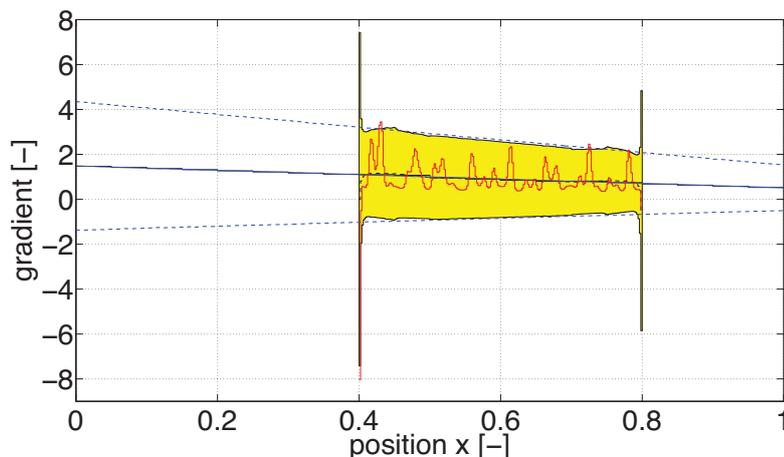


FIGURE 3.9 – Comparaison, en terme de gradient du déplacement de la solution Arlequin (du_d/dx (ligne continue noire), $E[du_s/dx]$ (tirets noirs), exemple de réalisation de du_s/dx (ligne continue rouge), et intervalle de confiance à 90% sur du_s/dx (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle ($E[du/dx]$ (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% de du/dx (tirets bleus)) (Ω_c est discrétisé avec le maillage grossier de Ω_d).

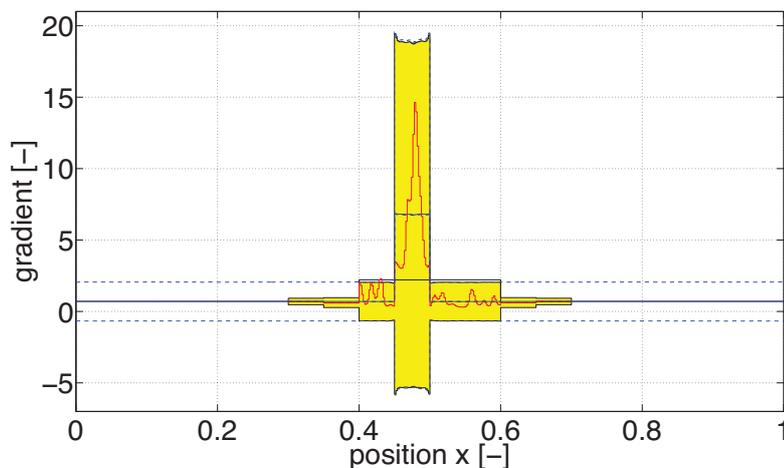


FIGURE 3.10 – Comparaison, en terme de gradient du déplacement de la solution Arlequin (du_d/dx (ligne continue noire), $E[du_s/dx]$ (tirets noirs), exemple de réalisation de du_s/dx (ligne continue rouge), et intervalle de confiance à 90% sur du_s/dx (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle ($E[du/dx]$ (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% de du/dx (tirets bleus)).

le patch, le substrat représentant le milieu sain. Le gradient du déplacement solution de la méthode Arlequin, ainsi que la comparaison avec le modèle de référence sont donnés dans la figure 3.10. Comme nous pouvons le constater, la méthode Arlequin permet d'introduire avec efficacité la présence du défaut, alors qu'il est uniquement modélisé dans le patch. L'écart relatif pour l'espérance du gradient du déplacement est en effet inférieur à 0.5% dans la zone libre du patch. Quand à la variabilité du gradient, elle est encore une fois parfaitement reproduite (plus de 99% de l'intervalle de confiance obtenu).

Si le poids donné au patch n'est pas assez important

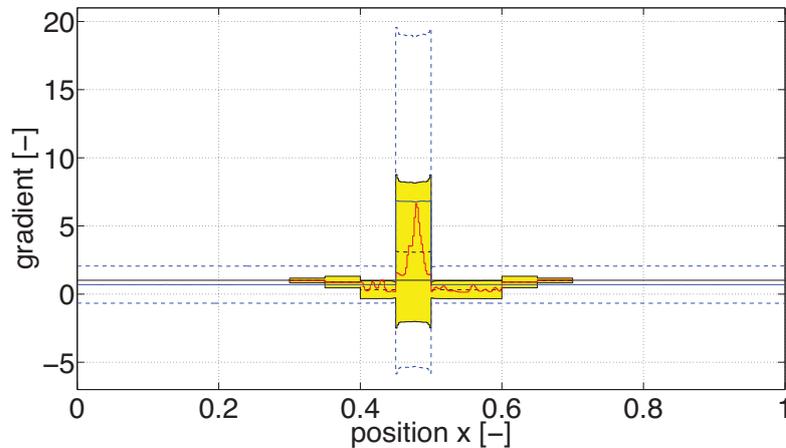


FIGURE 3.11 – Comparaison, en terme de gradient du déplacement de la solution Arlequin (du_d/dx (ligne continue noire), $E[du_s/dx]$ (tirets noirs), exemple de réalisation de du_s/dx (ligne continue rouge), et intervalle de confiance à 90% sur du_s/dx (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle ($E[du/dx]$ (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% de du/dx (tirets bleus)), lorsqu'un poids insuffisant est donné au patch.

A défaut, lorsque le poids accordé au modèle du patch n'est pas important (en prenant $\varepsilon = 0.999$ par exemple), nous remarquons que l'espérance et la variance de la solution de référence ne sont pas du tout retrouvées (voir figure 3.11). Nous constatons en effet un écart relatif de l'espérance du gradient de la solution de 55%. L'intervalle de confiance n'est quant à lui reproduit qu'à 42%. Cet exemple montre bien que lorsque l'énergie est mal distribuée entre les deux modèles superposés, la solution ne reproduit pas correctement le comportement voulu. Cette considération non spécifique au couplage stochastique a déjà été étudiée dans [Rateau, 2003].

3.4.3 Problème 2D

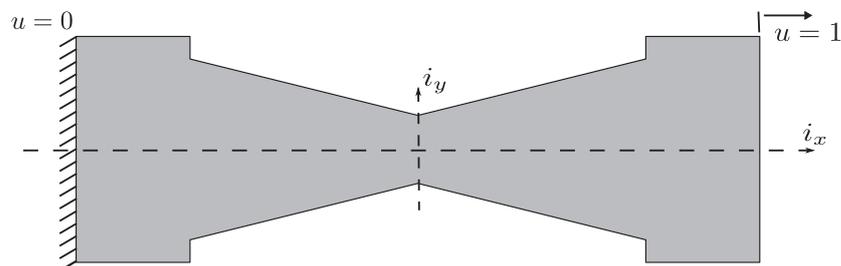


FIGURE 3.12 – Échantillon 2D de référence.

Dans cet exemple, nous étudions une structure hétérogène en traction (voir figure 3.12). La géométrie particulière de la structure entraîne une concentration de contrainte proche du centre de celle-ci. Afin de mieux étudier le comportement local proche de cette zone critique, le comportement est modélisé par un modèle stochastique. La structure occupe un domaine Ω inscrit dans une boîte $[-3, 3] \times [-1, 1]$. L'échantillon est soumis à des conditions

de Dirichlet ($u(x = -3, y, \theta) = 0, u(x = 3, y, \theta) = 1$ p.s.) et de Neumann ($\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$ p.s.) sur le reste des bords, sans force distribuée dans son volume. Les propriétés matériaux sont modélisées par un champ stochastique stationnaire $K(\mathbf{x}, \theta)$, suivant une loi marginale uniforme de bornes $[0.3542, 2.1938]$ (de moyenne géométrique $1/E[1/K(\mathbf{x}, \theta)] = 1$), et de corrélation du type sinc^2 avec une longueur de corrélation de $L_{cor} = 0.05$ dans chaque direction. Un exemple de réalisation du champ stochastique générée en suivant la méthode de Shinozuka [Shinozuka et Deodatis, 1991] est donné sur la figure 3.13. Le maillage utilisé est triangulaire et comporte 33 792 éléments dont le diamètre maximal du cercle inscrit est de 0.006.

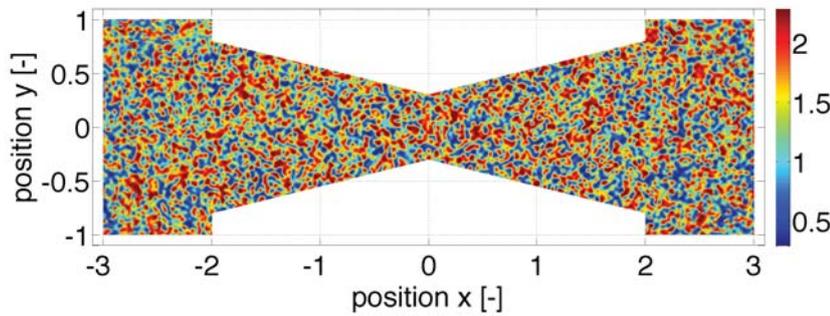


FIGURE 3.13 – Exemple d’une réalisation du champ $K(\mathbf{x}, \theta)$.

L’équilibre du mono-modèle associé s’écrit :

Trouver $u \in \mathcal{W}$ tel que, p.p. et p.s. :

$$E[\nabla \cdot (K(\mathbf{x}, \theta) \nabla u(\mathbf{x}, \theta))] = 0$$

Les solutions ont été évaluées en utilisant 5 000 réalisations de $K(\mathbf{x}, \theta)$. La figure 3.14 représente l’espérance de la solution u et de la norme de son gradient sur l’ensemble de la structure. La variance de la solution et de son gradient est représentée sur la figure 3.15.

La méthode Arlequin est utilisée pour approcher la solution du problème précédent en couplant un modèle déterministe décrit par une rigidité $K_d = 1$ avec un modèle stochastique décrit par une rigidité $K_s(\mathbf{x}, \theta) = K(\mathbf{x}, \theta)|_{\Omega_s}$. Le domaine substrat Ω_d recouvre l’ensemble du modèle alors que le patch décrit par le domaine Ω_s est centré sur la singularité géométrique et est défini par $\Omega_s = \Omega \cap \{(x, y) \mid x \in [-0.75, 0.75]\}$. La zone de couplage quant à elle occupe le domaine Ω_c tel que $\Omega_c = \Omega \cap \{(x, y) \mid x \in [-0.75, -0.45] \cup [0.45, 0.75]\}$. Le domaine Ω_d est discrétisé par 528 éléments (diamètre maximal du cercle inscrit : 0.3), alors que Ω_s est discrétisé par un maillage suffisamment fin pour représenter les variabilités de $K_s(\mathbf{x}, \theta)$, soit avec 12 160 éléments dont le diamètre maximal du cercle inscrit est de 0.006. De plus, nous choisissons comme dans l’exemple précédent de discrétiser la zone de couplage en utilisant le même maillage que le patch (restreint sur Ω_c). Une autre possibilité en utilisant la discrétisation grossière de Ω_d est discutée dans la suite. La dimension stochastique est traitée par une approche de Monte Carlo, comme décrite dans la section 3.3.2 en utilisant 5 000 réalisations de $K_s(\mathbf{x}, \theta)$ afin de pouvoir comparer la solution obtenue par la méthode Arlequin et la solution obtenue par le mono-modèle.

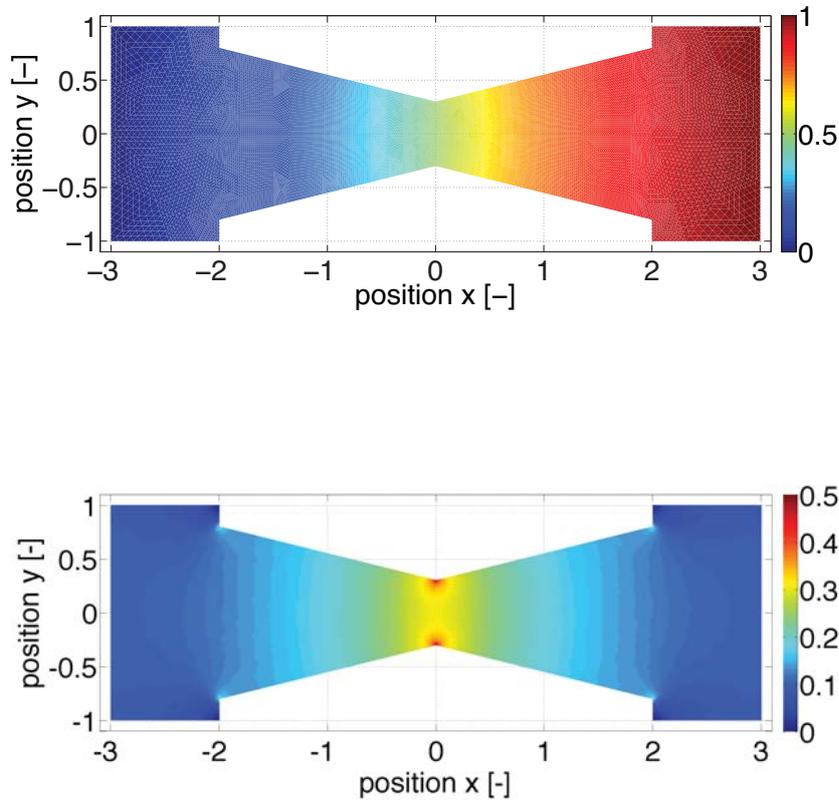


FIGURE 3.14 – Espérance du déplacement ($E[u]$) (haut) et espérance de la norme du gradient ($E[||\nabla u||]$) (bas) pour le mono-modèle 2D de référence.

Les figures 3.16 et 3.17 représentent u_d , l'espérance du champ stochastique $E[u_s]$, l'espérance de la norme du gradient associé et la variance (ou intervalle de confiance) sur l'ensemble de la structure. Des fluctuations parasites de l'espérance et de la variance de la norme du gradient sont visibles sur les figures. Nous les retrouvons sur la figure 3.19. Leur longueur de variation est plus faible que la longueur de corrélation. Ces fluctuations peuvent être réduites en diminuant d'avantage la taille des éléments localement par exemple.

Enfin, les figures 3.18 et 3.19 représentent la comparaison entre la solution obtenue par la méthode Arlequin, et la solution obtenue par mono-modèle. Les fluctuations parasites de l'espérance et de la variance de la norme du gradient, déjà visibles sur le mono-modèle sont de nouveaux présentes sur la solution Arlequin. Encore une fois, le maillage étant similaire dans cette zone au maillage du mono-modèle, ces fluctuations sont associées à un problème d'interpolation du gradient (qui est alors constant par élément). Elles ne sont pas liées à l'utilisation de la méthode Arlequin puisque nous retrouvons exactement les mêmes fluctuations sur la solution mono-modèle.

Les écarts relatifs des espérances du déplacement et de son gradient sont relativement faibles (moins de 0.2% d'écart pour le déplacement et moins de 6% d'écart pour son gradient suivant l'axe y , et moins de 8% d'écart pour le déplacement et pour son gradient suivant l'axe x). La variabilité du déplacement n'est pas représentée par la solution Arlequin,

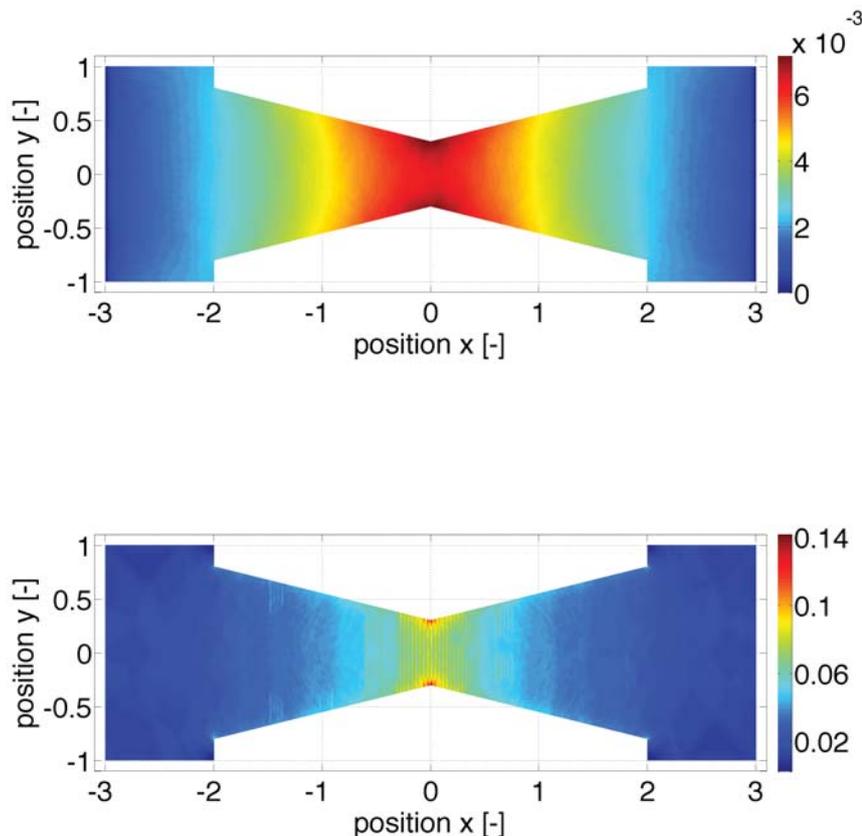


FIGURE 3.15 – Variance du déplacement ($\text{Var}[u]$) (haut) et de la norme du gradient ($\text{Var}[\|\nabla u\|]$) (bas) pour le mono-modèle 2D de référence.

seulement 46% de l'intervalle de confiance est retrouvé pour le déplacement suivant l'axe x (78% suivant l'axe y). Comme précédemment, même avec un patch petit, la variabilité de la norme du gradient est mieux représentée (environ 80% de l'intervalle de confiance retrouvé). Comme précédemment, nous pouvons relier cela à l'évolution de l'indice de corrélation entre le déplacement du point $(x = 0, y = 0)$ ou la norme de son gradient et le champs stochastique $K(x, \theta)$ (voir figures 3.20 et 3.21). Le support de la corrélation pour le gradient est totalement inclus dans le patch, alors que celui lié au déplacement non. Cependant, ni l'espérance de la norme du gradient, ni l'intervalle de confiance ne sont parfaitement retrouvés car la taille du modèle stochastique n'est pas assez importante et le nombre de tirages de Monte Carlo est également un peu faible.

Changement du support de discrétisation pour Ω_c

L'espace de couplage \mathcal{W}_c est ici discrétisé spatialement avec le même maillage que Ω_d . Cela permet de laisser d'avantage de "liberté" à la solution stochastique dans l'espace de couplage. Tous les autres paramètres sont inchangés.

Les figures 3.22 et 3.23 représentent u_d , l'espérance du champ stochastique $E[u_s]$, l'espérance de la norme du gradient associé et la variance (ou intervalle de confiance) sur l'ensemble de la structure.

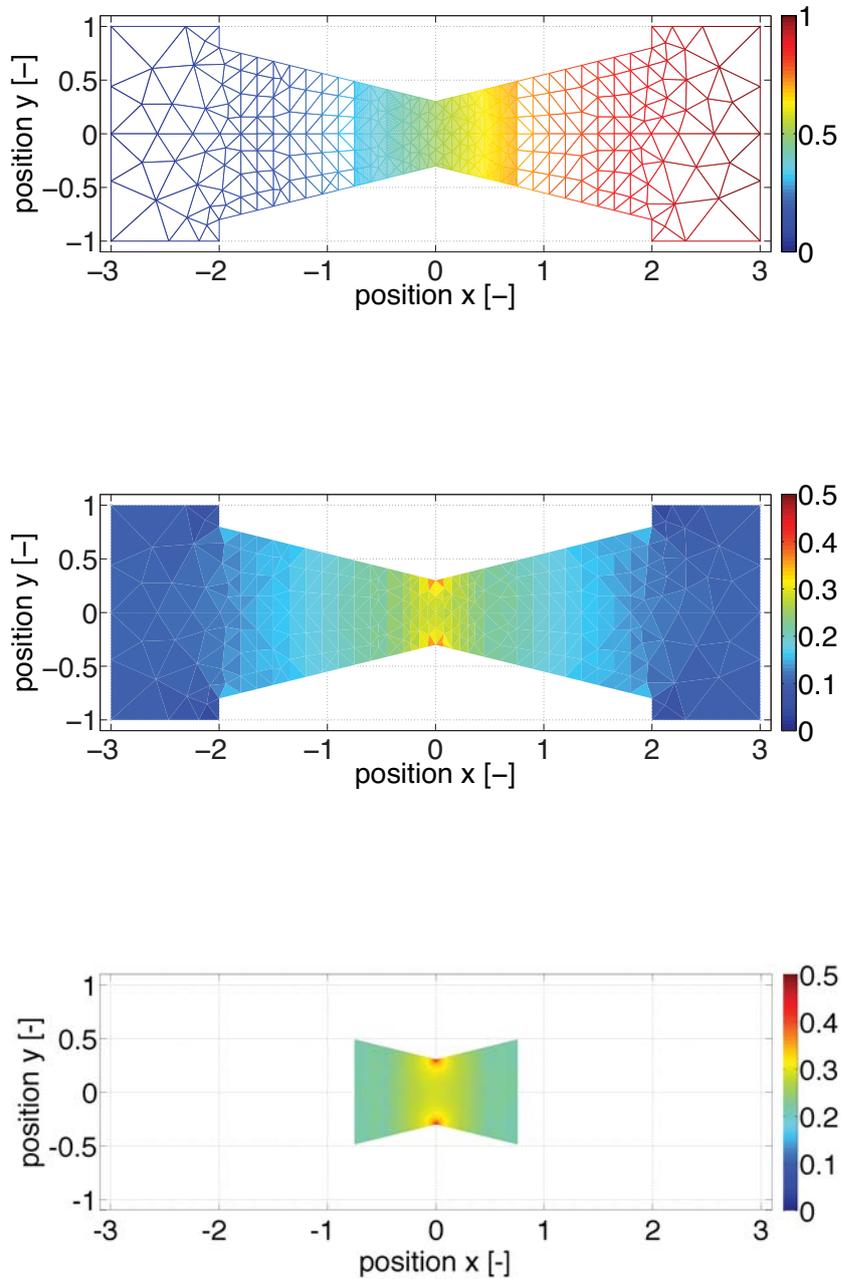


FIGURE 3.16 – Déplacement u_d et $E[u_s]$ (haut) et norme du gradient de u_d (milieu) et espérance de la norme du gradient de u_s (bas) obtenus par la méthode Arlequin.

Les figures 3.24 et 3.25 représentent la comparaison entre la solution obtenue par la méthode Arlequin, et la solution obtenue par mono-modèle. Comme dans le cas 1D, nous pouvons remarquer le même effet de bords : des valeurs plus élevées pour l'intervalle de confiance se retrouvent sur les bords extrêmes du patch (cantonnées sur les éléments du bord uniquement). Les écarts relatifs liés à l'évaluation de l'espérance du déplacement ou

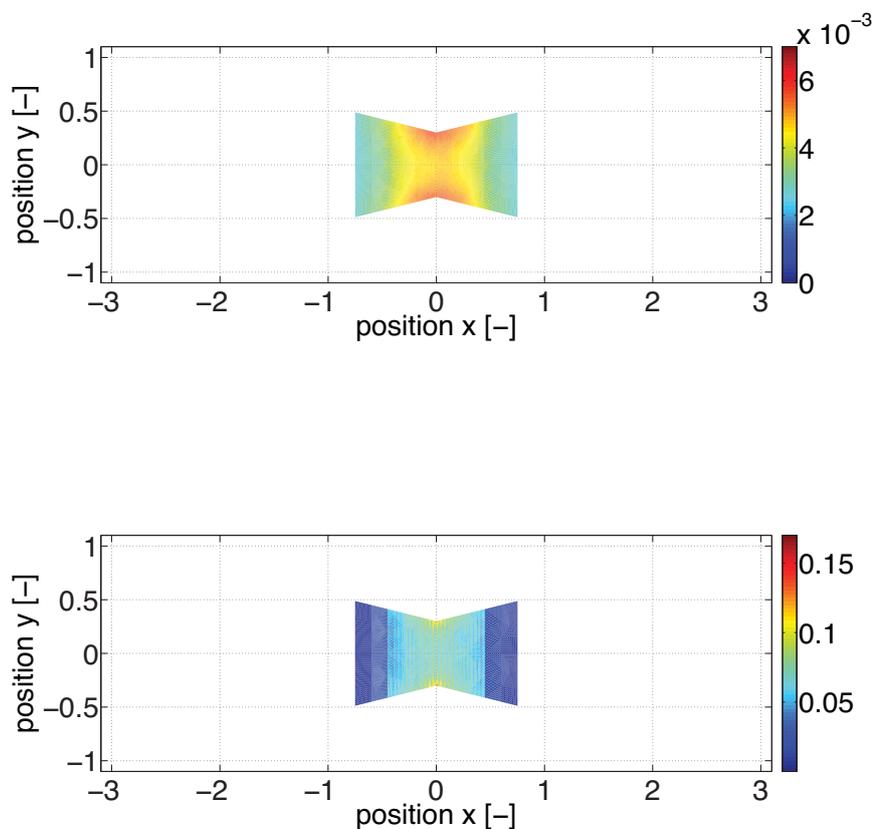


FIGURE 3.17 – Variances du déplacement ($\text{Var}[u_s]$) (haut) et de la norme du gradient associé ($\text{Var}[\|\nabla u_s\|]$) (bas) obtenues par la méthode Arlequin.

de la norme du déplacement sont sensiblement les mêmes, ainsi que les différences pour les intervalles de confiance. Une manière d’améliorer la solution est d’agrandir la taille du patch manuellement, comme il est proposé dans le paragraphe suivant. On pourrait également augmenter le nombre de tirages de Monte Carlo.

Utilisation d’un patch plus grand

Dans ce paragraphe, le patch utilisé est plus grand (demi-largeur : $L_s = 1.8$). La discrétisation de la zone de couplage est fine et s’appuie sur la discrétisation de Ω_s . Tous les autres paramètres restent inchangés.

Les figures 3.26 et 3.27 représentent u_d , l’espérance du champ stochastique $E[u_s]$, l’espérance de la norme du gradient associé et la variance (ou intervalle de confiance) sur l’ensemble de la structure.

Les figures 3.28 et 3.29 représentent la comparaison entre la solution obtenue par la méthode Arlequin, et la solution obtenue par mono-modèle. L’écart relatif de l’espérance du gradient du déplacement est plus faible que précédemment (2.5% d’écart relatif suivant les deux axes). De même, la variabilité est mieux représentée. L’augmentation de la taille du patch a amélioré la représentation de l’intervalle de confiance de 80% à plus de 96%.

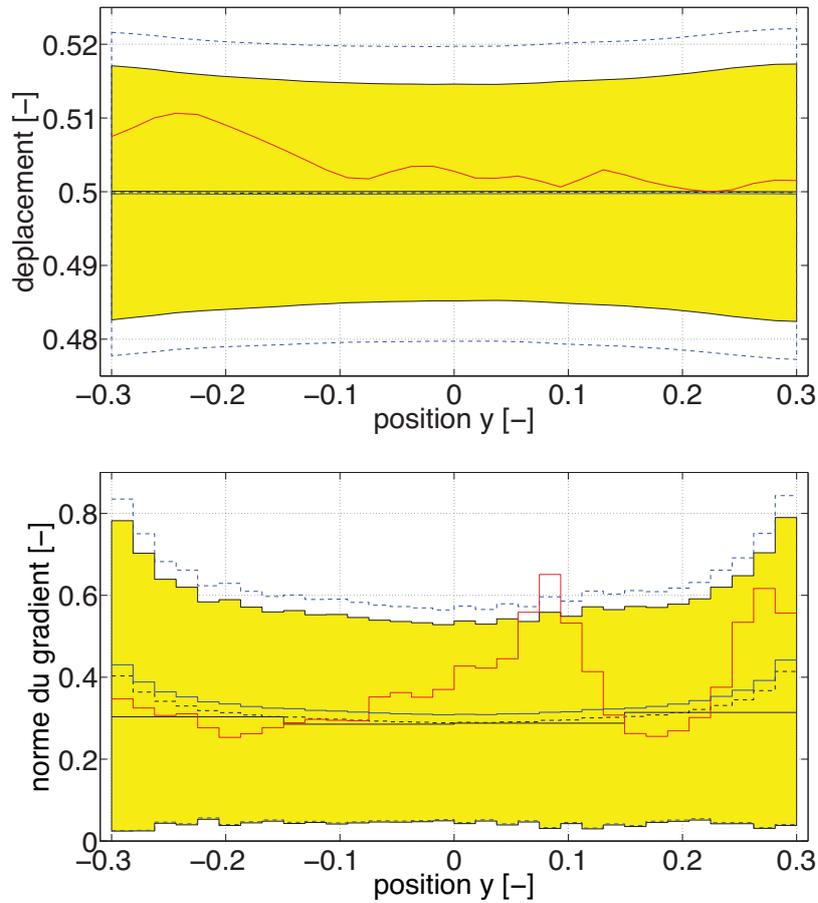


FIGURE 3.18 – Comparaison, en terme de déplacement (haut) et de gradient du déplacement (bas) de la solution Arlequin ($E[u_s]$ ou $E[\|\nabla u_s\|]$) en tirets noirs, exemple de réalisations associées en ligne continue rouge, et intervalle de confiance à 90% relatif à u_s ou $\|\nabla u_s\|$ (zone jaune) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle (Espérance (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% (tirets bleus)) le long de l'axe y .

Dans le chapitre 4, nous proposons d'étudier la qualité de l'estimation d'une composante du gradient de la solution, notamment en fonction de la taille du patch choisie, mais également du nombre de tirages de Monte Carlo et de la discrétisation spatiale.

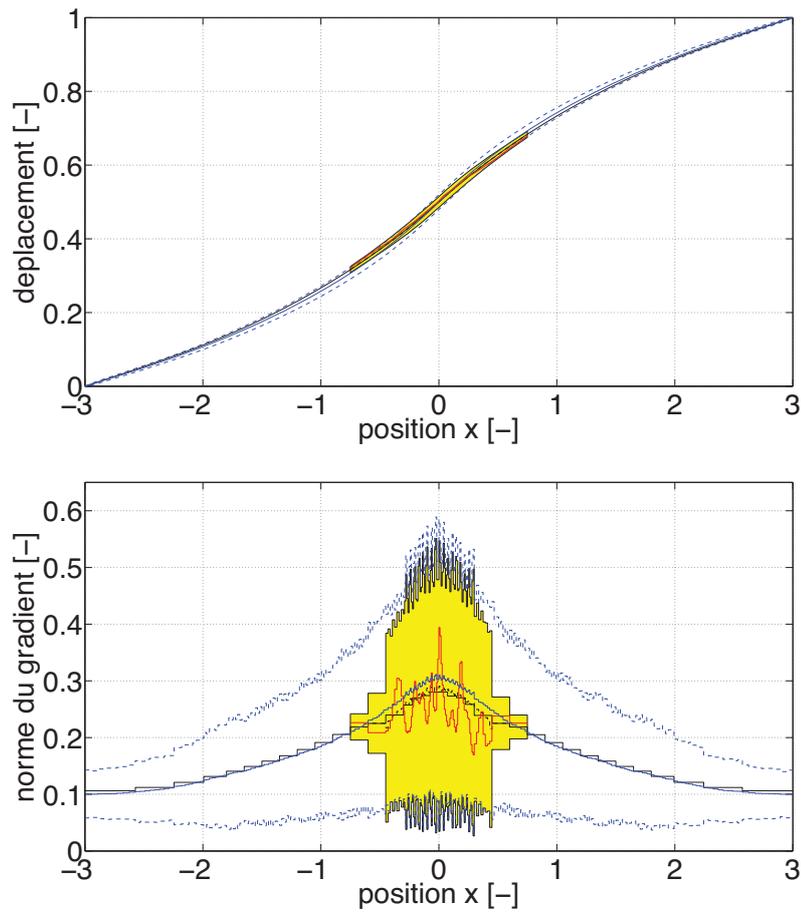


FIGURE 3.19 – Comparaison, en terme de déplacement (haut) et de gradient du déplacement (bas) de la solution Arlequin (u_d en ligne continue noire, $E[u_s]$ ou $E[\|\nabla u_s\|]$ en tirets noirs, exemple de réalisations associées en ligne continue rouge, et intervalle de confiance à 90% relatif à u_s ou $\|\nabla u_s\|$ (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle (Espérance (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% (tirets bleus)) le long de l'axe x .

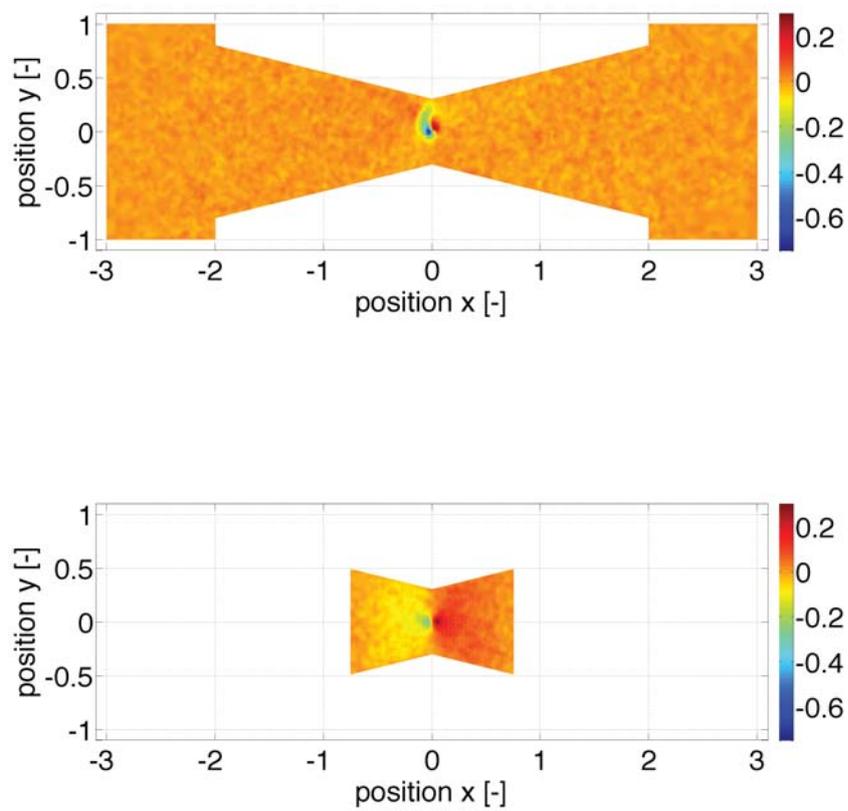


FIGURE 3.20 – Valeur de l'indice de corrélation entre le champ stochastique $K(x, \theta)$ en tous points et le déplacement évalué en $(x = 0, y = 0)$, pour le mono-modèle de référence en haut, et pour le modèle Arlequin en bas.

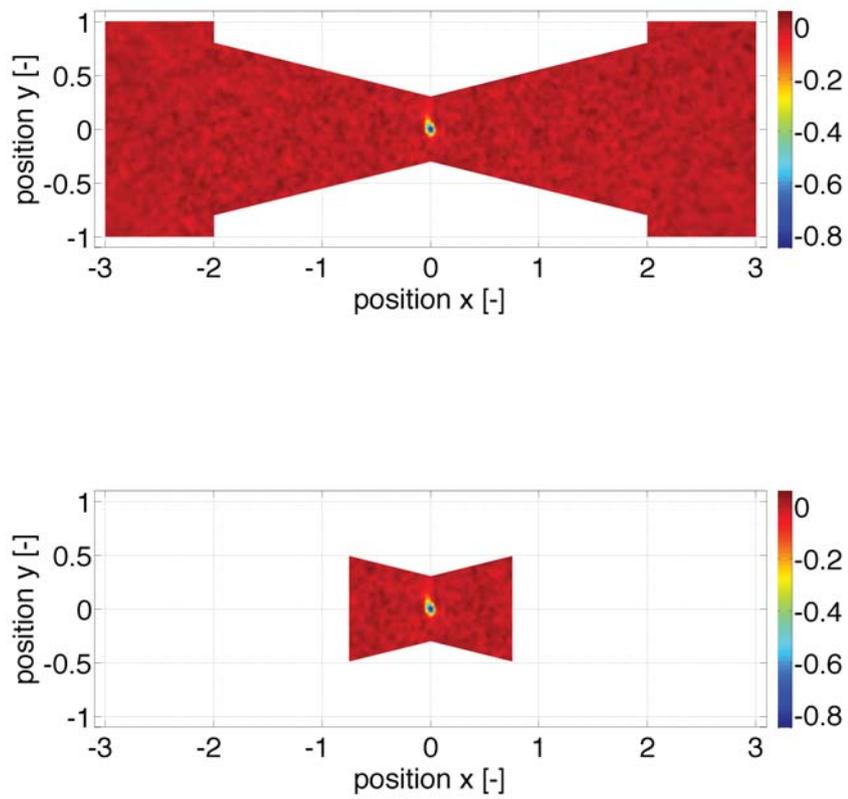


FIGURE 3.21 – Valeur de l'indice de corrélation entre le champ stochastique $K(x, \theta)$ en tous points et la norme du gradient évaluée en $(x = 0, y = 0)$, pour le mono-modèle de référence en haut, et pour le modèle Arlequin en bas.

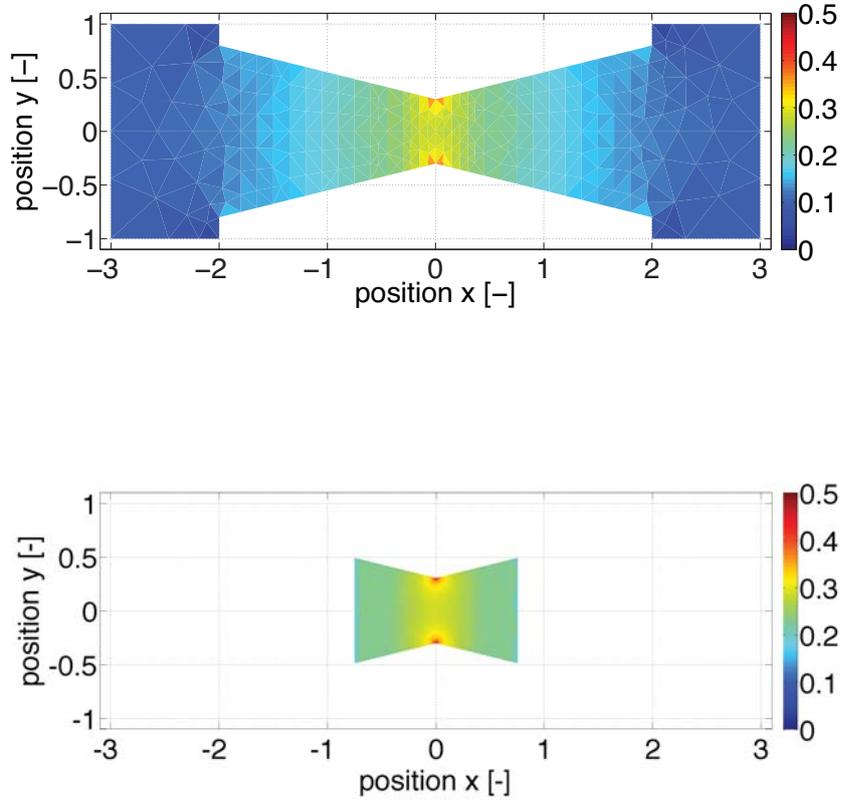


FIGURE 3.22 – Norme du gradient de u_d (haut) et espérance de la norme du gradient de u_s (bas) obtenues par la méthode Arlequin lorsque Ω_c est discrétisé avec le maillage grossier utilisé pour Ω_d .

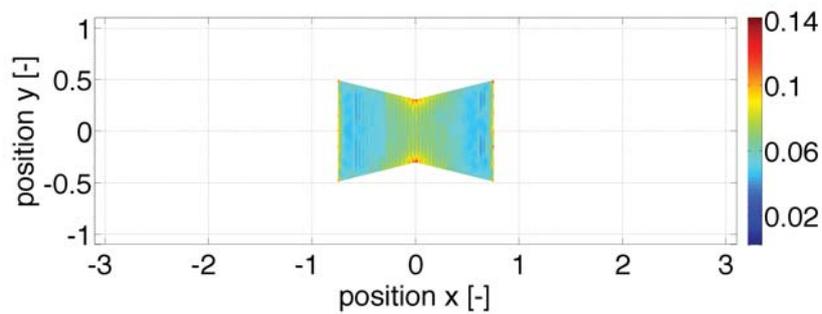


FIGURE 3.23 – Variance de la norme du gradient ($\text{Var} [||\nabla u_s||]$) obtenue par la méthode Arlequin lorsque Ω_c est discrétisé avec le maillage grossier utilisé pour Ω_d .

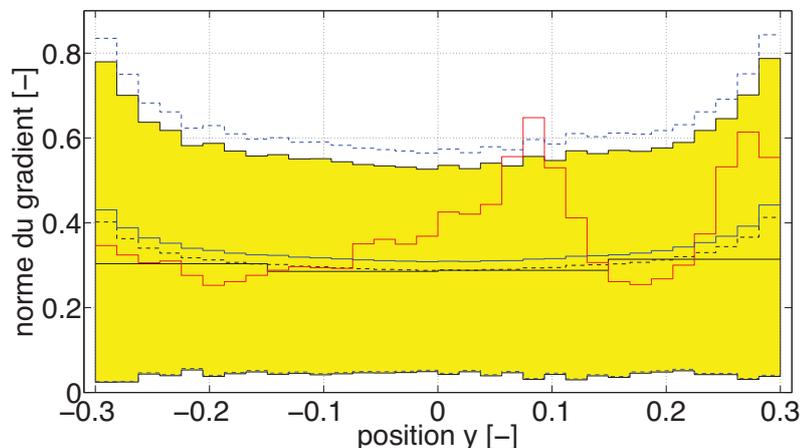


FIGURE 3.24 – Comparaison, en terme de gradient du déplacement de la solution Arlequin ($E[\|\nabla u_s\|]$ en tirets noirs, exemple de réalisations associées en ligne continue rouge, et intervalle de confiance à 90% relatif à $\|\nabla u_s\|$ (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle (Espérance (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% (tirets bleus)) le long de l'axe y . (Ω_c est discrétisé avec le maillage grossier utilisé pour Ω_d).

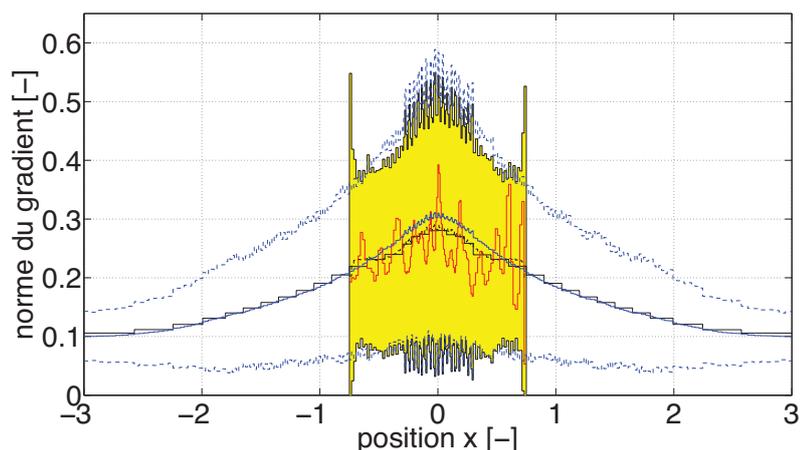


FIGURE 3.25 – Comparaison, en terme de gradient du déplacement de la solution Arlequin ($E[\|\nabla u_s\|]$ en tirets noirs, exemple de réalisations associées en ligne continue rouge, et intervalle de confiance à 90% relatif à $\|\nabla u_s\|$ (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle (Espérance (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% (tirets bleus)) le long de l'axe x . (Ω_c est discrétisé avec le maillage grossier utilisé pour Ω_d).

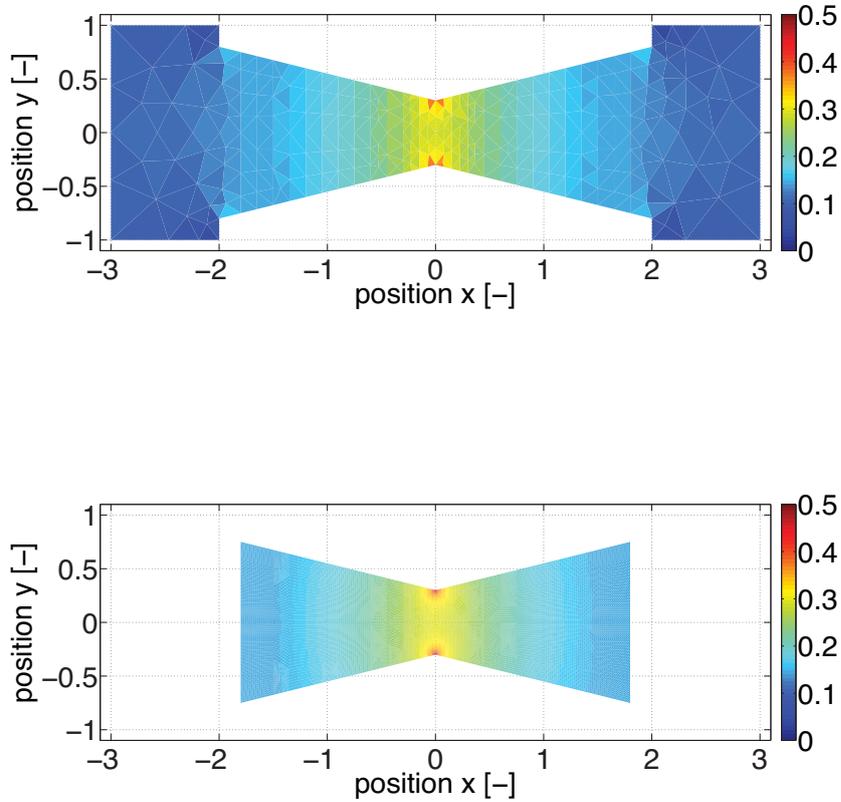


FIGURE 3.26 – Norme du gradient de u_d (haut) et espérance de la norme du gradient de u_s (bas) obtenus par la méthode Arlequin avec un patch de demi-largeur $L_s = 1.8$.

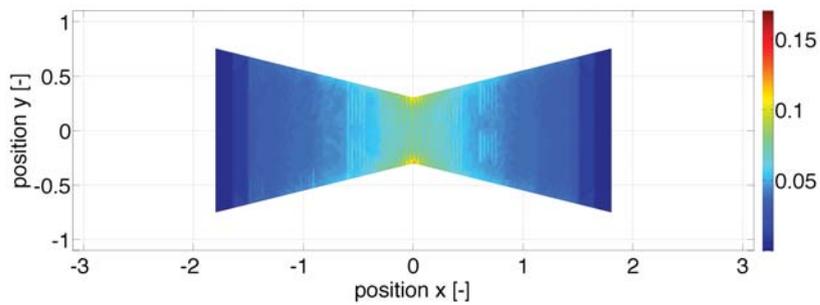


FIGURE 3.27 – Variance de la norme du gradient de $(\text{Var}[\|\nabla u_s\|])$ obtenue par la méthode Arlequin avec un patch de demi-largeur $L_s = 1.8$.

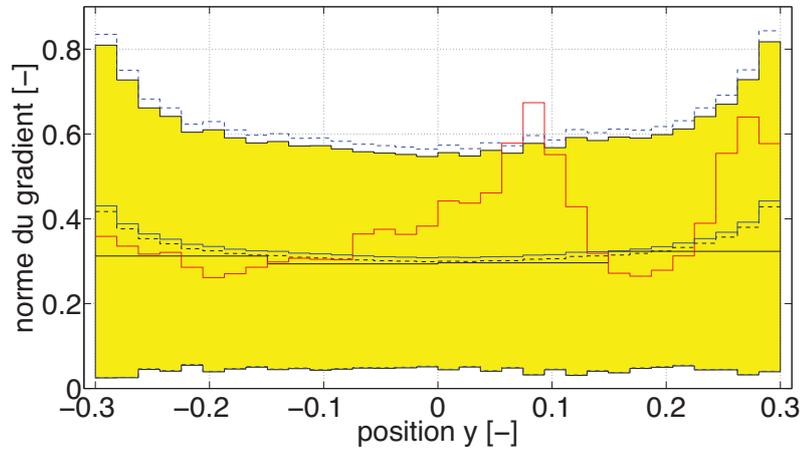


FIGURE 3.28 – Comparaison, en terme de gradient du déplacement de la solution Arlequin ($E[||\nabla u_s||]$ en tirets noirs, exemple de réalisations associées en ligne continue rouge, et intervalle de confiance à 90% relatif à $||\nabla u_s||$ (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle (Espérance (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% (tirets bleus)) le long de l'axe y . La demi-largeur du patch utilisé est $L_s = 1.8$.

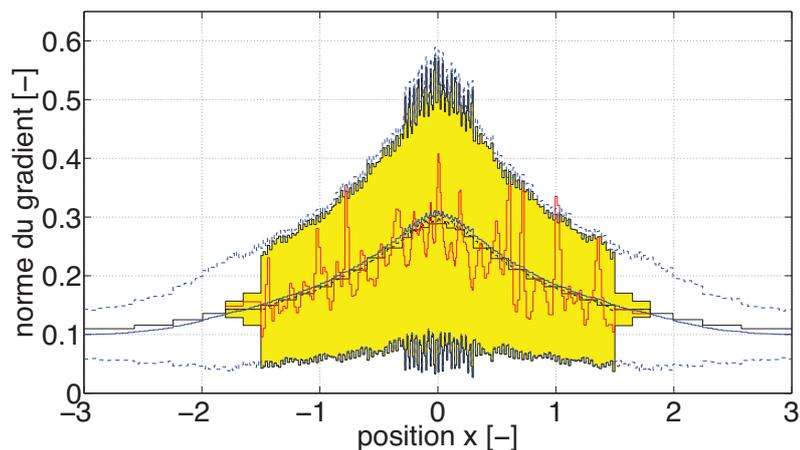


FIGURE 3.29 – Comparaison, en terme de gradient du déplacement de la solution Arlequin ($E[||\nabla u_s||]$ en tirets noirs, exemple de réalisations associées en ligne continue rouge, et intervalle de confiance à 90% relatif à $||\nabla u_s||$ (zone jaune)) avec la solution de référence obtenue par mono-modèle (Espérance (ligne continue bleue), intervalle de confiance à 90% (tirets bleus)) le long de l'axe x . La demi-largeur du patch utilisé est $L_s = 1.8$.

3.5 Bilan sur le couplage par la méthode Arlequin

Ce chapitre pose les éléments nécessaires à l'utilisation de la méthode Arlequin dans le cadre d'un couplage d'un modèle déterministe avec un modèle stochastique afin qu'elle puisse être utilisée pour approcher le modèle de référence stochastique. La particularité de ce nouveau couplage réside principalement dans le choix de l'espace de couplage ou espace médiateur. Celui-ci permet de faire dialoguer un champ déterministe et un champ stochastique de manière efficace et sous forme faible et ce, même suivant la dimension stochastique (dans le sens où lorsqu'une résolution par la technique de Monte Carlo est proposée, c'est bien l'ensemble des réalisations de u_s qui est couplé à u_d et non chaque réalisation indépendamment).

Les exemples simples proposés en fin de chapitre permettent de formuler deux principales observations. La première concerne la capacité de la méthode Arlequin à coupler un champ u_s stochastique à un champ déterministe. Nous remarquons de plus que dans la zone de couplage, le raccord de u_d avec la moyenne de u_s est bien réalisé. Dans un second temps, la méthode Arlequin (comme dans le cas déterministe) permet l'introduction d'un défaut avec une grande flexibilité. En effet, le défaut, introduit uniquement dans le patch, s'exprime dans la solution finale dans un sens où l'espérance et la variabilité de la solution mono-modèle sont bien retrouvés, au moins dans la zone libre du patch.

Plus généralement, nous avons observé que la méthode Arlequin était capable de reproduire la variabilité de certaines quantités d'intérêt (en comparaison avec la solution mono-modèle). En étudiant les indices de corrélation entre la quantité recherchée (déplacement ou gradient) et le champ stochastique $K(x, \theta)$, nous avons montré qu'une possible explication était liée au support de cet indice de corrélation. Ainsi, lorsque le patch est suffisamment grand pour prendre en compte la corrélation entre les propriétés matériaux et la quantité recherchée, l'intervalle de confiance est bien reproduit.

L'exemple 2D montre que la méthode peut être étendue au cas bi-dimensionnel. Nous avons pu ainsi observer que la taille du patch influait sur la solution globale. En augmentant la taille du modèle stochastique, nous avons pu observer que la solution obtenue était plus proche que celle obtenue à partir d'un mono-modèle.

La méthode proposée ici repose sur le choix de plusieurs ingrédients liés à la formulation de la méthode mais aussi liés à la résolution du problème couplé. Nous distinguons ainsi les ingrédients de la méthode comme le type des fonctions de pondération, le poids ε , la discrétisation de Ω_c ou encore l'espace de couplage, des paramètres de résolutions. En effet, la résolution du problème Arlequin repose sur le choix de plusieurs paramètres comme la taille (et donc le nombre) des éléments pour discrétiser spatialement le modèle déterministe, stochastique ou la zone de couplage, la taille et la position du patch et enfin pour une résolution par une approche de Monte Carlo le nombre de réalisations utilisées. Nous avons vu, à travers le dernier exemple, qu'agrandir la taille du patch permettait d'améliorer la solution finale. Les ingrédients de la méthode n'ont pas tous été explicitement étudiés pendant les travaux de doctorat. Ils doivent faire l'objet de futures études.

Dans la suite, nous proposons d'étudier l'influence du choix des paramètres de résolution sur l'approximation d'une quantité d'intérêt spécifique définie dans une zone donnée. Nous étudions plus particulièrement la taille de la zone de couplage, le nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées, ainsi que la discrétisation du modèle déterministe. La discrétisation du modèle stochastique est fixée pour une représentation pertinente de $K(x, \theta)$. La taille de la zone de couplage Ω_c n'est pas étudiée mais peut faire l'objet d'une étude supplémentaire

sans difficulté particulière grâce à la méthode proposée.

Estimation d'erreur sur des quantités d'intérêt dans le cadre Arlequin

Ce chapitre propose une stratégie pour contrôler la qualité de l'estimation d'une quantité d'intérêt locale lorsque la méthode Arlequin est utilisée pour coupler un modèle déterministe et un modèle stochastique afin d'approcher un problème stochastique de référence.

Les erreurs introduites lors des différentes étapes d'approximation du problème de référence sont estimées en suivant la méthode *Goal-Oriented* présentée dans le chapitre 2. Nous ne nous intéressons, dans les travaux présentés ici, qu'aux paramètres de taille de maillage, de taille de patch et de nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées.

Sommaire

4.1	Contexte d'étude	76
4.2	Estimation d'erreur pour le couplage proposé	77
4.2.1	Problème de référence	77
4.2.2	Problème approché primal	78
4.2.3	Problème adjoint (ou dual)	80
4.2.4	Estimation d'erreur	82
4.2.5	Évaluation du résidu \mathcal{R}	82
4.3	Convergence numérique de la méthode Arlequin	83
4.3.1	Ex A : erreur relative à l'estimation de q_∂	85
4.3.2	Ex B : erreur relative à l'estimation de q_v	87
4.3.3	Étude spécifique des paramètres MC et N_d	89
4.3.4	Conclusion générale sur l'influence des paramètres	91
4.4	Étude de l'approximation du modèle adjoint	92
4.4.1	Influence du paramètre L_s pour l'estimation de q_∂	92
4.4.2	Influence du paramètre MC pour l'estimation de q_∂	93
4.4.3	Influence du paramètre N_d pour l'estimation de q_∂	94
4.4.4	Conclusions générales sur l'approximation du modèle adjoint	95
4.5	Séparation des sources d'erreur et principe d'adaptation	96
4.5.1	Modèles intermédiaires et indicateurs d'erreur associés	97
4.5.2	Stratégie d'adaptation	98
4.6	Résultats d'adaptation	99
4.6.1	Exemple d'adaptation pour un modèle 1D	99
4.6.2	Exemple d'adaptation pour un modèle 2D	103
4.7	Bilan sur l'erreur <i>a posteriori</i> pour le couplage considéré	106

4.1 Contexte d'étude

Nous nous intéressons au contrôle de la qualité des quantités locales calculées en utilisant un modèle Arlequin approchant le modèle de référence. De manière générale, le problème de référence consiste à résoudre le problème (2.2) décrit dans le chapitre 2 :

Trouver $u \in \mathcal{W}$ tel que :

$$\mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathcal{L}(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W} \quad (4.1)$$

La solution de ce problème est notée $\mathbf{u}_{ex}(\mathbf{x}, \theta)$. La quantité locale dont nous voulons contrôler l'approximation est notée $q(\mathbf{u}_{ex})$. Il peut s'agir par exemple de l'espérance mathématique du déplacement en un point, de la moyenne du gradient dans une certaine zone, ou encore de quantités non-linéaires en fonction du déplacement comme la variance du déplacement en un point.

La méthode Arlequin décrite dans le chapitre 3 est utilisée pour estimer la grandeur d'intérêt $q(\mathbf{u}_{ex})$. Elle fournit une solution approchée $\mathbf{u}_{arl}(\mathbf{x}, \theta)$ du problème de référence. Cette solution permet d'estimer la quantité d'intérêt par $q(\mathbf{u}_{arl})$. Dès lors, le but de l'estimation d'erreur est d'évaluer la qualité de la solution \mathbf{u}_{arl} par rapport à la quantité d'intérêt recherchée en évaluant :

$$\eta = q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_{arl})$$

L'estimation d'erreur dans le cadre de la méthode Arlequin n'est pas une chose nouvelle. Elle a notamment été étudiée dans le cas d'un couplage entre un modèle discret (atomistique par exemple) et un modèle continu. Dans le cas de modèles déterministes, les premiers travaux furent conduits dans [Prudhomme *et al.*, 2008] dans un cas 1D. Dans cette contribution, les auteurs étudient numériquement l'erreur introduite par l'utilisation de la méthode Arlequin pour l'évaluation de plusieurs quantités d'intérêt. Par la suite, dans [Prudhomme *et al.*, 2009, Ben Dhia *et al.*, 2011], les auteurs utilisent une estimation d'erreur de type *Goal-Oriented* (voir chapitre 2, section 2.4.3) avec l'introduction d'un modèle adjoint pour estimer l'erreur relative à l'évaluation de la quantité d'intérêt :

$$\eta = q(\mathbf{u}_{ex}) - q(\mathbf{u}_{arl}) \approx \mathcal{R}(\mathbf{u}_{arl}, \mathbf{p}_{arl})$$

où \mathbf{u}_{arl} une solution approchée de \mathbf{u}_{ex} (en utilisant la méthode Arlequin), \mathbf{p}_{arl} une solution approchée de la solution du problème adjoint et \mathcal{R} le résidu associé au problème de référence (4.1).

Dans le cas d'un problème 3D d'adaptation de modèle pour la simulation de polymères [Bauman *et al.*, 2009], le processus d'adaptation est contrôlé par la contribution locale de chaque élément dans l'erreur totale pour l'évaluation de la quantité d'intérêt. De plus, le problème adjoint est aussi approché numériquement de manière optimale en évitant des coûts numériques supplémentaires.

Nous proposons dans ce chapitre d'utiliser une méthode de type *Goal-Oriented* pour estimer l'erreur η et ainsi la qualité de l'approximation u_{arl} pour l'évaluation de la quantité d'intérêt $q(u_{ex})$ lorsque le couplage proposé dans le chapitre 3 est utilisé. De plus, une stratégie de séparation des sources de l'erreur, exposée dans la suite, permet de définir et de quantifier les erreurs de modèle, de discrétisation ou stochastique et de piloter un processus d'adaptation de modèle afin de contrôler l'erreur totale.

4.2 Estimation d'erreur de type *Goal-Oriented* pour le couplage Arlequin proposé

Dans cette section, les techniques d'estimation de l'erreur relative à l'évaluation d'une quantité d'intérêt $q(u)$ en utilisant la méthode Arlequin sont illustrées à partir d'un exemple simple de barre 1D (voir section 3.4.1 du chapitre 3).

4.2.1 Problème de référence

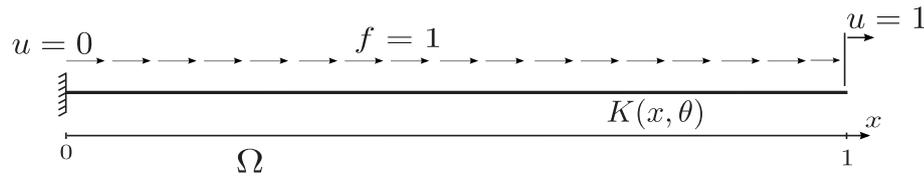


FIGURE 4.1 – Mono-modèle stochastique de référence.

Nous étudions le problème 1D décrit par la figure 4.1. Il s'agit d'une barre en traction, encastée à son extrémité gauche et soumise à un déplacement unitaire à son autre extrémité. Une force f linéique unitaire est également appliquée sur toute sa longueur. Comme indiqué dans le préambule du chapitre 2, nous choisissons de caractériser le comportement de la structure en modélisant le paramètre matériau par un champs stochastique $K(x, \theta)$. Nous supposons que ce champ vérifie les conditions décrites au chapitre précédent :

$$0 < K_{min} \leq K(x, \theta) \leq K_{max} < \infty, \text{ p.p. dans } \Omega, \text{ p.s.}$$

Le problème consiste à chercher le champ solution u tel que :

$$\frac{d}{dx} \left(K(x, \theta) \frac{du(x, \theta)}{dx} \right) + f(x) = 0, \quad \text{p.p. et p.s.}$$

En définissant l'espace des déplacements admissibles par :

$$\mathcal{W} = \{v \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega)), v(x=0) = 0 \text{ et } v(x=1) = 1, \text{ p.s.}\}$$

et en notant \mathcal{W}^0 l'espace des déplacements admissibles à zéro associé à \mathcal{W} , le problème s'écrit sous forme faible :

Trouver $u \in \mathcal{W}$ tel que :

$$\mathcal{A}(u, v) = \mathcal{L}(v), \quad \forall v \in \mathcal{W}^0 \quad (4.2)$$

où les travaux des efforts intérieurs et extérieurs sont respectivement donnés par les formes bilinéaire $\mathcal{A} : \mathcal{W} \times \mathcal{W}^0 \rightarrow \mathbb{R}$ et linéaire $\mathcal{L} : \mathcal{W}^0 \rightarrow \mathbb{R}$, définis par :

$$\mathcal{A}(u, v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} K(x, \theta) \frac{du(x, \theta)}{dx} \frac{dv(x, \theta)}{dx} d\Omega \right]$$

et

$$\mathcal{L}(v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} f(x) v(x, \theta) d\Omega \right]$$

Ce problème admet une unique solution que l'on note u_{ex} . Dans un contexte de bureau d'étude, nous souhaitons évaluer des quantités d'intérêt $q(u_{ex})$. Dans cette section, nous

nous intéressons notamment à des quantités d'intérêt évoluant proche du milieu de la barre. En pratique, ce modèle est approché par un modèle plus grossier basé sur la méthode Arlequin permettant d'évaluer la quantité d'intérêt avec une bonne précision. En notant u_{arl} la solution reconstruite de ce problème approché, nous cherchons dans un premier temps à évaluer l'erreur totale associée à la quantité d'intérêt q :

$$\eta = q(u_{ex}) - q(u_{arl})$$

4.2.2 Problème approché primal

La méthode Arlequin est utilisée pour évaluer de manière approchée la quantité d'intérêt q (voir figure. 4.2). La position du centre du patch est supposée *a priori* connue (centrée sur la zone d'intérêt). Le problème couplé s'écrit sous forme faible :

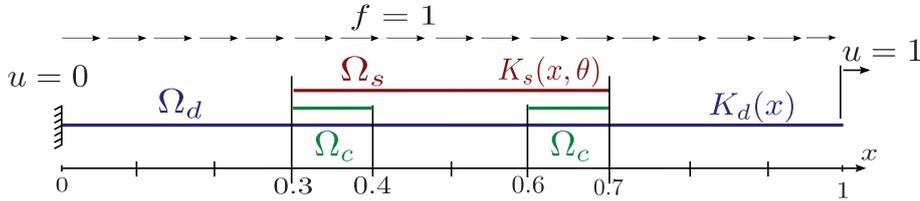


FIGURE 4.2 – Modèle Arlequin mono-dimensionnel.

Trouver $(u_d, u_s, \lambda) \in \mathcal{V}_d \times \mathcal{W}_s \times \mathcal{W}_c$ tel que :

$$\begin{cases} a_d(u_d, v_d) + C(\lambda, v_d) = \ell_d(v_d), & \forall v_d \in \mathcal{V}_d^0 \\ \mathcal{A}_s(u_s, v_s) - C(\lambda, v_s) = \mathcal{L}_s(v_s), & \forall v_s \in \mathcal{W}_s \\ C(\mu, u_d - u_s) = 0, & \forall \mu \in \mathcal{W}_c \end{cases} \quad (4.3)$$

où les espaces des déplacements admissibles sont définis par :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_d &= \{v \in \mathcal{H}^1(\Omega_d), v(x=0) = 0 \text{ et } v(x=1) = 1\} \\ \mathcal{W}_s &= \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega_s)) \end{aligned}$$

et où \mathcal{V}_d^0 est l'espace des déplacements admissibles à zéro associé à \mathcal{V}_d . Les travaux des efforts intérieurs et extérieurs $a_d : \mathcal{V}_d \times \mathcal{V}_d^0 \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathcal{A}_s : \mathcal{W}_s \times \mathcal{W}_s \rightarrow \mathbb{R}$, $\ell_d : \mathcal{V}_d^0 \rightarrow \mathbb{R}$ et $\mathcal{L}_s : \mathcal{W}_s \rightarrow \mathbb{R}$ sont définis respectivement par :

$$a_d(u, v) = \int_{\Omega_d} \alpha_d(x) K_d \frac{du(x)}{dx} \frac{dv(x)}{dx} d\Omega$$

$$\mathcal{A}_s(u, v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_s} \alpha_s(x) K_s(x, \theta) \frac{du(x, \theta)}{dx} \frac{dv(x, \theta)}{dx} d\Omega \right]$$

et

$$\ell_d(v) = \int_{\Omega_d} \alpha_d(x) f(x) v(x) d\Omega$$

$$\mathcal{L}_s(v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_s} \alpha_s(x) f(x) v(x, \theta) d\Omega \right]$$

Le problème Arlequin fournit deux champs $u_d \in \mathcal{V}_d$, et $u_s \in \mathcal{W}_s$. Nous introduisons le champ continu $u_{arl}^c \in \mathcal{W}$ construit à partir de u_d et de u_s et donné par :

$$u_{arl}^c = \begin{cases} u_d & \text{dans } \Omega_d \setminus \Omega_s \\ \alpha_d u_d + \alpha_s u_s & \text{dans } \Omega_s \end{cases}$$

De manière évidente, la solution reconstruite u_{arl}^c et la solution exacte u_{ex} sont différentes, y compris dans le patch Ω_s . Une erreur est ainsi introduite en considérant le problème couplé Arlequin, et ce, avant tout processus de discrétisations.

Le problème Arlequin est ensuite discrétisé en espace en utilisant la MEF et selon la dimension stochastique en utilisant la technique de Monte Carlo. Nous notons $(u_d^a, u_s^a, \lambda^a)$ la solution calculée à partir du problème (4.3) discrétisé. Nous supposons que nous pouvons reconstruire une approximation $u_{arl} \in \mathcal{W}$ du déplacement u_{ex} à partir de $(u_d^a, u_s^a, \lambda^a)$. L'écart entre ces déplacements est noté $e = u_{ex} - u_{arl}$.

Nous définissons cinq paramètres de résolution pour le modèle Arlequin :

- N_d : le nombre d'éléments finis utilisés pour la discrétisation spatiale du modèle déterministe (correspondant à un pas de discrétisation spatial uniforme h_d),
- h_s : le pas de discrétisation spatial uniforme du modèle stochastique,
- L_s : la demi-largeur de patch (pris symétriquement par rapport au milieu de la barre),
- L_c : la taille de la zone de couplage, comme indiquée sur la figure 4.3,
- MC : le nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour la discrétisation selon la dimension stochastique.

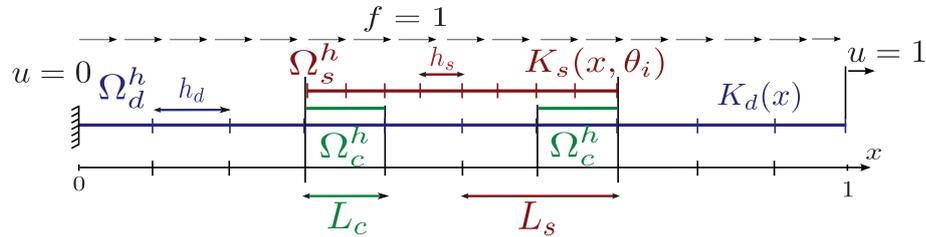


FIGURE 4.3 – Modèle Arlequin primal discrétisé.

Dans tout ce qui suit, il a été choisi, sans aucune restriction sur la validité de la méthode, de mailler la zone de couplage en utilisant la discrétisation spatiale du domaine stochastique. L'influence de la taille de la zone de couplage L_c sur l'approximation de la solution n'a pas été étudiée. Nous pouvons toutefois suivre une démarche similaire à celle qui va suivre pour étudier l'influence de ce paramètre.

Afin de représenter correctement le champ stochastique, il a été choisi de fixer le pas de discrétisation h_s à une valeur suffisamment fine. L'influence de cette discrétisation n'a pas été étudiée. Cependant, nous pouvons suivre pour ce paramètre la même démarche que pour les autres. Au final, sans restriction, et uniquement afin de faciliter la compréhension, seules les influences des paramètres N_d , L_s et MC ont été étudiées.

La méthode Arlequin est employée pour évaluer avec précision la quantité d'intérêt tout en limitant le nombre de degrés de liberté nécessaire. Nous cherchons donc à optimiser par exemple la taille du patch afin que la description stochastique ne soit utilisée que dans la zone d'influence de la quantité d'intérêt. Nous proposons pour cela d'utiliser une méthode d'estimation d'erreur *a posteriori* utilisant la solution d'un problème adjoint.

4.2.3 Problème adjoint (ou dual)

Le problème adjoint est défini à partir du modèle de référence et de la quantité d'intérêt à évaluer (voir chapitre 2, section 2.4.3). Afin d'illustrer la méthode, nous choisissons ici d'étudier l'espérance du gradient moyen dans une zone proche du centre de la barre :

$$q_{\partial}(u) = \mathbb{E} \left[\frac{1}{0.05} \int_{0.45}^{0.5} \frac{du(x, \theta)}{dx} dx \right] \quad (4.4)$$

Cette quantité q_{∂} est linéaire par rapport à u .

Dans le cas d'une quantité non-linéaire, l'approche est légèrement différente (*c.f.* remarque 4 du chapitre 2). Pour l'illustrer, nous considérons la quantité portant sur la variance du gradient moyen dans la même zone que précédemment :

$$q_v(u) = \text{Var} \left[\frac{1}{0.05} \int_{0.45}^{0.5} \frac{du(x, \theta)}{dx} dx \right] \quad (4.5)$$

Comme décrit dans le chapitre 2, le chargement des problèmes adjoints associés à ces quantités d'intérêt sont définis en exprimant les quantités sous forme globale :

$$q(u) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} f_q u(x, \theta) d\Omega + \int_{\Gamma_N} g_q u(x, \theta) d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{p}_q \cdot \nabla u(x, \theta) d\Omega \right]$$

où les quantités f_q, g_q et p_q , appelées extracteurs, permettent de définir le chargement du problème adjoint. Ainsi, pour la quantité linéaire q_{∂} , le chargement du problème adjoint est obtenu en réécrivant cette quantité sous forme globale :

$$q_{\partial}(v) = \mathbb{E} \left[\int_0^1 \frac{1}{0.05} \{ \delta(x - 0.5) - \delta(x - 0.45) \} v(x, \theta) dx \right]$$

où δ représente la distribution mathématique de Dirac. Le chargement correspond alors à deux forces ponctuelles opposées comme représenté sur la figure 4.4 et le problème s'écrit :

Trouver $p \in \tilde{\mathcal{W}}^0$ tel que :

$$\mathcal{A}(v, p) = q_{\partial}(v), \quad \forall v \in \tilde{\mathcal{W}}^0$$

où l'espace des champs admissibles à zéro $\tilde{\mathcal{W}}^0$ est égal à \mathcal{W}^0 . Cependant, la discrétisation de $\tilde{\mathcal{W}}^0$ sera plus fine que celle utilisée pour \mathcal{W}^0 (comme indiqué dans le chapitre 2).

On montre trivialement que le problème adjoint ci-dessus admet une unique solution que l'on note p_{ex} .

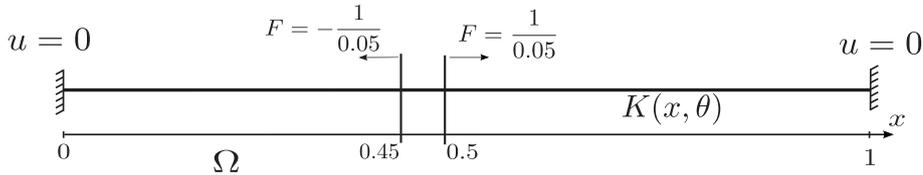


FIGURE 4.4 – Mono-modèle adjoint relatif à la quantité d'intérêt q_{∂} .

Dans le cas non-linéaire, la technique suivie, décrite dans le chapitre 2, consiste à linéariser $q(u_{ex}) - q(u_{arl})$ autour de u_{arl} . Nous avons alors :

$$q_v(u_{ex}) - q_v(u_{arl}) \approx \frac{2}{0.05^2} \mathbb{E} [\Delta e \{ \Delta(u_{arl}) - \mathbb{E} [\Delta(u_{arl})] \}]$$

où $\Delta e = e(x = 0.5, \theta) - e(x = 0.45, \theta)$ et $\Delta u_{arl} = u_{arl}(x = 0.5, \theta) - u_{arl}(x = 0.45, \theta)$. L'extracteur (le chargement) est défini par :

$$q_v(v) = \frac{2}{0.05^2} \mathbb{E} \left[\int_0^1 (\delta(x - 0.5) - \delta(x - 0.45)) \{ \Delta u_{arl} - \mathbb{E}[\Delta u_{arl}] \} v(x, \theta) dx \right]$$

Le chargement du problème adjoint dépend alors directement de la solution du modèle

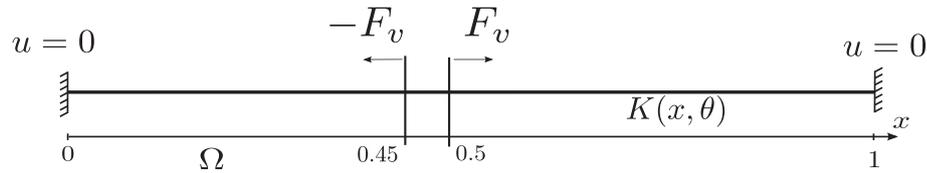


FIGURE 4.5 – Mono-modèle adjoint relatif à la quantité d'intérêt q_v avec $F_v = \frac{2}{0.05^2} (\Delta u_{arl} - \mathbb{E}[\Delta u_{arl}])$.

primal (voir figure 4.5).

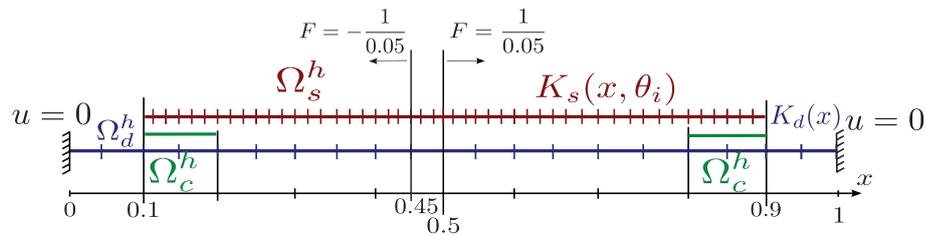


FIGURE 4.6 – Modèle Arlequin adjoint discrétisé relatif à la quantité d'intérêt q_θ .

Comme le problème de référence, en pratique, et afin de limiter les coûts supplémentaires liés au calcul d'erreur *a posteriori*, ces problèmes adjoints sont approchés en utilisant la méthode Arlequin (voir figure 4.6 pour la quantité q_θ). Le problème adjoint Arlequin relatif à q_θ s'écrit :

Trouver $(p_d, p_s, p_\lambda) \in \tilde{\mathcal{V}}_d \times \tilde{\mathcal{W}}_s \times \tilde{\mathcal{W}}_c$ tel que :

$$\begin{cases} a_d(v_d, p_d) + C(v_d, p_\lambda) &= q_d(v_d), & \forall v_d \in \tilde{\mathcal{V}}_d \\ \mathcal{A}_s(v_s, p_s) - C(v_s, p_\lambda) &= q_s(v_s), & \forall v_s \in \tilde{\mathcal{W}}_s \\ C(p_d - p_s, \mu) &= 0, & \forall \mu \in \tilde{\mathcal{W}}_c \end{cases} \quad (4.6)$$

où les champs des déplacements admissibles sont définis par :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{V}}_d &= \left\{ v \in \mathcal{H}^1(\tilde{\Omega}_d), v(x=0) = 0 \text{ et } v(x=1) = 0 \right\} \\ \tilde{\mathcal{W}}_s &= \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\tilde{\Omega}_s)) \end{aligned}$$

et avec :

$$\begin{aligned} q_d(v_d) &= \int_{\Omega_d} \alpha_d(x) (\delta(x - 0.5) - \delta(x - 0.45)) v_d(x) d\Omega \\ q_s(v_s) &= \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_s} \alpha_s(x) (\delta(x - 0.5) - \delta(x - 0.45)) v_s(x, \theta) d\Omega \right] \end{aligned}$$

Dans le cas présent, sous leur forme continu, les espaces notés avec des \sim sont peu différents des espaces initiaux. En effet, $\tilde{\mathcal{V}}_d \equiv \mathcal{V}_d^0$, et $\tilde{\mathcal{W}}_s$ est défini sur un domaine $\tilde{\Omega}_s$ plus grand

que Ω_s ($\Omega_s \subset \tilde{\Omega}_s \subset \Omega$). Comme le précédent, le problème (4.6) admet une unique solution. Elle peut être approchée de la même manière (utilisation d'éléments finis et technique de Monte Carlo).

Les espaces d'approximations de $\tilde{\mathcal{V}}_d, \tilde{\mathcal{W}}_s$ et $\tilde{\mathcal{W}}_c$ sont choisis plus riches que ceux de $\mathcal{V}_d, \mathcal{W}_s$ et \mathcal{W}_c afin d'approcher correctement η par $\mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl})$. En pratique, la taille du patch est donc grande, nous utilisons un plus grand nombre de tirages de Monte Carlo et les discrétisations spatiales sont plus fines. La solution approchée est notée $(p_d^a, p_s^a, p_\lambda^a)$ et on note $p_{arl} \in \mathcal{W}^0$ la solution mono-modèle reconstruite.

4.2.4 Estimation d'erreur

Grâce au problème adjoint, l'erreur η est estimée par :

$$\eta \simeq \mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl}) \quad (4.7)$$

où $\mathcal{R} : \mathcal{W} \times \mathcal{W}^0 \rightarrow \mathbb{R}$ est le résidu associé au problème de référence décrit par l'équation (4.2). Il est défini par :

$$\mathcal{R}(u, v) = \mathcal{L}(v) - \mathcal{A}(u, v) \quad (4.8)$$

Dès lors, u_{arl} et p_{arl} représentent des champs reconstruits à partir des solutions (u_d^a, u_s^a) et (p_d^a, p_s^a) . Ces reconstructions sont décrites dans le paragraphe suivant.

4.2.5 Évaluation du résidu \mathcal{R}

En pratique, le résidu est évalué numériquement, nous cherchons donc plutôt à reconstruire des champs approchés de u_{arl} et de p_{arl} que l'on note respectivement u_{arl}^a et p_{arl}^a . Ils sont directement définis à partir de u_d^a et de u_s^a pour u_{arl}^a (et de p_d^a et de p_s^a pour p_{arl}^a) :

$$u_{arl}^a = \begin{cases} u_d^a & \text{dans } \Omega_d \setminus \Omega_s \\ u_s^a & \text{dans } \Omega_s \end{cases}$$

Traitement de la dimension spatiale

Les champs u_d^a et u_s^a sont obtenus classiquement par la méthode des éléments finis comme décrit dans le chapitre précédent. Les champs sont approchés par des polynômes linéaires par morceaux. Directement, nous montrons que \mathcal{V}_d^h et \mathcal{V}_s^h sont des sous-espaces de \mathcal{W} . De la même manière, le traitement de la dimension spatiale pour les champs p_d^a et p_s^a ne pose pas de problème.

Traitement de la dimension stochastique

Dans tous les travaux présentés dans ce manuscrit, les champs u_s^a et p_s^a sont obtenus par la méthode de Monte Carlo.

Pour estimer l'erreur, nous cherchons donc à évaluer le résidu $\mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl}) \simeq \mathcal{A}(u_{arl}^a, p_{arl}^a) - \mathcal{L}(p_{arl}^a)$. Grâce aux réalisations de Monte Carlo pour $K(x, \theta)$, et en utilisant les réalisations de p_{arl}^a générées par la solution du problème Arlequin adjoint (4.6), la quantité $\mathcal{L}(p_{arl}^a)$ peut facilement être évaluée. Cependant, l'estimation du terme $\mathcal{A}(u_{arl}^a, p_{arl}^a)$ par la technique de Monte Carlo fait intervenir des réalisations du produit $K \nabla u_{arl}^a \cdot \nabla p_{arl}^a$. Il est donc nécessaire de respecter les corrélations croisées entre ces champs pour évaluer par le résidu.

D'une part, nous disposons de MC_p réalisations de la paire (K, u_s^a) générées par la solution du problème Arlequin primal (4.3) et d'autre part, nous disposons de MC_a réalisations de la paire (K, p_s^a) générées par la solution du problème Arlequin adjoint (4.6). De plus, dans un cas général, les réalisations de K utilisées pour le modèle primal et le modèle adjoint ne sont pas nécessairement les mêmes.

Pour pallier ce problème, nous présentons ici une façon de générer MC réalisations de u_s^a qui correspondent aux réalisations de K utilisées pour calculer les réalisations de la solution adjointe p_s^a en conservant les moments statistiques d'ordre un et deux de la solution u_s^a directement calculée par (4.3). L'étape suivante est alors de reconstruire la solution mono-modèle u_{arl}^a .

Pour simplifier la présentation de la démarche, nous supposons dans un premier temps que les champs $K(x, \theta)$ et $u_s^a(x, \theta)$ sont gaussiens. L'extension à des lois marginales du premier ordre autres est présentée à la fin de la section.

Nous notons Ξ et \mathbf{U} les vecteurs de variables aléatoires qui correspondent aux champs $K(x, \theta)$ et $u_s^a(x, \theta)$ après discrétisation spatiale (par la MEF).

L'objectif est donc de générer des réalisations $\hat{\mathbf{U}}$ de \mathbf{U} vérifiant :

$$\begin{cases} \mathbb{E}[\hat{\mathbf{U}}] = \mathbb{E}[\mathbf{U}], \\ \mathbb{E}[(\hat{\mathbf{U}} - \mathbb{E}[\mathbf{U}])(\hat{\mathbf{U}} - \mathbb{E}[\mathbf{U}])^T] = \mathbb{E}[(\mathbf{U} - \mathbb{E}[\mathbf{U}])(\mathbf{U} - \mathbb{E}[\mathbf{U}])^T] := \text{Cov}_U, \\ \mathbb{E}[(\hat{\mathbf{U}} - \mathbb{E}[\mathbf{U}])(\Xi - \mathbb{E}[\Xi])^T] = \mathbb{E}[(\mathbf{U} - \mathbb{E}[\mathbf{U}])(\Xi - \mathbb{E}[\Xi])^T] := \text{Cov}_{U\Xi}, \end{cases} \quad (4.9)$$

où nous avons introduit les matrices de covariance Cov_U et $\text{Cov}_{U\Xi}$. Nous introduisons aussi pour la suite la matrice d'auto-covariance de Ξ : $\text{Cov}_\Xi = \mathbb{E}[(\Xi - \mathbb{E}[\Xi])(\Xi - \mathbb{E}[\Xi])^T]$. Toutes les espérances et les matrices de covariance sont estimées en utilisant les MC_p réalisations de Ξ et \mathbf{U} issues du problème primal (4.3).

Soit un vecteur Θ de variables aléatoires gaussiennes centrées dont les composants sont non-corrélés ($\mathbb{E}[\Theta_i \Theta_j] = \delta_{ij}$), et indépendant par rapport à Ξ , nous définissons le vecteur $\hat{\mathbf{U}}$:

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbb{E}[\mathbf{U}] + \text{Cov}_{U\Xi} \text{Cov}_\Xi^{-1} (\Xi - \mathbb{E}[\Xi]) + \sqrt{\text{Cov}_U - \text{Cov}_{U\Xi} \text{Cov}_\Xi^{-1} \text{Cov}_{U\Xi}^T} \Theta$$

où la notation $\sqrt{\bullet}$ pour une matrice C est définie par $\sqrt{C} \sqrt{C}^T = C$. Grâce aux propriétés d'indépendance de Θ et de Ξ et grâce au fait que $\mathbb{E}[\Theta] = 0$, nous montrons facilement que le vecteur aléatoire $\hat{\mathbf{U}}$ vérifie en effet les statistiques du premier et du second ordre désirées (4.9). Dès lors en tirant des réalisations des variables aléatoires Θ , nous construisons des réalisations de $\hat{\mathbf{U}}$.

Comme ni $K(x, \theta)$, ni $u_s^a(x, \theta)$ n'est généralement un champ gaussien, une approche par transformation isoprobabiliste est suivie. Elle permet de transformer les champs d'origine en champs gaussiens, puis, après construction du vecteur gaussien $\hat{\mathbf{U}}$, la transformation inverse permet de reconstruire de nouvelles réalisations de \mathbf{U} suivant les distributions marginales du premier ordre d'origine.

4.3 Convergence numérique de la méthode Arlequin

Afin de caractériser l'erreur induite lorsque le problème de référence est approché par un problème Arlequin, nous étudions dans ce paragraphe l'évolution de l'erreur lorsque les quantités d'intérêts q_∂ (4.4) et q_v (4.5) sont évaluées. La nouveauté du couplage proposé dans ces travaux résidant dans l'extension de la méthode Arlequin à des problèmes stochastiques, seuls seront étudiés ici les paramètres concernant :

- le contrôle de la taille du patch employé (paramétrée par sa demi-largeur L_s) ;
- le contrôle de la discrétisation selon la dimension stochastique (paramétrée par le nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées MC) ;
- le contrôle de la discrétisation spatiale du modèle déterministe (paramétrée par le pas h_d , ou le nombre d'éléments $N_d = 1/h_d$).

Dans ce qui suit, le champ stochastique $K(x, \theta)$ suit une loi de probabilité uniforme de bornes $[0.3013, 2.3601]$, de corrélation du type sinc^2 avec une longueur de corrélation $L_{cor} = 0.01$. Le modèle de référence est discrétisé spatialement avec $N_{ref} = 500$ éléments de taille fixe $h = 0.002$. La discrétisation suivant la dimension stochastique se fait par la technique de Monte Carlo en utilisant $MC = 100\ 000$ réalisations de $K(x, \theta)$. La solution de ce problème de référence est noté u_{ref} et elle n'est que très peu différente de la solution exacte u_{ex} (moins de 0.1% d'erreur sur la moyenne). L'erreur relative vraie, notée η_{ref} , est définie par :

$$\eta_{ref} = \frac{q(u_{ref}) - q(u_{arl})}{q(u_{arl})}$$

Dans cette section, l'erreur η_{ref} est estimée avec un problème adjoint mono-modèle discrétisé aussi finement que le problème de référence (voir les figures 4.4 et 4.5 pour les quantités q_∂ et q_v). La solution du problème adjoint approchée est notée p^a et l'erreur relative estimée est définie par :

$$\eta_e = \frac{\mathcal{R}(u_{arl}, p^a)}{q(u_{arl})}$$

modèle	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s	N_{ref}
référence	mono	-	-	100 000	-	-	500
primal	Arlequin	[0.2, 0.5]	0.1	100 000	500	0.002	-
adjoint	mono	-	-	100 000	-	-	500

TABLE 4.1 – Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de L_s .

modèle	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s	N_{ref}
référence	mono	-	-	100 000	-	-	500
primal	Arlequin	0.3	0.1	[20, 100 000]	500	0.002	-
adjoint	mono	-	-	100 000	-	-	500

TABLE 4.2 – Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de MC .

modèle	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s	N_{ref}
référence	mono	-	-	100 000	-	-	500
primal	Arlequin	0.3	0.1	100 000	[10, 500]	0.002	-
adjoint	mono	-	-	100 000	-	-	500

TABLE 4.3 – Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de N_d .

Le but de cette section n'est pas d'étudier la qualité de l'estimation mais d'étudier l'erreur vraie lorsque le modèle primal Arlequin est résolu en faisant varier un seul paramètre. Nous pouvons cependant vérifier que lorsque le problème adjoint est résolu de manière fine, l'erreur estimée et l'erreur vraie sont très proches (au moins dans le cas d'une quantité d'intérêt linéaire). Les paramètres utilisés pour le modèle de référence, le modèle primal et le modèle adjoint sont définis dans les tableaux 4.1, 4.2 et 4.3. Dans ces tableaux, lorsqu'un mono-modèle est utilisé, nous donnons aussi le nombre d'éléments finis utilisés N_{ref} .

4.3.1 Exemple A : étude de l'évolution de l'erreur relative associée à l'estimation de q_∂

Le problème adjoint est décrit sur la figure 4.4. Les figures 4.7-4.9 montrent les évolutions de l'erreur vraie η_{ref} et de l'erreur estimée η_e en fonction de la demi-largeur du patch (figure 4.7), en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour le modèle primal (figure 4.8) et en fonction du nombre d'éléments utilisés pour la discrétisation du modèle déterministe (figure 4.9). Comme le problème adjoint est résolu avec une précision suffisante, l'erreur estimée est superposée à l'erreur vraie.

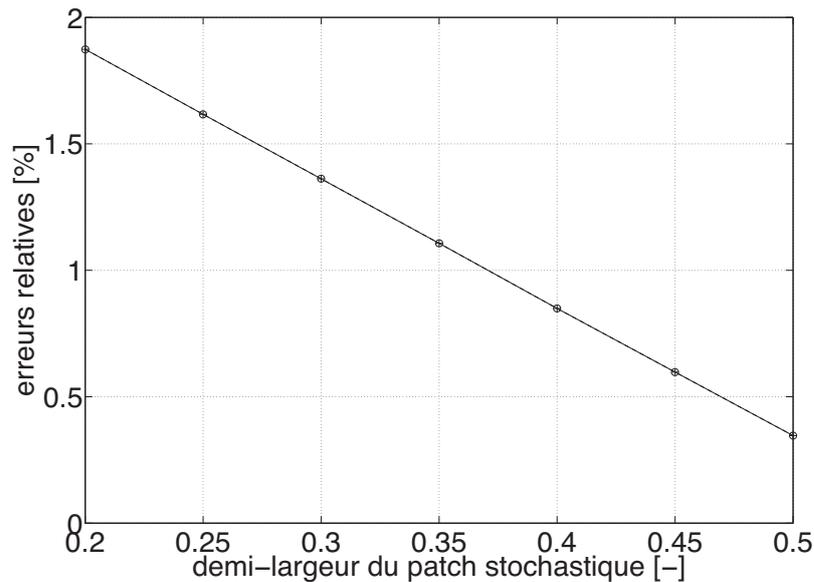


FIGURE 4.7 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction de la demi-largeur du patch pour l'évaluation de q_∂ en utilisant un modèle primal dont les paramètres sont donnés par le tableau 4.1. Les deux courbes coïncident.

Sur la figure 4.7, lorsque la demi-largeur du patch évolue de 0.2 à 0.5, l'erreur décroît de 1.9% à moins de 0.4%. Le fait que l'erreur n'atteigne pas 0% lorsque le patch recouvre la totalité du domaine s'explique par la présence de la zone de couplage sur $[0, 0.1] \cup [0.9, 1]$ dans laquelle le champ stochastique u_s n'est pas "libre" de s'exprimer complètement.

Sur la figure 4.8, pour un nombre de réalisations de Monte Carlo supérieur à 1 000, l'erreur est inférieure à 2%. Cependant l'erreur ne tend pas vers zéro mais vers une valeur proche de 1.4%. Cela correspond à l'erreur due à la modélisation Arlequin pour une demi-largeur de patch de $L_s = 0.3$. En effet, nous retrouvons cette valeur sur la figure 4.7 pour

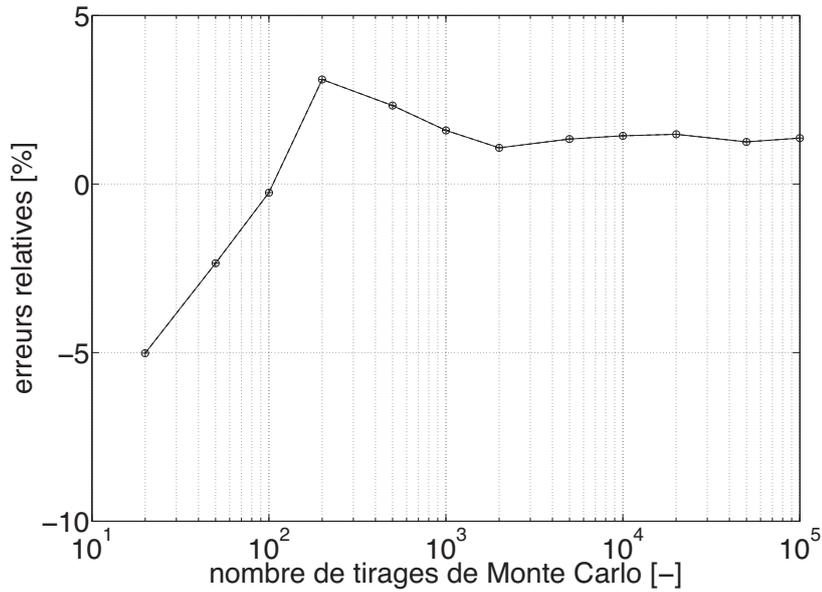


FIGURE 4.8 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo pour l'évaluation de q_∂ en utilisant un modèle primal dont les paramètres sont donnés par le tableau 4.2. Les deux courbes coïncident.

$L_s = 0.3$. Ainsi, dans la figure 4.8, nous observons l'erreur induite aussi bien par l'usage d'un nombre de réalisations de Monte Carlo fini que par l'usage d'un patch stochastique.

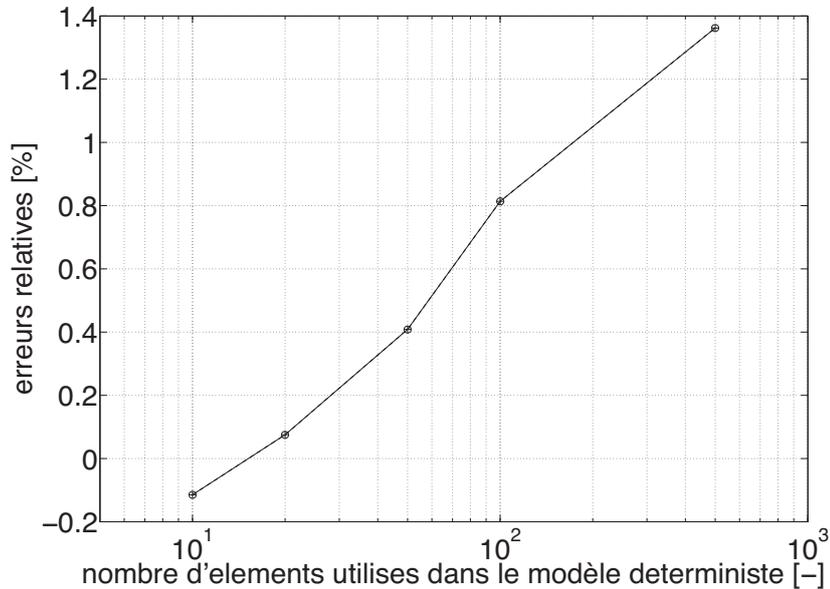


FIGURE 4.9 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction de N_d pour l'évaluation de q_∂ en utilisant un modèle primal dont les paramètres sont donnés par le tableau 4.3. Les deux courbes coïncident.

Sur la figure 4.9, lorsque le nombre d'éléments utilisés pour la discrétisation du modèle déterministe évolue de 10 à 500, l'erreur croît de -0.1% à 1.4% . L'erreur ne tend pas

vers zéro mais vers l'erreur due à la modélisation Arlequin avec un patch de demi-largeur $L_p = 0.3$. Comme précédemment, les courbes présentées montrent l'évolution de l'erreur due à la discrétisation du modèle déterministe mais aussi due à la modélisation Arlequin.

4.3.2 Exemple B : étude de l'évolution de l'erreur relative associée à l'estimation de q_v

Le problème adjoint est décrit sur la figure 4.5. Les figures 4.10-4.12 montrent l'évolution de l'erreur vraie η_{ref} et de l'erreur estimée η_e en fonction de la demi-largeur du patch (figure 4.10), en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour le modèle primal (figure 4.11) et en fonction du nombre d'éléments utilisés pour la discrétisation du modèle déterministe (figure 4.12).

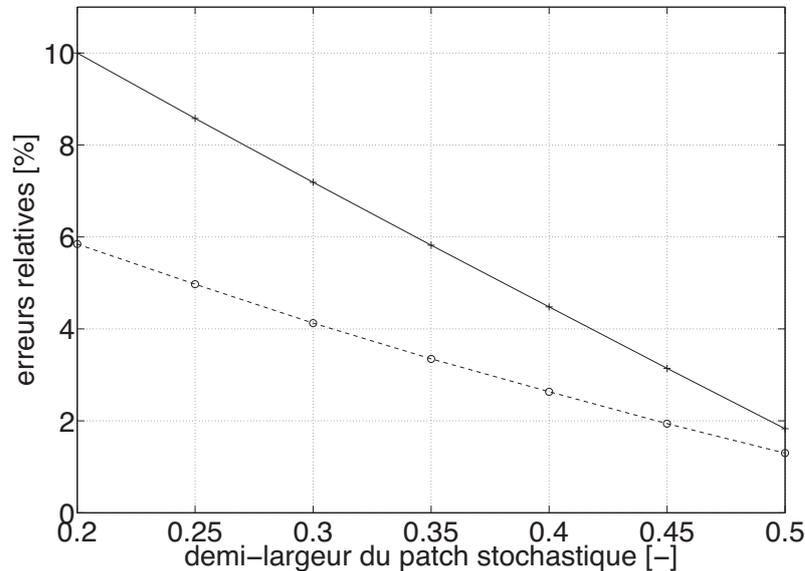


FIGURE 4.10 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction de la demi-largeur du patch pour l'évaluation de q_v en utilisant un modèle primal dont les paramètres sont donnés par le tableau 4.1.

Sur la figure 4.10, lorsque la demi-largeur du patch évolue de 0.2 à 0.5, l'erreur vraie décroît de 10% à 1.8%. Comme précédemment, même avec un patch recouvrant la totalité du domaine, une erreur résiduelle persiste. Ici, l'erreur estimée évolue de la même manière. Cependant, l'estimation, qui varie de 5.8% à 1.3%, est beaucoup plus optimiste (dans le sens où elle donne une erreur plus faible que l'erreur vraie). Contrairement au cas associé à la quantité q_∂ , la non-correspondance de l'erreur estimée avec l'erreur vraie vient d'une part du fait que le problème adjoint n'est pas parfaitement résolu (principalement car le chargement du problème est directement défini par la solution du modèle primal), d'autre part de la linéarisation de $q(u_{ex}) - q(u_{arl})$ autour de u_{arl} .

Encore une fois, sur la figure 4.11, l'erreur estimée ne correspond pas à l'erreur vraie. De plus, comme précédemment, l'erreur vraie ne tend pas vers zéro mais vers 7%, qui correspond à l'erreur vraie due à l'utilisation de la méthode Arlequin pour $L_s = 0.3$. Dès lors, pour isoler l'erreur induite par le paramètre MC , nous proposons d'étudier dans la suite (voir section 4.3.3), l'erreur commise lorsque le problème de référence est aussi un

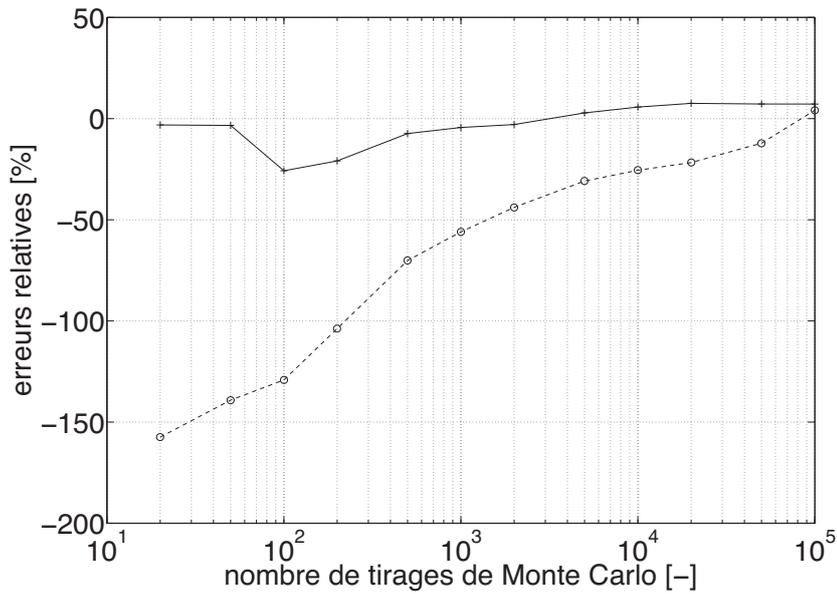


FIGURE 4.11 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo pour l'évaluation de q_v en utilisant un modèle primal dont les paramètres sont donnés par le tableau 4.2.

problème Arlequin dont le patch a la même taille ($L_s = 0.3$).

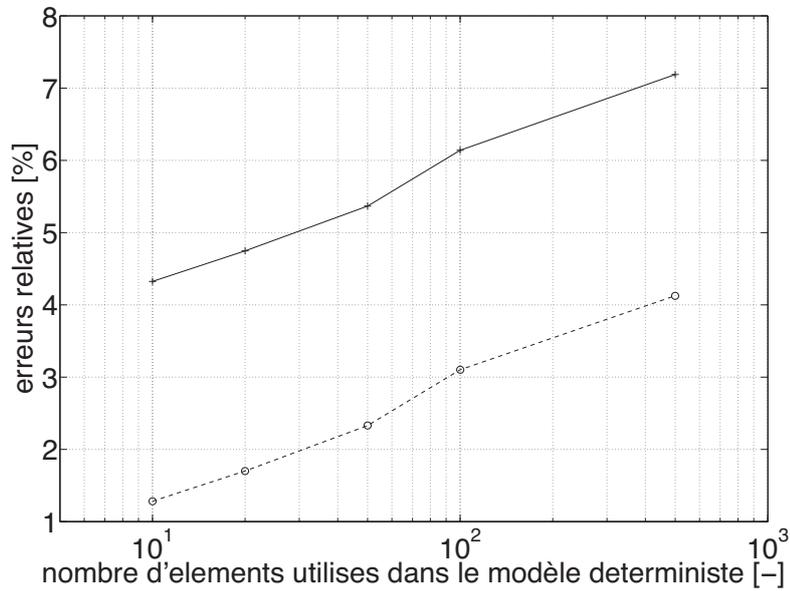


FIGURE 4.12 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction de N_d pour l'évaluation de q_v en utilisant un modèle primal dont les paramètres sont donnés par le tableau 4.3.

Comme pour les deux précédents paramètres, sur la figure 4.12, l'erreur estimée ne correspond pas à l'erreur vraie. L'erreur vraie tend vers l'erreur vraie due à l'utilisation de la méthode Arlequin pour $L_s = 0.3$ ($\approx 7\%$). L'erreur estimée correspond à l'erreur vraie translatée de 3%. Cette valeur correspond en fait à l'écart entre l'erreur estimée et l'erreur

réel pour $L_s = 0.3$ dans la figure 4.10. Ainsi, la discrétisation du modèle déterministe, seule, ne semble que très peu intervenir dans la qualité de l'estimation de l'erreur relative à cette quantité d'intérêt.

4.3.3 Étude des paramètres MC et N_d lorsque le modèle de référence est un modèle Arlequin

Les paramètres MC et N_d conduisent respectivement la discrétisation selon la dimension stochastique et la discrétisation spatiale du modèle déterministe. Ils paramètrent plus précisément la discrétisation du modèle Arlequin continu utilisé.

Pour étudier l'influence de ces paramètres seuls, nous proposons d'étudier les variations de l'erreur vraie et estimée lorsque l'on prend comme modèle de référence un modèle Arlequin dont la taille du patch est la même que celui du modèle primal (voir tableaux 4.4 et 4.5). Le choix d'étudier l'erreur entre deux modèles Arlequin plutôt que deux mono-modèles n'est pas anodin. Il est lié aux différentes étapes permettant de passer d'un problème de référence décrit par un mono-modèle continu à un problème approché Arlequin discrétisé que l'on détaillera dans la suite (section 4.5).

modèle	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s
référence	Arlequin	0.3	0.1	100 000	500	0.002
primal	Arlequin	0.3	0.1	[20, 100 000]	500	0.002
adjoint	Arlequin	0.3	0.1	100 000	500	0.002

TABLE 4.4 – Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de MC en prenant un modèle Arlequin comme référence.

modèle	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s
référence	Arlequin	0.3	0.1	100 000	500	0.002
primal	Arlequin	0.3	0.1	100 000	[10, 500]	0.002
adjoint	Arlequin	0.3	0.1	100 000	500	0.002

TABLE 4.5 – Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de N_d en prenant un modèle Arlequin comme référence.

Les figures 4.13 et 4.14 montrent l'évolution des erreurs vraie η_{ref} et estimée η_e en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour l'évaluation de la quantité q_∂ et de q_v respectivement, lorsque le modèle de référence est décrit par un modèle Arlequin dont la taille du patch est la même ($L_s = 0.3$).

De même, les figures 4.15 et 4.16 montrent l'évolution des erreurs vraie η_{ref} et estimée η_e en fonction du nombre d'éléments utilisée pour la discrétisation du modèle déterministe pour l'évaluation de la quantité q_∂ et de q_v respectivement, lorsque le modèle de référence est décrit par un modèle Arlequin dont la taille du patch est la même ($L_s = 0.3$).

Dans ces cas, nous remarquons que les erreurs vraies tendent effectivement vers zéro. Les erreurs relatives au seul paramètre MC d'un côté, et au seul paramètre N_d de l'autre, sont dès lors bien prise en compte. Les erreurs vraies représentées ici correspondent aux évolutions présentées dans les figures 4.8, 4.9, 4.11 et 4.12 translatées d'une valeur correspondant à l'erreur commise en utilisant un patch de taille $L_s = 0.3$ (environ 1.4% pour la quantité q_∂ et environ 7% pour la quantité q_v).

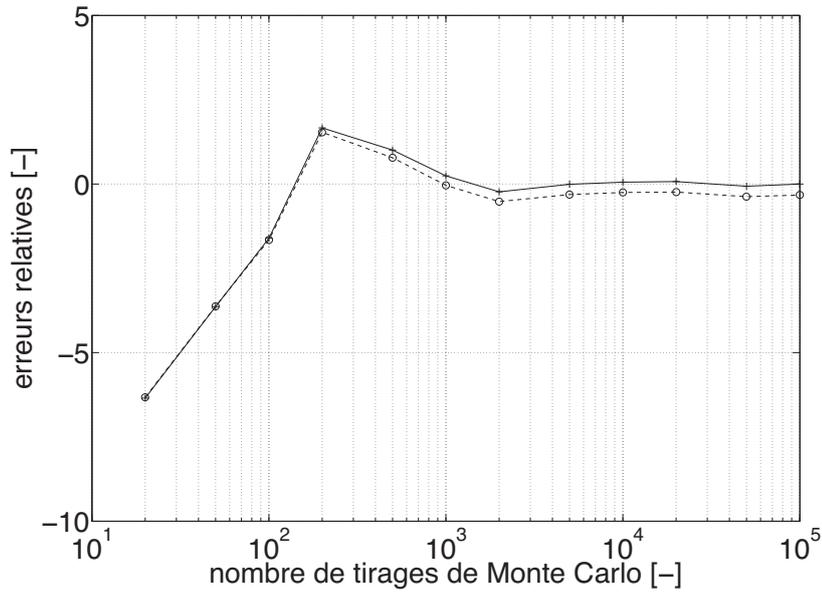


FIGURE 4.13 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo pour l'évaluation de q_∂ en utilisant les modèles dont les paramètres sont donnés dans le tableau 4.4.

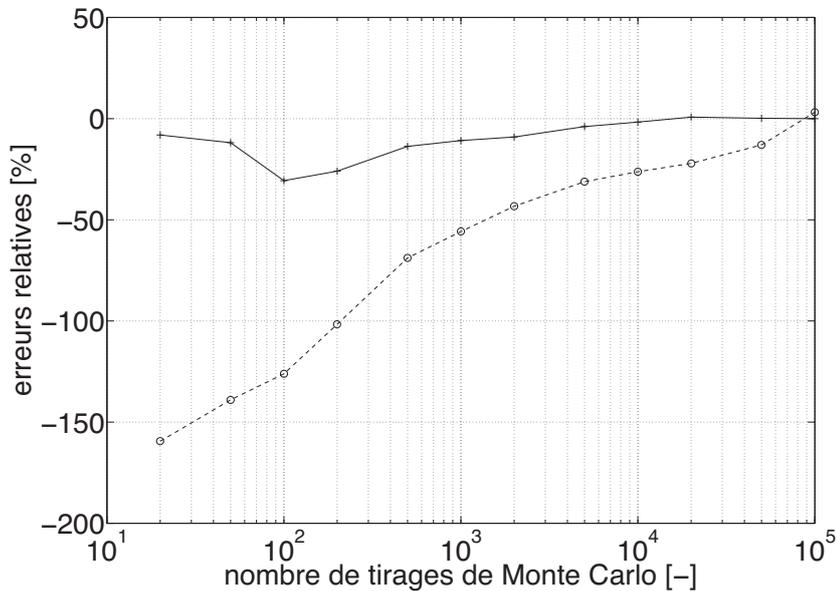


FIGURE 4.14 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo pour l'évaluation de q_v en utilisant les modèles dont les paramètres sont donnés dans le tableau 4.4.

Lorsque un modèle Arlequin est utilisé comme modèle de référence, nous remarquons que l'erreur estimée, y compris dans le cas de la quantité linéaire q_∂ , ne correspond pas parfaitement à l'erreur vraie. En effet, la coïncidence entre les deux erreurs n'est prouvée que dans le cas de l'utilisation de mono-modèles pour le problèmes adjoint et de référence. Cependant l'erreur estimée reste proche de l'erreur vraie (au moins pour la quantité q_∂).

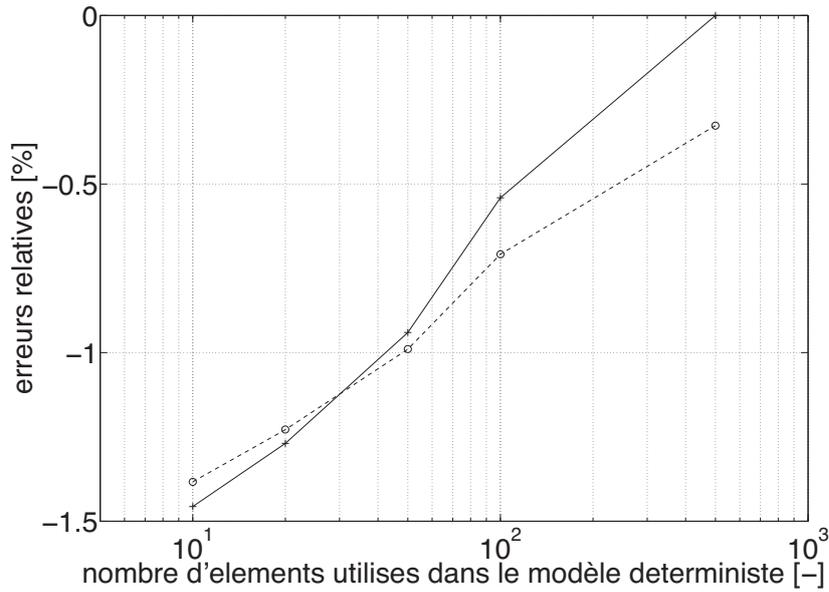


FIGURE 4.15 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction de N_d pour l'évaluation de q_∂ en utilisant les modèles dont les paramètres sont donnés dans le tableau 4.5.

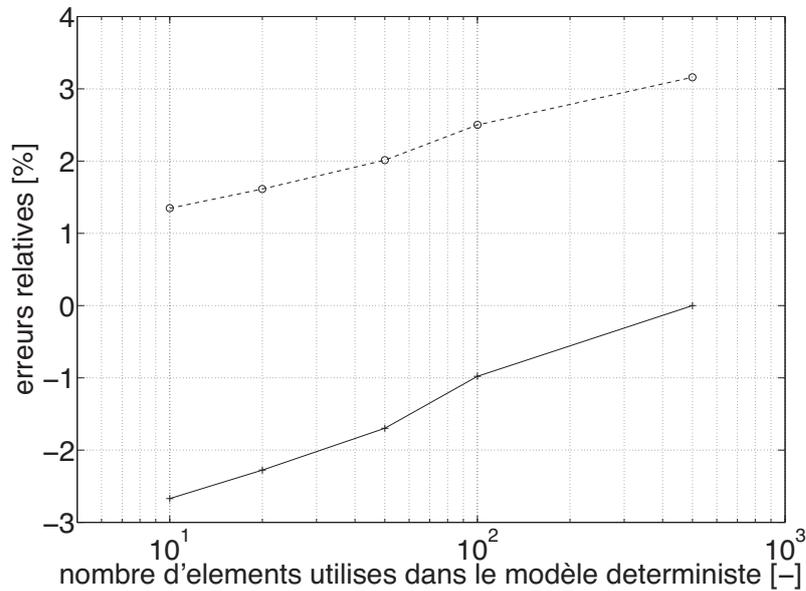


FIGURE 4.16 – Évolution (en %) des erreurs relatives η_e (tirets) et η_{ref} (ligne continue) en fonction du nombre d'éléments du modèle déterministe pour l'évaluation de q_v en utilisant les modèles dont les paramètres sont donnés dans le tableau 4.5.

4.3.4 Conclusion générale sur l'influence des paramètres

Nous avons étudié pour les quantités d'intérêt q_∂ et q_v , l'influence sur les erreurs vraie et estimée de la taille du patch, du nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées et de la discrétisation spatiale du modèle déterministe. Lorsque le modèle adjoint est résolu avec

suffisamment de précision, comme attendu par la théorie décrite précédemment, l'erreur estimée est très proche de l'erreur vraie dans le cas de la quantité d'intérêt linéaire q_∂ .

Comme nous l'avons remarqué, lorsque que l'on étudie directement l'erreur commise en utilisant un modèle Arlequin dont le nombre de réalisations de Monte Carlo évolue, l'erreur ne tend pas vers zéro mais vers l'erreur correspondante à l'usage d'un patch seul. L'étude de l'erreur par rapport à un modèle de référence Arlequin, dont la taille de patch est la même, permet alors d'isoler l'erreur due à l'usage de la technique de Monte Carlo seule ou à la discrétisation du modèle déterministe seule

4.4 Étude de l'approximation du modèle adjoint par la méthode Arlequin pour l'évaluation de q_∂

Dans la suite, le problème adjoint est aussi décrit par la méthode Arlequin. Il s'agit donc d'étudier la qualité de l'estimation de l'erreur en fonction du paramétrage du problème adjoint.

Afin de ne pas accroître le temps de calcul relatif à l'estimation de l'erreur, les paramètres du modèle adjoint doivent être choisis de manière judicieuse. Des paramètres trop grossiers conduisent à une estimation peu précise de l'erreur vraie, et des paramètres trop fins nuisent au temps de calcul. Nous illustrons de manière numérique, dans cette section, cette problématique lors de l'évaluation de la quantité q_∂ . L'évolution de la précision de l'estimation est étudiée lorsque les paramètres du modèle adjoint varient. Nous nous limiterons ici aux paramètres :

- L_{sa} : la demi-largeur du patch stochastique utilisé pour le modèle adjoint (lorsque le paramètre correspondant L_{sp} du modèle primal varie),
- MC_a : le nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour la résolution du modèle adjoint (lorsque le paramètre correspondant MC_p du modèle primal varie),
- N_{da} : le nombre d'éléments utilisés pour la discrétisation du modèle déterministe dans la résolution du modèle adjoint (lorsque le paramètre correspondant N_{dp} du modèle primal varie).

Le but est d'avoir une idée sur le degré d'enrichissement à utiliser pour le modèle adjoint (calibration du modèle adjoint) pour obtenir une estimation correcte de l'erreur vraie.

4.4.1 Influence du paramètre L_s pour l'estimation de q_∂

modèles	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s	N_{ref}
référence	mono	-	-	100 000	-	-	500
primal	Arlequin	[0.2, 0.5]	0.1	100 000	500	0.002	-
adjoint	Arlequin	[0.2, 0.5]	0.1	100 000	500	0.002	-

TABLE 4.6 – Définition des modèles utilisés pour la calibration du problème adjoint (paramètre L_s) relatif à l'évaluation de q_∂ .

L'ensemble des valeurs des paramètres utilisés ici est décrit dans le tableau 4.6.

Le tableau 4.7 montre l'évolution des erreurs relatives estimée η_e et vraie η_{ref} en fonction de la demi-largeur du patch stochastique utilisé pour le modèle primal (L_{sp}) lorsque

$L_{sp} \setminus L_{sa}$	0.2	0.25	0.3	0.35	0.4	0.45	0.5	η_{ref}
0.2	-8.57	19.98	17.17	14.18	11.20	8.21	5.21	1.87
0.25	-	0.57	16.78	13.91	10.92	7.91	4.89	1.62
0.3	-	-	5.96	13.53	10.66	7.65	4.62	1.36
0.35	-	-	-	8.03	10.28	7.39	4.37	1.11
0.4	-	-	-	-	7.67	7.02	4.11	0.85
0.45	-	-	-	-	-	5.65	3.74	0.60
0.5	-	-	-	-	-	-	2.64	0.35

TABLE 4.7 – Évolution (en %) de l'erreur relative estimée η_e en fonction des demi-largeurs des patchs (primal L_{sp} et adjoint L_{sa}) pour l'évaluation de q_∂ avec des modèles définis par le tableau 4.6.

l'adjoint est résolu avec plusieurs longueurs de patch (L_{sa}). Dans ce cas, nous observons globalement un gain d'environ 3% sur la précision de l'erreur estimée lorsque la demi-largeur du patch du modèle adjoint décroît de 0.05. De plus, lorsque la même longueur de patch est utilisée pour l'adjoint et le primal, l'estimation n'est pas du tout correcte.

Une remarque importante concerne l'estimation de l'erreur lorsque le patch du modèle adjoint est le plus grand possible $L_{sa} = 0.5$. Dans ce cas, la différence entre l'erreur vraie et l'erreur estimée est faible (moins de 4%) mais reste significative. Même avec le plus gros patch possible pour le modèle adjoint, la solution du problème adjoint n'est pas aussi bonne que dans la section précédente dans laquelle un mono-modèle est utilisé. Cela provient principalement du fait que la zone de couplage contraint la solution dans une partie non-nulle de la structure ($[0, 0.1] \cup [0.9, 1]$).

Pour les résultats d'adaptation proposés dans la suite, nous avons choisi de fixer la demi-largeur du patch du modèle adjoint à $L_{sa} = 0.45$, indépendamment de la taille du patch du modèle primal. Ce choix n'est pas unique. Cependant, sous réserve de fixer aussi les autres paramètres, ce choix permet dès lors de n'utiliser qu'un seul problème adjoint pour l'ensemble du processus d'adaptation (au moins dans le cas de la quantité d'intérêt linéaire).

4.4.2 Influence du paramètre MC pour l'estimation de q_∂

modèles	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s	N_{ref}
référence	mono	-	-	100 000	-	-	500
primal	Arlequin	0.3	0.1	[20, 100 000]	500	0.002	-
adjoint	Arlequin	0.45	0.1	[20, 100 000]	500	0.002	-

TABLE 4.8 – Définition des modèles utilisés pour la calibration du problème adjoint (paramètre MC) relatif à l'évaluation de q_∂ .

L'ensemble des valeurs des paramètres utilisés ici est décrit dans le tableau 4.8.

Le tableau 4.9 montre l'évolution des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour le modèle primal (MC_p) lorsque le modèle adjoint est résolu avec MC_a réalisations de Monte Carlo. L'estimation est meilleure lorsque le nombre de réalisations utilisées pour le modèle adjoint augmente. Pour

$MC_p \setminus MC_a$	20	200	2 000	20 000	100 000	η_{ref}
20	-12.71	-3.59	-0.34	3.20	0.86	-4.96
200	-	-1.28	5.47	7.13	9.47	3.10
2 000	-	-	1.98	4.11	7.34	1.07
20 000	-	-	-	4.52	7.75	1.47
100 000	-	-	-	-	7.65	1.36

TABLE 4.9 – Évolution (en %) de l'erreur relative estimée η_e en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour le model primal (MC_p) et adjoint (MC_a) pour l'évaluation de q_∂ avec des modèles définis par le tableau 4.8.

$MC_p = MC_a = 100\,000$, nous retrouvons notamment la valeur de 7,65% pour l'erreur estimée correspondant à la case ($L_{sp} = 0.3, L_{sa} = 0.45$) du tableau 4.7.

$MC_p \setminus MC_a$	20	200	2 000	20 000	100 000	η_{ref}
20	-19.00	-9.88	-6.63	-5.97	-5.43	-4.96
200	-	-7.57	-0.82	0.84	3.18	3.10
2000	-	-	-4.31	-2.18	1.05	1.07
20 000	-	-	-	-1.77	1.46	1.47
100 000	-	-	-	-	1.36	1.36

TABLE 4.10 – Évolution (en %) de l'erreur relative estimée η_e en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées pour le model primal (MC_p) pour l'évaluation de q_∂ avec des modèles définis par le tableau 4.8 après retrait de la contribution du couplage dans l'erreur (6.29%).

Le tableau 4.10 reprend alors les résultats précédents dans lesquels la contribution de la taille du patch, du modèle adjoint, à l'estimation de l'erreur totale a été retranchée, soit 7.65% – 1.36%. La différence observée entre erreur vraie et erreur estimée, due uniquement à MC_a , est alors inférieure à 3% lorsque $MC_a = 2\,000$, et tombe à moins de 0.5% pour $MC_a = 100\,000$.

Pour les résultats d'adaptation proposés dans la suite, nous avons choisi de fixer le nombre de réalisations du modèle adjoint à $MC_a = 100\,000$. Encore une fois, ce choix n'est pas unique et nous pourrions notamment faire évoluer ce nombre en fonction de MC_p .

4.4.3 Influence du paramètre N_d pour l'estimation de q_∂

modèles	type	L_s	L_c	MC	N_d	h_s	N_{ref}
référence	mono	-	-	100 000	-	-	500
primal	Arlequin	0.3	0.1	100 000	[10, 500]	0.002	-
adjoint	Arlequin	0.45	0.1	100 000	[20, 500]	0.002	-

TABLE 4.11 – Définition des modèles utilisés pour la calibration du problème adjoint (paramètre N_d) relatif à l'évaluation de q_∂ .

L'ensemble des valeurs des paramètres utilisés ici est décrit dans le tableau 4.11.

$N_{dp} \setminus N_{da}$	20	100	500	η_{ref}
10	8.22	7.05	6.18	-0.11
20	8.41	7.24	6.37	0.08
50	-	7.57	6.70	0.41
100	-	7.98	7.10	0.81
500	-	-	7.65	1.36

TABLE 4.12 – Évolution (en %) de l'erreur relative estimée η_e en fonction du nombre d'éléments utilisées pour la discrétisation du modèle déterministe primal (N_{dp}) et adjoint (N_{da}) pour l'évaluation de q_∂ avec des modèles définis par le tableau 4.11.

Le tableau 4.12 montre l'évolution des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction du nombre d'éléments N_{dp} utilisés pour la discrétisation du modèle déterministe pour le problème primal lorsque le problème adjoint est résolu avec N_{da} éléments pour le modèle déterministe. L'estimation est meilleure lorsque le nombre d'éléments utilisés pour le modèle adjoint augmente. Pour $N_{dp} = N_{da} = 500$, nous retrouvons notamment la valeur de 7,65% pour l'erreur estimée correspondant à la case ($L_{sp} = 0.3, L_{sa} = 0.45$) du tableau 4.7.

$N_{dp} \setminus N_{da}$	20	100	500	η_{ref}
10	1.93	0.76	-0.11	-0.11
20	2.12	0.95	0.08	0.08
50	-	1.28	0.41	0.41
100	-	1.69	0.81	0.81
500	-	-	1.36	1.36

TABLE 4.13 – Évolution (en %) de l'erreur relative estimée η_e en fonction du nombre d'éléments utilisées pour la discrétisation du problème primal (N_{dp}) pour l'évaluation de q_∂ avec des modèles définis par le tableau 4.11 après retrait de la contribution du couplage dans l'erreur (6.29%).

Le tableau 4.13 reprend alors les résultats précédents dans lesquels la contribution de la taille du patch à l'erreur totale a été retranchée. Nous pouvons alors remarquer qu'avec seulement 100 éléments pour le modèle déterministe du problème adjoint, la différence entre l'erreur vraie et l'erreur estimée est inférieure à 0.9%.

Pour les résultats d'adaptation proposés dans la suite, nous avons choisi de fixer le nombre d'éléments utilisés à $N_{da} = 500$ en utilisant ainsi qu'un problème adjoint pour l'ensemble du processus d'adaptation.

4.4.4 Conclusions générales sur l'approximation du modèle adjoint

Dès lors que le modèle adjoint est approché par la méthode Arlequin, l'estimation perd en précision par rapport à une résolution mono-modèle fine. Cependant, lorsque le patch est suffisamment grand, la différence entre l'erreur vraie et l'erreur estimée reste relativement faible (moins de 4%). Dans ce cas, l'erreur η_e surestime l'erreur vraie. Quant au nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées, l'estimation est de plus en plus précise lorsque le nombre de réalisations augmente. Par exemple, si l'on prend 20 000 réalisations, et en considérant que l'on a toujours l'effet de la taille du patch sur la solution du problème adjoint, l'erreur estimée est relativement précise (moins de 3% d'écart). L'étude de la

discrétisation du modèle déterministe du problème adjoint montre, de la même manière, après avoir retiré la contribution liée à la taille du patch, que l'estimation obtenue est bonne (moins de 0.9% d'écart avec $N_{da} = 100$ éléments), même si la discrétisation du problème adjoint n'est pas aussi fine que le problème de référence.

Finalement, pour l'adaptation, nous choisissons de fixer un seul jeu de paramètres pour le modèle adjoint en utilisant un patch assez grand ($L_{sa} = 0.45$), un nombre élevé de réalisations de Monte Carlo ($MC_a = 100\ 000$) et un nombre d'éléments pour discrétiser le modèle déterministe de $N_{da} = 500$. Le pas de discrétisation spatiale pour le modèle stochastique est lui fixé à $h_s = 0.002$. Ces choix ne sont pas uniques. Le but de ce chapitre n'étant pas d'étudier de manière exhaustive l'approximation optimale du problème adjoint, un seul jeu de paramètres pour le problème adjoint est utilisé par quantité d'intérêt.

4.5 Séparation des sources d'erreur et principe d'adaptation

L'erreur introduite par l'usage d'un modèle approché par la méthode Arlequin est causée par plusieurs sources. Si l'on décompose le processus de résolution, nous distinguons en effet trois étapes menant à la résolution approchée du modèle de référence (voir figure 4.17) :

- l'utilisation d'un problème décrit par un modèle Arlequin continu,
- la discrétisation spatiale des modèles continus de la méthode Arlequin,
- la discrétisation selon la dimension stochastique (en utilisant ici la technique de Monte Carlo par exemple).

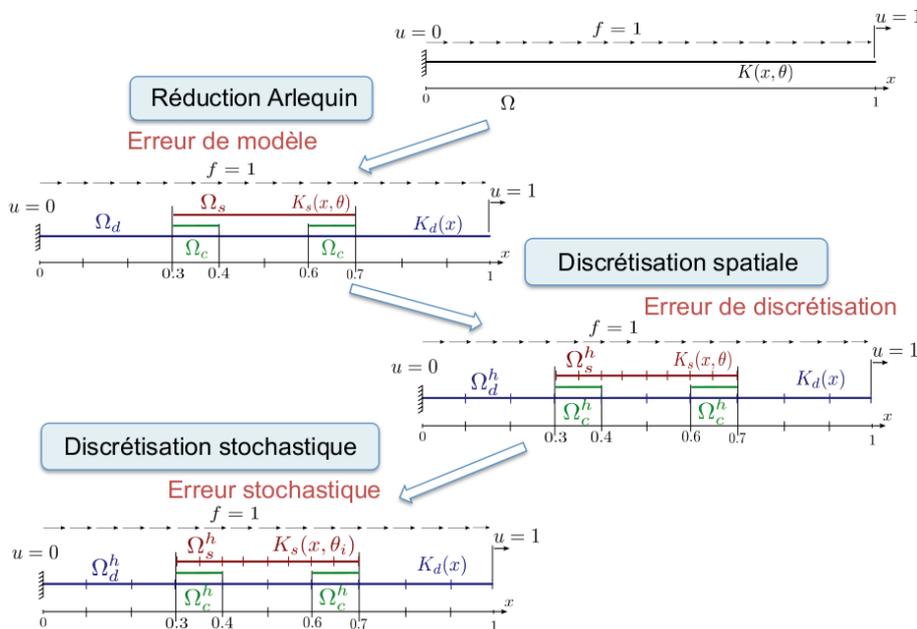


FIGURE 4.17 – Exemple d'étapes du processus d'approximation pour la résolution d'un problème stochastique 1D.

Chaque étape décrite précédemment est conduite par un ou des paramètres spécifiques. Le modèle Arlequin est ainsi principalement paramétré par la taille du patch et de la zone de couplage. La discrétisation spatiale est pilotée principalement par la taille des éléments utilisés pour chaque domaine (Ω_d , Ω_s et Ω_c). Enfin, si la technique de Monte Carlo est utilisée pour traiter la discrétisation selon la dimension stochastique, la troisième étape est

principalement paramétrée par le nombre de réalisations utilisées. Le but de cette section est de proposer une démarche pour définir et estimer les erreurs induites par chaque étape.

4.5.1 Introduction et définition des modèles intermédiaires et indicateurs d'erreur associés

Pour identifier et estimer les différentes erreurs, la technique proposée est basée sur l'introduction de problèmes intermédiaires pris successivement comme référence. Dans la suite, le mot "continu" désigne des modèles non discrétisés (ni en espace, ni suivant la dimension stochastique); le mot "discrétisé" désigne des modèles uniquement discrétisés en espace; enfin le mot "approché" désigne les modèles discrétisés en espace et selon la dimension stochastique. Nous définissons (ou rappelons, lorsqu'ils ont déjà été introduits) les problèmes suivants :

- Problème de référence : mono-modèle continu stochastique décrit par l'équation (4.2) (la solution est notée u_{ex} et le résidu associé \mathcal{R} introduit par l'équation (4.8)).
- Premier modèle intermédiaire : modèle Arlequin couplant un modèle déterministe continu avec un modèle stochastique continu. La solution est notée (u_d, u_s, λ) , la solution mono-modèle associée reconstruite u_{arl}^c , et le résidu associé \mathcal{R}^c . Ce problème est décrit par les équations (4.3) et par la figure 4.2. Le résidu associé $\mathcal{R}^c((\cdot, \cdot, \cdot); (\cdot, \cdot, \cdot))$ est défini comme :

$$\mathcal{R}^c((u_d, u_s, \lambda); (v_d, v_s, \mu)) = \mathcal{L}^c(v_d, v_s) - \mathcal{A}^c((u_d, u_s, \lambda), (v_d, v_s, \mu))$$

avec

$$\mathcal{L}^c(v_d, v_s) = \ell_d(v_d) + \mathcal{L}_s(v_s)$$

et

$$\mathcal{A}^c((u_d, u_s, \lambda), (v_d, v_s, \mu)) = a_d(u_d, v_d) + \mathcal{A}_s(u_s, v_s) + C(\lambda, v_d - v_s) + C(\mu, u_d - u_s)$$

- Second problème intermédiaire (discrétisé) : modèle Arlequin couplant un modèle déterministe discrétisé spatialement à un modèle stochastique discrétisé spatialement (uniquement). La solution est notée $(u_d^h, u_s^h, \lambda^h)$, la solution mono-modèle associée reconstruite u_{arl}^h , et le résidu associé \mathcal{R}^h . Ce problème est défini à partir du précédent en utilisant par exemple la MEF. Le résidu associé $\mathcal{R}^h((\cdot, \cdot, \cdot); (\cdot, \cdot, \cdot))$ est défini par :

$$\mathcal{R}^h((u_d^h, u_s^h, \lambda^h); (v_d^h, v_s^h, \mu^h)) = \mathcal{L}^h(v_d^h, v_s^h) - \mathcal{A}^h((u_d^h, u_s^h, \lambda^h), (v_d^h, v_s^h, \mu^h))$$

où \mathcal{L}^h et \mathcal{A}^h correspondent aux formes discrétisées de \mathcal{L}^c et \mathcal{A}^c .

- Problème numérique (approché) : modèle Arlequin couplant un modèle déterministe discrétisé en espace avec un modèle stochastique discrétisé en espace et selon la dimension stochastique en utilisant la technique de Monte Carlo. Ce problème est le seul qui est résolu en pratique (avec le modèle adjoint). La solution obtenue est notée $(u_d^a, u_s^a, \lambda^a)$. Nous allons voir dans la suite comment utiliser cette solution et la solution du modèle adjoint pour dégager des indicateurs d'erreur pour les différentes étapes.

L'erreur totale η peut être décomposée comme suit :

$$\eta = q(u_{ex}) - q(u_{arl}) = [q(u_{ex}) - q(u_{arl}^c)] + [q(u_{arl}^c) - q(u_{arl}^h)] + [q(u_{arl}^h) - q(u_{arl})]$$

Cette décomposition permet de définir les erreurs suivantes :

- l'erreur stochastique (principalement due à la discrétisation selon la dimension stochastique) :

$$\eta_\theta = q(u_{arl}^h) - q(u_{arl})$$

- l'erreur de discrétisation (principalement due à la discrétisation spatiale) :

$$\eta_h = q(u_{arl}^c) - q(u_{arl}^h)$$

- l'erreur de modèle, introduite par l'utilisation du modèle Arlequin (due à l'utilisation du patch et d'un modèle homogénéisé dans Ω_d) :

$$\eta_m = q(u_{ex}) - q(u_{arl}^c)$$

Ces erreurs ne sont en fait que des indicateurs. En effet, elles ne sont pas indépendantes les unes des autres. Ainsi, en augmentant la taille du patch par exemple, nous introduisons *a priori* plus d'information stochastique. Avec l'ordre des problèmes intermédiaires choisi, la discrétisation suivant la dimension stochastique vient après la discrétisation spatiale. Dès lors, si la discrétisation spatiale est grossière, même en utilisant un grand nombre de réalisations de Monte Carlo, l'information stochastique contenue dans le modèle sera faible. Ce choix de succession de modèles intermédiaires n'est pas unique et un choix particulier ne paraît pas plus pertinent qu'un autre.

À l'aide de la solution (u_d^a, u_s^a) du problème Arlequin primal (4.3), de la solution (p_d^a, p_s^a) du problème Arlequin adjoint (4.6) et des différents résidus \mathcal{R} , \mathcal{R}^c et \mathcal{R}^h , nous pouvons estimer les différentes erreurs en utilisant la propriété (4.7) :

$$\begin{aligned} \eta_\theta &\simeq \mathcal{R}^h(u_{arl}, p_{arl}) \\ \eta_h &= [q(u_{arl}^c) - q(u_{arl})] - [q(u_{arl}^h) - q(u_{arl})] \\ &\simeq \mathcal{R}^c(u_{arl}, p_{arl}) - \mathcal{R}^h(u_{arl}, p_{arl}) \\ \eta_m &= [q(u_{ex}) - q(u_{arl})] - [q(u_{arl}^c) - q(u_{arl})] \\ &\simeq \mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl}) - \mathcal{R}^c(u_{arl}, p_{arl}) \end{aligned}$$

où (u_{arl}, p_{arl}) sont des projections appropriées de (u_d^a, u_s^a) et (p_d^a, p_s^a) pour le calcul des résidus. Le problème adjoint étant approché par un modèle Arlequin, ces erreurs ne sont que des estimations. Plus précisément, nous négligeons les termes $\mathcal{R}(u_{arl}, p_{ex} - p_{arl})$, $\mathcal{R}^c(u_{arl}, p_{ex} - p_{arl})$ et $\mathcal{R}^h(u_{arl}, p_{ex} - p_{arl})$.

4.5.2 Stratégie d'adaptation

Le processus d'adaptation, basé sur un algorithme glouton, est décrit dans la figure 4.5.2. L'approche consiste en une succession d'étapes :

1. un ensemble de paramètres initiaux est utilisé pour résoudre un problème primal et un problème adjoint (tous deux de type Arlequin) ;
2. l'erreur totale η relative à la quantité d'intérêt choisie est estimée ;
3. si l'erreur est supérieure à un critère d'arrêt donné, nous suivons la procédure de séparation des sources d'erreur ;
4. la source dominante est identifiée et le paramètre correspondant est raffiné ;
5. le processus continue tant que l'erreur totale n'a pas atteint le critère d'arrêt et tant que le paramètre contribuant à l'erreur dominante peut être raffiné.

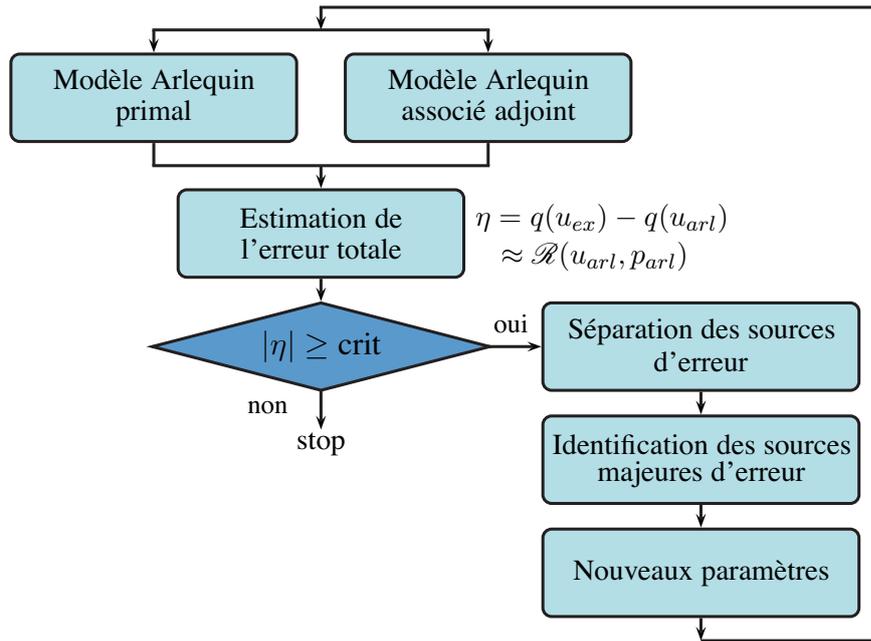


FIGURE 4.18 – Exemple d'algorithme du processus d'adaptation.

Remarque 7 Cette stratégie n'est pas unique. En effet, l'étape 4 peut notamment être modifiée : nous pouvons par exemple identifier les deux erreurs dominantes et raffiner les paramètres correspondant.

4.6 Résultats d'adaptation

4.6.1 Exemple d'adaptation pour un modèle 1D

Cette partie présente des résultats d'adaptation avec le premier problème 1D, défini dans la section 3.4.1 du chapitre 3, lorsqu'il est utilisé pour estimer les quantités q_∂ (4.4) et q_v (4.5).

Dans cette section, les paramètres étudiés sont : la demi-largeur du patch (L_s), le nombre de réalisations de Monte Carlo utilisées (MC) et le nombre d'éléments utilisés pour la discrétisation spatiale du modèle déterministe (N_d). Comme précédemment, pour une représentation du champ stochastique optimal, h_s , la taille des éléments utilisés pour le modèle stochastique est fixé à 0.002. La taille de la zone de couplage ne sera pas étudiée, elle est fixée à $L_c = 0.1$. Sa discrétisation spatiale est basée sur celle du modèle stochastique.

La figure 4.19 et le tableau 4.14 représentent les erreurs associées à q_∂ . Dans ce cas, la source d'erreur dominante provient d'abord du faible nombre de réalisations utilisées (erreur stochastique), puis du couplage Arlequin (erreur de modèle). En augmentant la finesse des paramètres associés, l'erreur relative η_e décroît de 8.7% pour le jeu de paramètres initial à 6.6%. L'erreur vraie correspondant décroît quand à elle de 14% à 0.7%. Pour la première itération, l'erreur stochastique compense en fait l'erreur de modèle, ce qui donne une erreur totale relative estimée inférieure à 10%. L'algorithme s'arrête en fait à l'itération 3 dans laquelle l'erreur de modèle reste dominante. Cependant, la taille du patch maximale autorisée est déjà atteinte. L'itération 4, rajouté manuellement, correspond au raffinement

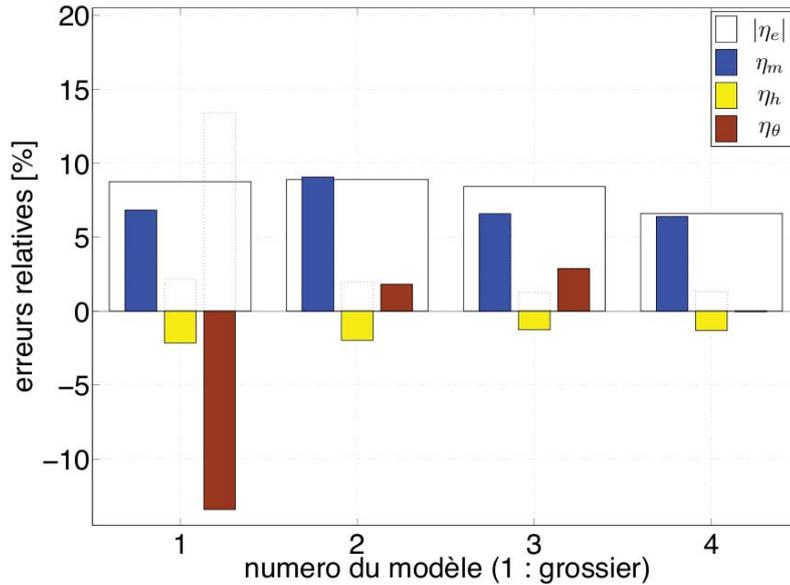


FIGURE 4.19 – Évolution (en %) des erreurs relatives : erreur totale η_e (blanc), erreur de modèle η_m (rouge), erreur de discrétisation η_h (jaune) et erreur stochastique η_θ (marron) pendant le processus d'adaptation concernant l'approximation de q_∂ .

modèle	1	2	3	4
L_s	0.2	0.2	0.45	0.45
MC	5	200	200	2 000
N_d	20	20	20	20
h_s	0.002	0.002	0.002	0.002
η_m	6.82	9.07	6.58	6.39
η_m^{ref}	1.58	1.89	0.61	0.59
η_h	-2.16	-1.97	-1.27	-1.31
η_h^{ref}	4.32	-1.50	-1.03	-1.26
η_θ	-13.42	1.80	2.88	-0.05
η_θ^{ref}	-19.95	2.10	2.65	-0.09
$ \eta_e $	8.76	8.9	8.42	6.60
$ \eta_{ref} $	14.05	2.48	2.23	0.77

TABLE 4.14 – Évolution des paramètres et des erreurs relatives (vraies et estimées, en %) pour l'évaluation de q_∂ .

du paramètre lié à la deuxième source d'erreur dominante : la troncature de Monte Carlo. Cette itération montre alors qu'en diminuant l'erreur stochastique, l'erreur totale peut diminuer aussi.

Le tableau 4.14 montre aussi l'évolution des différentes erreurs vraies relatives à l'erreur de modèle, l'erreur de discrétisation et l'erreur de Monte Carlo. Comme nous pouvons le constater, les différentes estimations d'erreur ($\eta_m, \eta_h, \eta_\theta$) donnent une bonne indication des erreurs vraies correspondantes, voire très bonne pour les estimations de η_θ et η_h . L'approximation du modèle adjoint par un modèle Arlequin n'a d'influence que sur les estimations de

l'erreur totale et de l'erreur de modèle (obtenue en soustrayant les autres erreurs estimées de l'erreur totale).

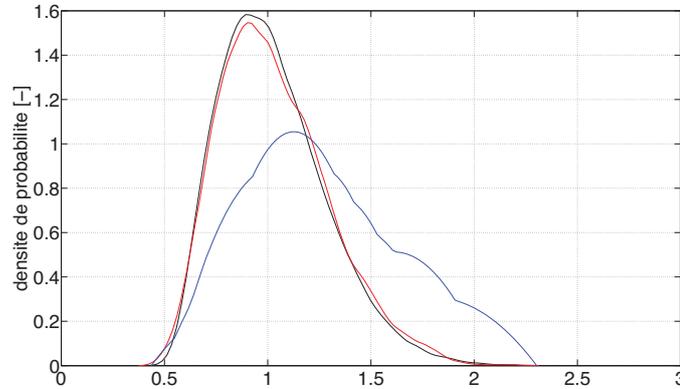


FIGURE 4.20 – Allure des densités de probabilité de la quantité q^θ obtenues à partir du modèle 1 (en bleu), du modèle 4 (en rouge) et du mono-modèle de référence (en noir) pour l'évaluation de q_∂ .

La figure 4.20 représente les densités de probabilité de la quantité :

$$q^\theta = \frac{1}{0.05} \int_{0.45}^{0.5} \frac{du(x, \theta)}{dx} dx$$

reconstruites par la méthode d'estimation par noyau d'Epanechnikov [Epanechnikov, 1969] à partir de résultats obtenus par le modèle le plus grossier (1), le plus fin (4), et le modèle de référence dans le processus d'adaptation relative à la quantité q_∂ . Nous pouvons y observer la qualité du processus qui permet de passer de la densité bleu à la densité rouge, très proche de la densité de référence en noir, bien que l'adaptation ne concernait que l'espérance de q^θ .

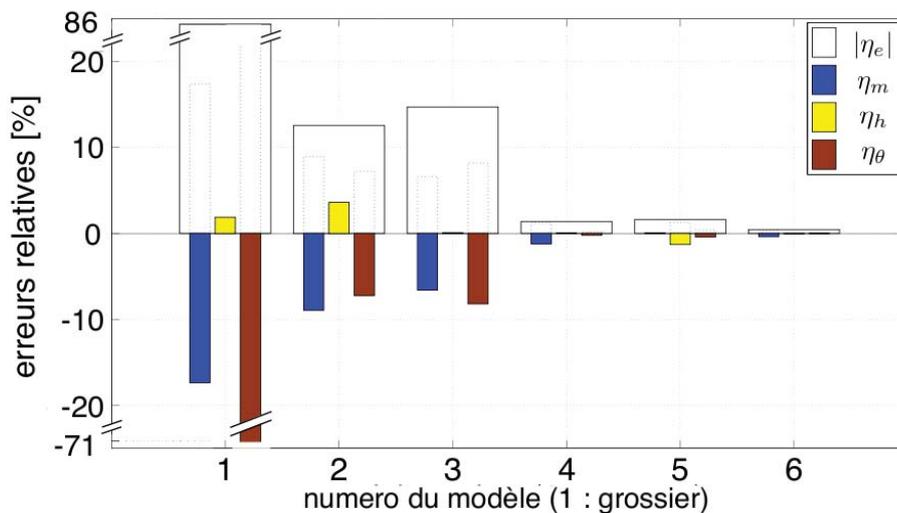


FIGURE 4.21 – Évolution (en %) des erreurs relatives : erreur totale η_e (blanc), erreur de modèle η_m (rouge), erreur de discrétisation η_h (jaune) et erreur stochastique η_θ (marron) pendant le processus d'adaptation concernant l'approximation de q_v .

modèle	1	2	3	4	5	6
L_s	0.2	0.2	0.3	0.3	0.35	0.35
MC	200	10 000	10 000	50 000	50 000	50 000
N_d	20	20	20	20	20	100
h_s	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
η_m	-17.4	-8.93	-6.61	-1.21	0.07	-0.36
η_θ	-70.77	-7.24	-8.19	-0.22	-0.40	-0.01
η_h	1.89	3.60	0.09	0.06	-1.28	-0.08
$ \eta_e $	86.2	12.6	14.7	1.37	1.61	0.45

TABLE 4.15 – Évolution des paramètres et des erreurs relatives estimées (en %) pour l'évaluation de q_v .

La figure 4.21 et le tableau 4.15 représentent l'erreur associée à q_v . Dans ce cas, l'étude montre que l'erreur dominante est d'abord due à la troncature de Monte Carlo, puis à la modélisation Arlequin, et enfin pour la dernière itération, à la discrétisation du modèle déterministe. En raffinant les paramètres correspondant l'un après l'autre, l'erreur totale relative η_e décroît de 86% à moins de 0.5% en erreur estimée.

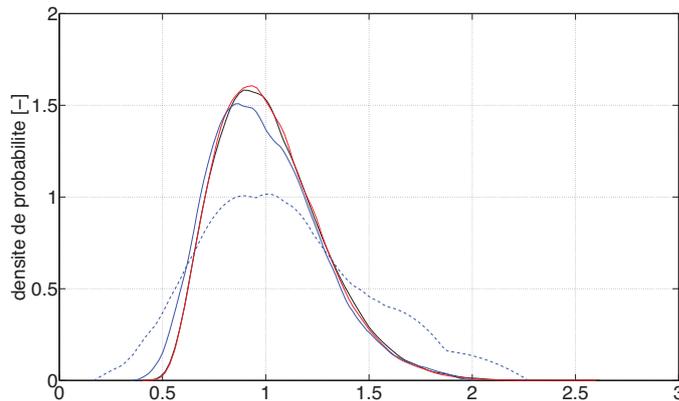


FIGURE 4.22 – Allure des densités de probabilité de la quantité q^θ obtenues à partir du modèle 1 (en bleu), du modèle 1 avec seulement 10 tirages de Monte Carlo (en tirets bleus), du modèle 6 (en rouge) et du mono-modèle de référence (en noir) pour l'évaluation de q_v .

La figure 4.22 représente les densités de probabilité de la quantité q^θ reconstruites par la méthode d'estimation par noyau d'Epanechnikov à partir de résultats obtenus par le modèle le plus grossier (1), le plus fin (6), et le modèle de référence dans le processus d'adaptation relative à la quantité q_v . Nous pouvons remarquer que le modèle paramétré par le premier jeu de paramètre donne en fait un assez bon résultat, proche de la densité de référence. L'erreur estimée sur-estime l'erreur vraie à cause des remarques formulées dans la section 4.3.2. Dans le cas, où l'on choisit un jeu de paramètre identique, mais avec seulement 10 réalisations de Monte Carlo, l'erreur vraie obtenue est bien plus grande et visible par comparaison entre la courbe en tirets bleus et la courbe de référence noir. Finalement, la densité reconstruite à partir du dernier jeu de paramètre (en rouge) est encore plus proche de la densité de référence alors que l'adaptation ne portait ici que sur la variance de la quantité q^θ .

Ces exemples simples d'adaptation montrent l'efficacité de la démarche de séparation des sources d'erreur. En effet, les erreurs estimées stochastique et de discrétisation sont très proches des erreurs vraies associées, au moins à partir de la seconde itération. L'approximation du modèle adjoint par un modèle Arlequin n'impacte alors que l'estimation de l'erreur de modèle. Finalement, grâce à la séparation des sources, nous avons été capables de raffiner les paramètres dont les erreurs associées étaient grandes afin de diminuer efficacement l'erreur totale.

4.6.2 Exemple d'adaptation pour un modèle 2D

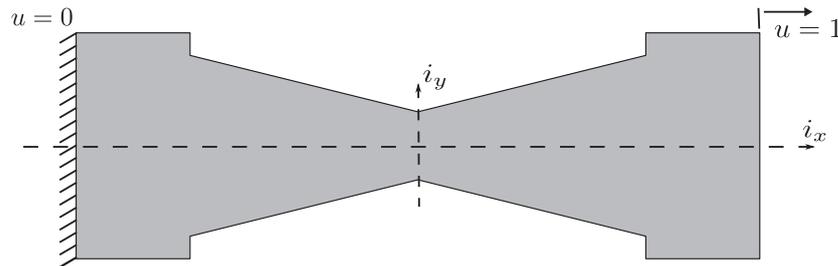


FIGURE 4.23 – Cas 2D.

Nous étudions ici le modèle 2D décrit à la section 3.4.3 du chapitre 3. La structure occupe un domaine Ω inscrit dans une boîte $[-3, 3] \times [-1, 1]$ (voir figure 4.23). La structure est soumise à des conditions de Dirichlet uniquement : $u(x = -3, y, \theta) = 0$, $u(x = 3, y, \theta) = 1$ p.s., et de Neumann $\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$ p.s. pour les autres bords. Le matériau est décrit par un champ stochastique $K(x, y, \theta)$, de loi marginale uniforme de bornes $[0.3542, 2.1938]$ (de moyenne géométrique $1/E[1/K(x, y, \theta)] = 1$), avec un modèle de corrélation de type sinc^2 , de longueur de corrélation associée $L_{cor} = 0.05$ dans chaque direction. Le problème de référence est spatialement discrétisé avec 33792 éléments (dont le diamètre maximal du cercle inscrit est inférieur à 0.006) et avec 5 000 réalisations pour décrire le champ stochastique K .

Nous nous intéressons ici à l'approximation de la composante du gradient moyen suivant l'axe \mathbf{i}_x , où \mathbf{i}_x le vecteur directeur unitaire correspondant à l'axe x , dans une zone donnée Ω_{int} définie sur la figure 4.24. La quantité d'intérêt s'écrit :

$$q_{2D}(u) = E \left[\int_{\Omega_{int}} \nabla u \cdot \mathbf{i}_x d\Omega \right]$$

Le problème de référence est approché en utilisant la méthode Arlequin dont le patch est centré sur la structure. Le modèle adjoint défini par la figure 4.24 avec $\mathbf{p}_q = K(x, y, \theta) \nabla u(x, y, \theta) = \mathbf{i}_x$ est aussi approché par un modèle Arlequin dans lequel le modèle déterministe et le modèle stochastique sont respectivement discrétisés spatialement avec 8448 (diamètre maximal du cercle inscrit inférieur à 0.04) et 6144 (diamètre maximal du cercle inscrit inférieur à 0.006) éléments. La demi-largeur du patch pour le modèle adjoint est fixé à $L_s = 1.8$. De plus, 5 000 réalisations du champ de matériau K sont utilisées. Comme dans le cas 1D, il a été choisi ici, sans restriction sur la méthode proposée, de n'utiliser qu'un modèle adjoint pour l'ensemble du processus d'adaptation (voir figure 4.25).

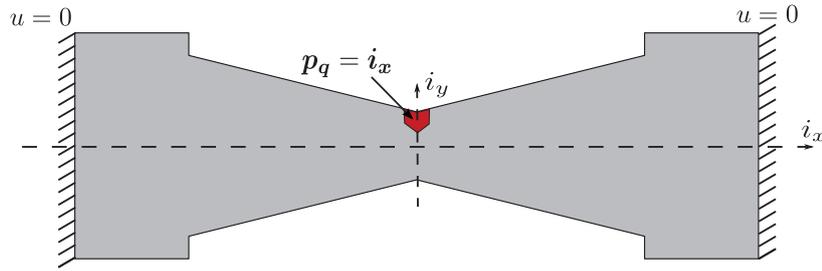


FIGURE 4.24 – Problème adjoint associé à la quantité d'intérêt q_{2D} .

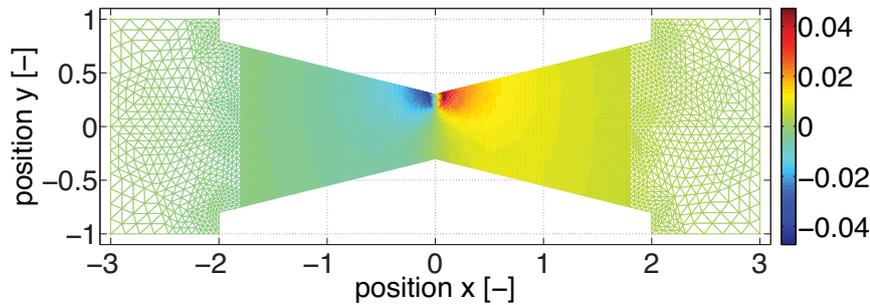


FIGURE 4.25 – Déplacement obtenu pour le problème adjoint résolu par la méthode Arlequin (espérance du déplacement pour le patch).

Dans cette section, nous proposons une stratégie d'adaptation du modèle primal pour diminuer l'erreur relative η_e :

$$\eta_e = \frac{\mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl})}{q_{2D}(u_{arl})}$$

La figure 4.26 et le tableau 4.16 montrent l'évolution des différentes erreurs lors du processus. Nous remarquons que les sources dominantes de l'erreur proviennent de la troncature de Monte Carlo et de la modélisation Arlequin. En raffinant successivement les paramètres liés, l'erreur η_e diminue de 21% à 4.2%. En fin de processus, l'erreur dominante reste liée à la modélisation Arlequin dont le patch ne représente qu'un peu plus de la moitié de la structure.

La figure 4.27 représente les densités de probabilité de la quantité :

$$q_{2D}^\theta = \int_{\Omega_{int}} \nabla u \cdot \mathbf{i}_x \, d\Omega \quad (4.10)$$

reconstruites par la méthode d'estimation par noyau d'Epanechnikov à partir de résultats obtenus par le modèle le plus grossier (1), le plus fin (4), et le modèle de référence dans

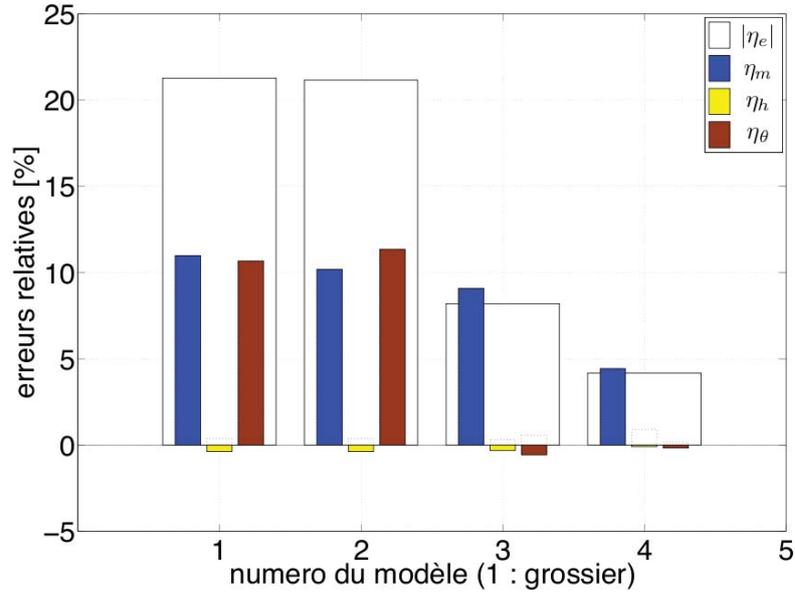


FIGURE 4.26 – Évolution des erreurs relatives : erreur totale η_e (blanc), erreur de modèle η_m (rouge), erreur de discrétisation η_h (jaune) et erreur stochastique η_θ (marron) pendant le processus d'adaptation concernant l'approximation de q_{2D} .

modèle	1	2	3	4
L_s	0.75	0.9	0.9	1.65
MC	5	5	500	500
N_d	528	528	528	528
N_s	3040	3424	3424	6144
η_m	10.98	10.18	6.85	4.43
η_h	-0.38	-0.38	-0.31	-0.09
η_θ	10.67	11.35	-0.57	-0.17
$ \eta_e $	21.28	21.16	8.20	4.17

TABLE 4.16 – Évolution des paramètres et des erreurs relatives estimées (en %) pour l'évaluation de q_{2D} . N_d et N_s représentent le nombre d'éléments utilisés pour la discrétisations du modèle déterministe et du modèle stochastique respectivement. N_s augmente uniquement parce que L_s augmente, le patch n'est pas discrétisé plus finement.

le processus d'adaptation relative à la quantité q_{2D} . De la même manière, l'adaptation des paramètres du modèle a permis de passer de la densité représentée en bleu, relative au modèle grossier, à la densité représentée en rouge, relative au dernier modèle, bien plus proche de la densité de référence (surtout pour l'évaluation de l'espérance de q_{2D}^θ).

Comme pour l'adaptation précédente, la technique de séparation des sources a permis d'identifier les sources d'erreur dominantes. Les paramètres associés ont pu alors être raffinés pour réduire l'erreur totale.

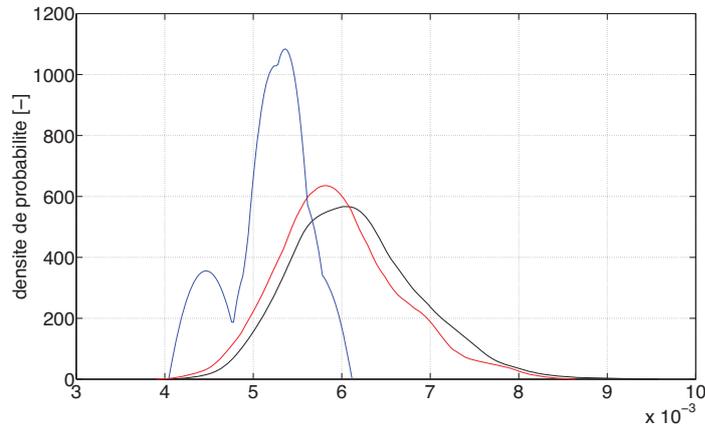


FIGURE 4.27 – Allure des densités de probabilité de la quantité q_{2D}^θ obtenues à partir du modèle 1 (en bleu), du modèle 4 (en rouge) et du mono-modèle de référence (en noir) pour l'évaluation de q_{2D} .

4.7 Bilan sur l'erreur *a posteriori* pour le couplage déterministe-stochastique proposé

Ce chapitre nous a permis de poser les bases de l'estimation d'erreur *a posteriori* pour l'évaluation de quantité d'intérêt locale dans le cas du couplage déterministe stochastique proposé.

L'introduction d'un problème adjoint, dont la définition dépend de la quantité d'intérêt, permet d'estimer l'erreur commise de manière efficace. Lorsque le problème adjoint est résolu finement, l'estimation est quasi exacte et l'on peut ainsi étudier l'influence des différents paramètres de la méthode Arlequin sur la qualité de l'approximation de la quantité d'intérêt recherchée. Dans le cas d'une quantité d'intérêt non-linéaire comme q_v , la linéarisation proposée conduit à négliger un terme. Or lorsque le modèle primal est résolu de manière très grossière, ce terme n'est pas forcément négligeable et cela explique les écarts observés entre erreur vraie et estimée. Une solution serait de suivre l'autre approche décrite dans [Ladevèze et Chamoin, 2010] pour éviter la linéarisation. Cependant, l'approche proposée n'est valable que dans le cas de quantités ponctuelles.

Afin de limiter des calculs supplémentaires lourds, le problème adjoint est aussi approché par la méthode Arlequin. La qualité de l'estimation dépend alors directement de la qualité de la solution approchée du problème adjoint. Cette dépendance a été étudiée numériquement dans le cadre de l'évaluation de la quantité q_∂ . Les résultats montrent que pour que l'estimation soit correcte, le patch doit être grand, le nombre de réalisations de Monte Carlo élevé, et la discrétisation du modèle déterministe suffisamment fine. Malgré toutes ces précautions, dès qu'un modèle Arlequin est utilisé pour le modèle adjoint, la qualité de l'estimation proposée est dégradée.

Nous avons vu de plus que le passage du modèle de référence au modèle numérique approché se fait par différentes étapes distinctes. La résolution du problème final décrit par la méthode Arlequin demande un choix judicieux de paramètres. Ces paramètres gouvernent notamment les différentes étapes du processus de résolution auxquelles nous pouvons associer des erreurs. L'introduction de modèles intermédiaires a permis d'estimer ces différentes sources d'erreurs en utilisant uniquement la solution du modèle primal et du modèle ad-

joint, toutes deux calculées par la méthode Arlequin. Les exemples d'adaptation proposés montrent comment nous pouvons diminuer la source d'erreur dominante, en raffinant le paramètre associé. Dans le cas de l'estimation de q_∂ , la comparaison avec les erreurs vraies montre la pertinence de la démarche de séparation des sources.

Dans les trois exemples proposés, l'erreur dominante estimée finale est liée à la modélisation Arlequin. Outre l'erreur induite par la méthode elle-même, ce phénomène peut être aussi lié à une mauvaise estimation de l'erreur de modèle. En effet, cela peut s'expliquer par deux observations. La première concerne l'influence de la taille du patch du modèle adjoint sur la qualité de l'estimation. Comme nous l'avons vu, même en utilisant un patch très grand, une différence significative existe entre l'erreur vraie et l'erreur estimée. La seconde est liée à la technique de séparation des sources. L'erreur de modèle est obtenue par soustraction à l'erreur totale des autres erreurs, or les autres erreurs semblent bien estimées (au moins dans le cas de q_∂). Dès lors, les écarts entre erreurs totales vraie et estimée ne se reportent que sur l'erreur de modèle.

Comme nous l'avons remarqué, l'erreur vraie de modèle induite lorsque la taille du patch couvre entièrement le domaine n'est pas négligeable. Dans le cas où l'on souhaite considérer les aléas, avec la volonté de coupler deux modélisations aussi différentes (celle d'une structure hétérogène-stochastique avec la même structure formée d'une approximation homogénéisée du même matériau), le modèle Arlequin, avec un patch couvrant l'ensemble de la structure, reste un modèle approché. Dans le cas étudié ici, nous ne pouvons espérer, avec le type de modèle Arlequin utilisé, gommer l'erreur de modèle en agissant seulement sur le paramètre L_s . Nous pouvons quasiment annuler l'erreur de modèle, dans ce cas limite, en appliquant les conditions aux limites non pas au substrat mais directement sur le patch et en prenant $\alpha_s = 1$ dans la zone libre du patch.

Les ingrédients donnés dans ce chapitre sont les premiers sur l'estimation d'erreur et la séparation des différentes sources de l'erreur pour le type de couplage proposé. De nombreuses études restent à mener. Les premières ne posent aucune difficulté majeure. Elles concernent l'étude des autres paramètres fixés comme la taille de la zone de couplage Ω_c ou la discrétisation spatiale du patch stochastique. Les secondes études restent importantes et devraient être abordées dans de futurs travaux. L'algorithme proposé pour l'adaptation par exemple peut être revu et optimisé. L'erreur de discrétisation peut être par exemple découpée par éléments afin d'identifier les zones demandant un raffinement. Cette spatialisation de l'erreur de discrétisation a déjà été abordée dans de nombreux cas (par exemple [Prudhomme *et al.*, 2009] dans un cas de couplage déterministe entre un modèle atomistique et un modèle continu). Une approche similaire peut être suivie pour la dimension stochastique en optimisant par exemple la répartition des réalisations de $K(\mathbf{x}, \theta)$.

Enfin, un point clé de la démarche proposée ici concerne la reconstruction de la solution mono-modèle à partir des champs obtenus par la méthode Arlequin. En effet, pour l'instant, dans le patch, la solution mono-modèle est basée sur u_s , or le champ u_s n'est pas libre de s'exprimer dans la zone de couplage. De plus, la reconstruction du champ u_{arl} proposée ici a été contrainte par le fait d'approcher le résidu en utilisant la technique de Monte Carlo. Nous pouvons envisager d'étudier d'autres estimations du résidu par une méthode de collocation, ou avec une décomposition sur le chaos polynomial par exemple.

Application de la stratégie de couplage en dentisterie restauratrice

Ce chapitre est consacré à la mise en application de la méthode décrite précédemment dans un cas concret de dentisterie restauratrice. Il s'agit notamment de caractériser partiellement l'adhésion entre la dentine et un biomatériau résineux remplaçant les anciens "plombages" pour le traitement des caries. La dentine déminéralisée est le substrat poreux imprégné par le biomatériau. Cette imprégnation est à la base de l'adhésion biomatériau/dentine.

La dentine déminéralisée est majoritairement composée de fibres de collagène. En raison de la distribution aléatoire microscopique des fibres, ce matériau possède un comportement hétérogène et aléatoire. La perméabilité associée n'est alors que partiellement connue. Afin d'étudier l'infiltration de la résine au sein de la dentine, la perméabilité est modélisée par un champ stochastique. Nous nous intéressons à la vitesse moyenne d'infiltration dans une zone critique.

Deux études sont présentées. La première concerne l'évolution de la vitesse moyenne d'infiltration lorsque la longueur de corrélation du milieu varie. La seconde concerne un cas critique dans lequel l'infiltration de la résine n'est pas optimale.

Sommaire

5.1	Le traitement des caries en dentisterie restauratrice	110
5.2	L'adhésion à la dentine	111
5.3	Influence de la longueur de corrélation du milieu sur la vitesse d'infiltration	112
5.3.1	Présentation des modèles utilisés	112
5.3.2	Évolution de la vitesse en fonction de la longueur de corrélation	117
5.4	Étude d'un cas critique d'infiltration.	118
5.5	Coût numérique du processus d'estimation d'erreur	122
5.6	Bilan sur la stratégie de couplage et d'adaptation	123

5.1 Le traitement des caries en dentisterie restauratrice

Le problème de carie reste encore aujourd'hui très répandu dans le monde. Les caries produisent une perte de substance dentaire conséquente. Leur prévention et leur traitement restent une priorité de la santé publique. Il est notamment nécessaire d'assurer une longévité et une biocompatibilité du traitement lors de la restauration de la dent.

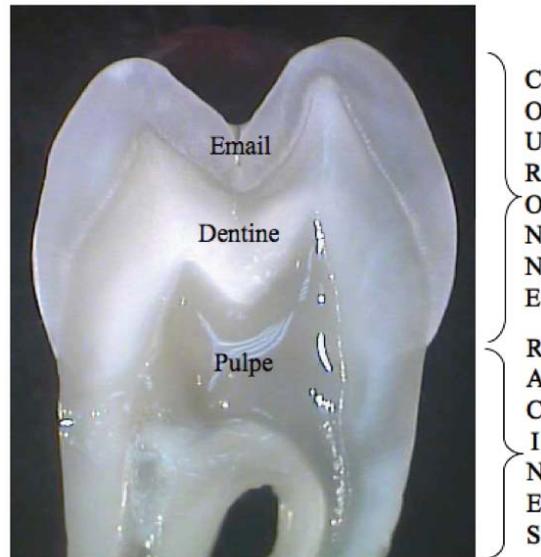


FIGURE 5.1 – Micrographie optique d'une section longitudinale médiane d'une prémolaire maxillaire.

Une dent est constituée principalement de trois composants : l'émail dentaire, la dentine et la pulpe (voir figure 5.1). L'émail (normalement visible pour une dent saine) est le constituant le plus minéralisé. Il est composé à 96% de matière minérale (réseau de cristaux d'hydroxyapatite de calcium), le reste étant composé d'eau et de matière organique. La dentine est un tissu calcifié poreux et hétérogène (tant en terme chimique que structural). Enfin, la pulpe est constituée de tissus vivants (notamment de nerfs et de vaisseaux sanguins et lymphatiques). La carie débute toujours au niveau de l'émail mais elle peut se propager à travers la dentine, et atteindre finalement la pulpe, l'organe vital de la dent. Sans traitement, la carie provoque l'inflammation et la nécrose de la pulpe, et peut affecter plus largement les tissus soutenant la dent (os, ligament). Elle doit être traitée le plus rapidement possible. Lorsqu'elle atteint la dentine, la reconstruction naturelle de l'émail est impossible et un matériau de restauration doit être utilisé. Ce matériau doit être capable de protéger le reste de la dent soumis aux contraintes de mastication, de prévenir une recrudescence du processus carieux tout en étant esthétique. Garantir l'adhésion et l'étanchéité du matériau à la dentine est donc primordial.

Jusqu'à récemment, les dentistes utilisaient un amalgame constitué d'un alliage de matériaux (argent, cuivre, étain...) associé à du mercure comme matériau de restauration de la dent. Cependant, la fixation de cet amalgame demandait un encastrement mécanique qui demande un volume important, entraînant une perte supplémentaire de substance. S'ajoutait la toxicité éventuelle du mercure dans cet amalgame. L'ensemble de ces problèmes poussa les praticiens à envisager d'autres matériaux de restauration comme des résines composites, permettant de conserver un maximum de

tissus sains. Le principe de rétention à la dent de ces résines est l'adhésion micro-mécanique [Nakabayashi et Pashley, 1998, Mjör, 2009] : la résine s'infiltré dans les pores de la dent. L'adhésion à l'émail est aujourd'hui maîtrisée, alors que l'adhésion à la dentine reste problématique.

5.2 L'adhésion à la dentine

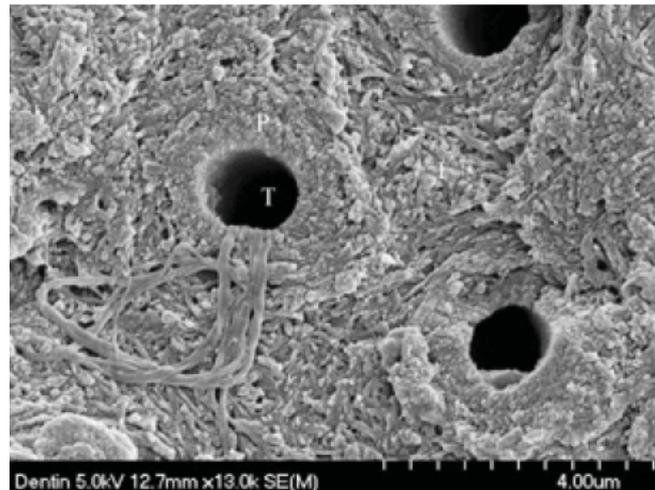


FIGURE 5.2 – Image électronique de dentine intacte. Trois tubules sont visibles. Les fibres de collagène sont noyées dans la matrice de cristaux d'hydroxyapatite.

La dentine (figure 5.2) est minéralisée à 50% en moyenne volumique. Elle est composée de 20% de fluide et de 30% de matière organique (principalement du collagène). La structure de la dentine peut être décrite dans un premier temps par une structure composée de tubules et de fibres de collagène dans une matrice de cristaux d'hydroxyapatite. Les tubules (dont trois sont visibles sur l'image 5.2) sont des micro-tubes de forme conique dont le diamètre varie d'environ $1\mu\text{m}$ à $3\mu\text{m}$. La densité de ces tubules est de $1.9e^6$ tubules par cm^2 .

Lorsque la carie atteint la dentine, le praticien procède à l'ablation de la zone cariée et à l'application de la résine. L'adhésion directe de la résine après élimination (par fraisage) est peu efficace. Le praticien procède alors, avant restauration, à la déminéralisation de la dentine : les cristaux d'hydroxyapatite constituant la partie minérale sont éliminés sur quelques micromètres de profondeur. Dès lors, l'adhésion se fait par infiltration de la résine au travers du réseau de fibres de collagène (voir figure 5.3). Les propriétés mécaniques de la dentine déminéralisée sont encore mal connues et sont l'objet de recherches expérimentales et numériques actuelles [Pashley *et al.*, 1993, Vennat *et al.*, 2009, Vennat, 2009, Mjör, 2009]. Ces travaux donnent des bornes pour la perméabilité intrinsèque de la dentine déminéralisée : $[1.43e^{-6}, 1.43e^{-4}] \mu\text{m}^2$. A cette échelle, les simulations de l'infiltration de la résine dans la dentine sont rares [Vennat, 2009]. Il s'agit ici de donner quelques éléments d'analyse numérique sur l'infiltration en étudiant deux problématiques : l'influence de la longueur de corrélation du champ stochastique représentant le milieu et l'étude d'un cas critique d'infiltration déséquilibrée.

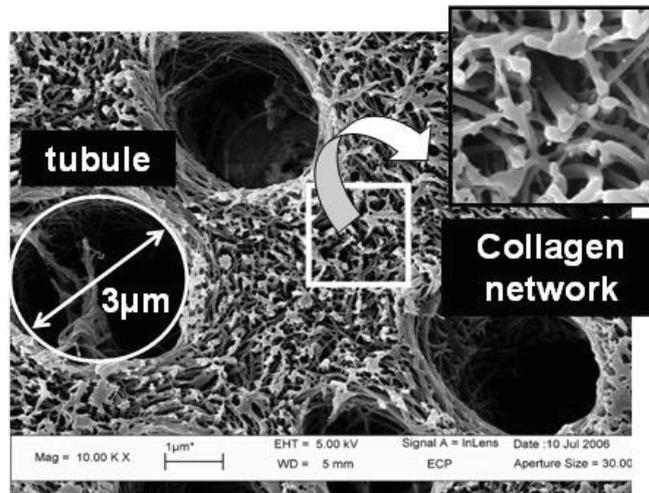


FIGURE 5.3 – Image électronique de dentine déminéralisée. En plus des tubules, le réseau de fibres de collagène, de tailles bien inférieures aux tubules, est bien visible.

5.3 Étude 1 : Influence de la longueur de corrélation du milieu sur la vitesse d'infiltration

5.3.1 Présentation des modèles utilisés

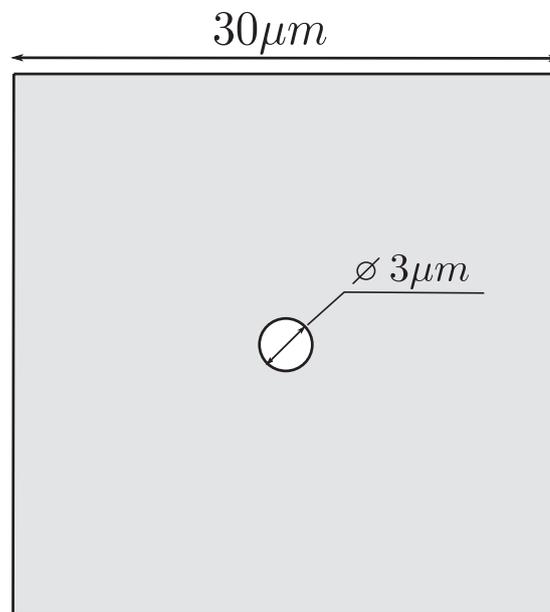


FIGURE 5.4 – Échantillon étudié.

En première approximation, l'application de la résine sur la dentine déminéralisée est modélisée par un écoulement mono-phasique permanent dans le milieu poreux qu'est la dentine.

Plus particulièrement, nous considérons un échantillon de dentine occupant un domaine carré dont le côté mesure $30\mu\text{m}$ contenant un tubule d'un diamètre de $3\mu\text{m}$ centré sur l'échantillon (voir figure 5.4). Le problème est plan (transversal à l'axe du tubule). La

résine est appliquée manuellement par le praticien directement sur la zone à traiter. Elle va d'abord occuper les tubules puis s'infiltrer dans les réseaux de fibres de collagène. Par ailleurs, nous supposons que la section étudiée est suffisamment éloignée des sections dans lesquelles la résine a déjà infiltré le réseau de fibres pour que le modèle plan ait un sens. La surpression sur les bords de l'échantillon est fixée à 0 bar (pas de surpression par rapport à l'atmosphère). Elle est fixée à 1 bar ($10^5 Pa$, correspondant à la pression induite par l'action manuelle du praticien) sur le bord du tubule (voir figure 5.5).

L'infiltration de la résine au sein de la dentine est caractérisée par la vitesse de l'écoulement. Nous nous intéressons à l'estimation de la composante suivant l'axe y de la vitesse u dans la zone Z_{int} occupant l'ensemble des points $M \in \{(x, y) \in [-1/3, 1/3]\mu m \times [1, 1 + 1/3]\mu m\}$.

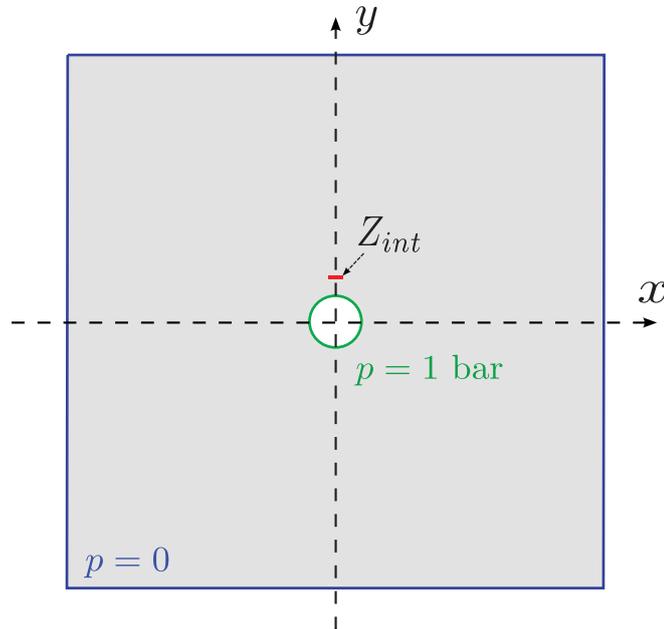


FIGURE 5.5 – Problème étudié : l'échantillon est soumis à une pression imposée nulle sur le bord bleu, et de 1 bar sur le bord rouge. La zone d'intérêt Z_{int} est représentée en rouge.

La vitesse de l'écoulement u dépend du gradient de pression suivant la loi de Darcy :

$$\mathbf{u} = -\frac{K}{\nu} \nabla p$$

où K désigne la perméabilité intrinsèque du milieu (en μm^2) et ν la viscosité dynamique de la résine (en $Pa.s$).

Comme nous l'avons vu, la dentine est fortement hétérogène. La viscosité de la résine est connue et dépend du type de résine (cf. tableau 5.1). Nous modélisons ici l'écoulement de la résine *OptiBond*. Ne connaissant pas la distribution précise des fibres de collagène, le ratio K/ν est modélisé par un champ stochastique $C(\mathbf{x}, \theta) \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{C}^0(\Omega))$ vérifiant les conditions des chapitres précédents. La vitesse de l'écoulement $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta)$ s'écrit alors en fonction du gradient de pression :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta) = -C(\mathbf{x}, \theta) \nabla p(\mathbf{x}, \theta), \text{ p.p. et p.s.}$$

De plus, l'écoulement étant permanent et incompressible, nous avons :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta) = 0, \text{ p.p. et p.s.}$$

Résine	$\nu[Pa.s]$
<i>OptiBond</i>	1.43
<i>3MESPE</i>	0.475
<i>Battle</i>	0.0357
<i>Gbond</i>	0.0168
<i>Unifil</i>	0.00331
<i>HhybridBond</i>	0.00232

TABLE 5.1 – Différentes résines employées et viscosités dynamiques associées.

Finalement, le champ de pression $p(\mathbf{x}, \theta)$ est solution de :

$$\nabla \cdot (C(\mathbf{x}, \theta) \nabla p(\mathbf{x}, \theta)) = 0, \text{ p.p. et p.s.}$$

Nous souhaitons alors évaluer l'espérance de la vitesse suivant l'axe y (de vecteur unitaire associé \mathbf{i}_y) moyennée dans la zone Z_{int} donnée par :

$$q_u = E \left[\frac{1}{|Z_{int}|} \int_{Z_{int}} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \theta) \cdot \mathbf{i}_y d\Omega \right]$$

ou, réécrite en fonction de la pression $p(\mathbf{x}, \theta)$:

$$q_u = E \left[\frac{-1}{|Z_{int}|} \int_{Z_{int}} C(\mathbf{x}, \theta) \nabla p(\mathbf{x}, \theta) \cdot \mathbf{i}_y d\Omega \right]$$

Nous notons $q_{ref} = q_u(p_{ref})$, la quantité d'intérêt obtenue à partir de la solution de référence p_{ref} , et $q_{est} = q_u(p_{arl})$, la quantité d'intérêt estimée à partir de la solution Arlequin p_{arl} .

Le champ stochastique $C(\mathbf{x}, \theta)$ est de loi marginale uniforme de bornes (en $\mu m^2(Pa.s)^{-1}$) $[1.43e^{-6}, 1.43e^{-4}]$ (de moyenne géométrique $1/E[1/C(\mathbf{x}, \theta)] = 3.19e^{-5} \mu m^2(Pa.s)^{-1}$), avec un modèle de corrélation de type *sinc*². La longueur de corrélation n'est pas connue et varie autour de $L_{cor} = 1 \mu m$.

Nous proposons dans la suite d'utiliser la méthode Arlequin pour étudier l'évolution de la quantité q_u en fonction de la longueur de corrélation du cas stochastique $C(\mathbf{x}, \theta)$ qui varie dans l'intervalle $[0.5 \mu m, 2 \mu m]$ (voir figure 5.6). Le substrat est un rectangle de dimension $30 \mu m \times 30 \mu m$ dans lequel un modèle déterministe homogène est utilisé (dont le paramètre matériau associé est $C_d = 3.19e^{-5} \mu m^2(Pa.s)^{-1}$). Un modèle stochastique est utilisé pour le patch, de dimension $L_s \times L_s$ (voir figure 5.7), centré sur l'échantillon et dans lequel le tubule est représenté. Un exemple de pression obtenue à partir d'une réalisation est donné dans la figure 5.8. Dans cet exemple, nous avons utilisé 961 nœuds dans le substrat et 2792 nœuds dans le patch carré de côté $L_s = 16 \mu m$.

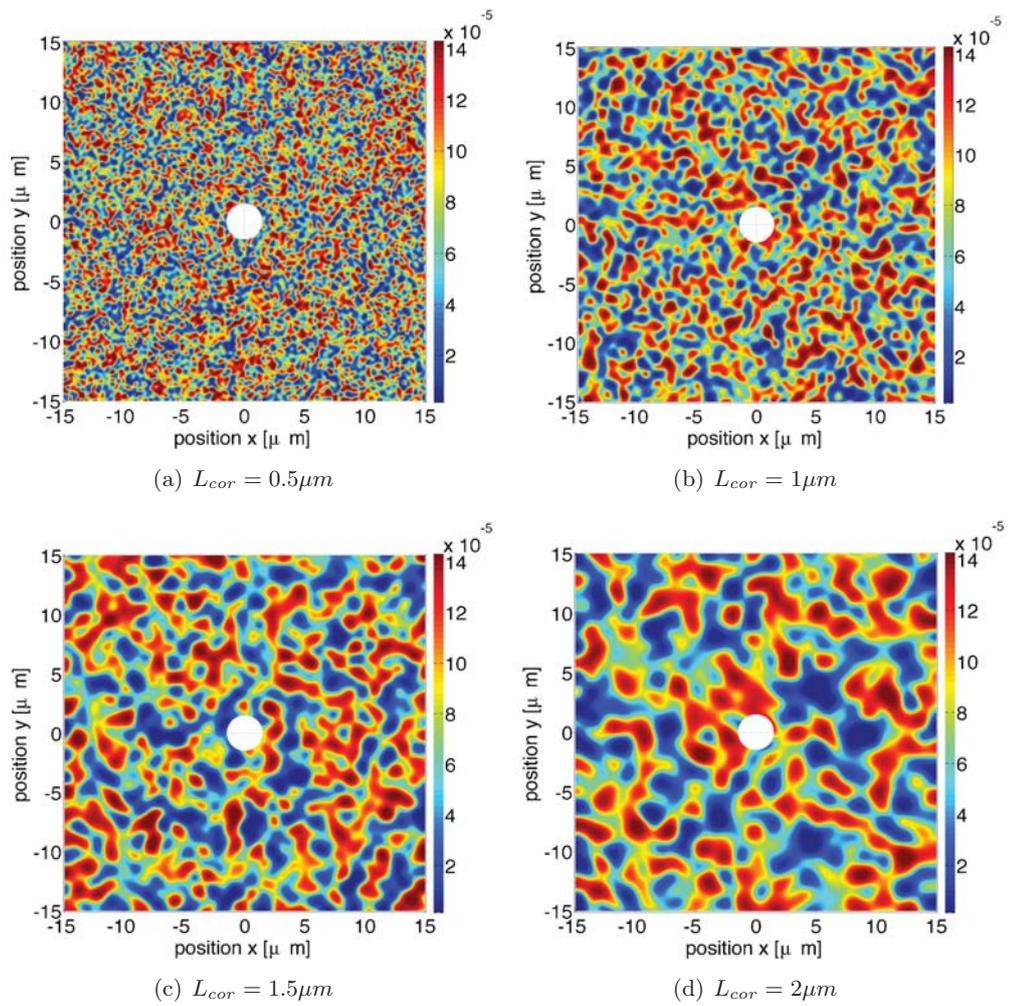


FIGURE 5.6 – Exemples de réalisation de $C(\mathbf{x}, \theta)$ pour différentes longueurs de corrélation ($0.5, 1, 1.5$ et $2\mu m$).

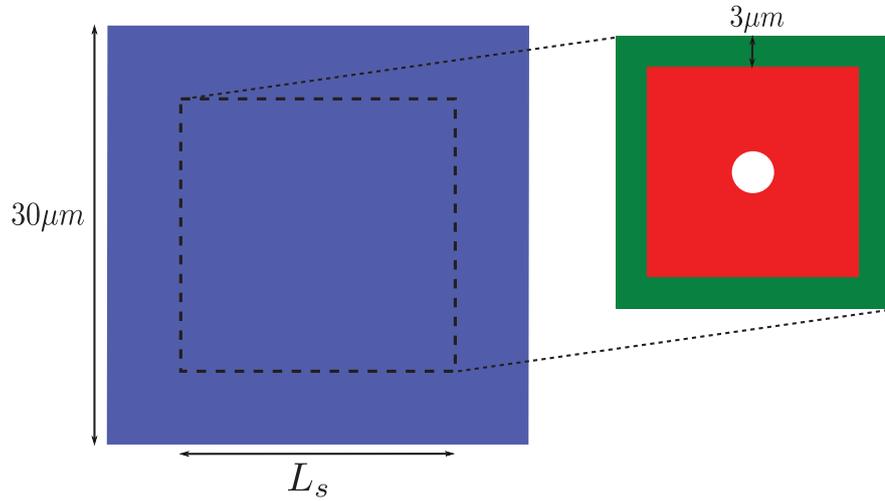


FIGURE 5.7 – Problème Arlequin approché : un patch, dans lequel le problème est finement modélisé (tubule, propriétés stochastiques), est superposé au substrat décrit par un modèle équivalent homogénéisé déterministe.

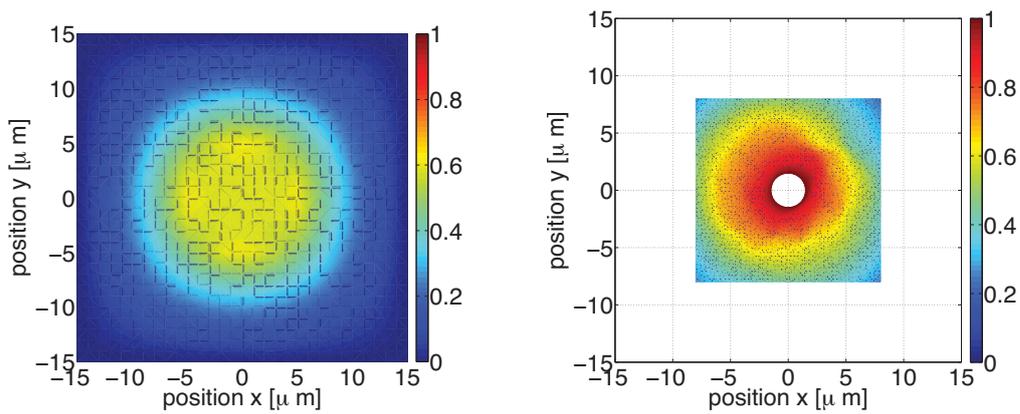


FIGURE 5.8 – Exemple de pression (en [bar]) obtenue dans le substrat (à gauche) et le patch Arlequin (à droite) pour une réalisation du champ matériau.

5.3.2 Évolution de la vitesse en fonction de la longueur de corrélation

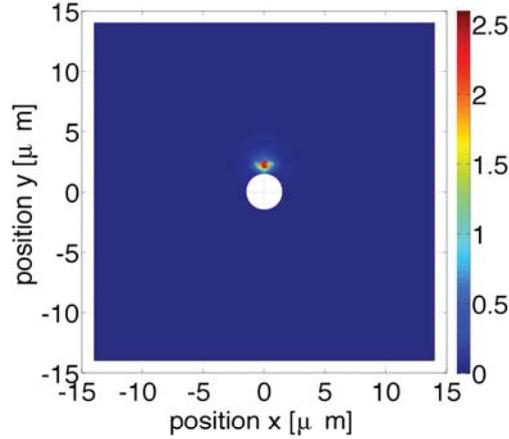


FIGURE 5.9 – Espérance de la pression (en $[Pa]$) dans le patch du problème adjoint relatif à q_u (avec une longueur de corrélation $L_{cor} = 1\mu m$), approché par la méthode Arlequin avec un patch de taille $L_s = 28\mu m$ et 5 000 réalisations : pression dans le substrat à gauche, espérance de la pression dans le patch à droite.

En suivant la démarche décrite dans les chapitres précédents, nous définissons le problème adjoint relatif à la quantité q_u . Il est approché par la méthode Arlequin avec un patch de taille $L_s = 28\mu m$ et avec 5 000 réalisations de Monte Carlo. Nous utilisons 961 nœuds dans le substrat et 14892 nœuds dans le patch. L'espérance de la pression dans le patch est donnée sur la figure 5.9. Comme précédemment, en introduisant des problèmes intermédiaires, nous sommes en mesure de construire et estimer les différentes sources de l'erreur et ainsi adapter les paramètres correspondants pour diminuer l'erreur totale. Un exemple de la vitesse suivant l'axe y , obtenue par la méthode Arlequin, est donnée dans la figure 5.10.

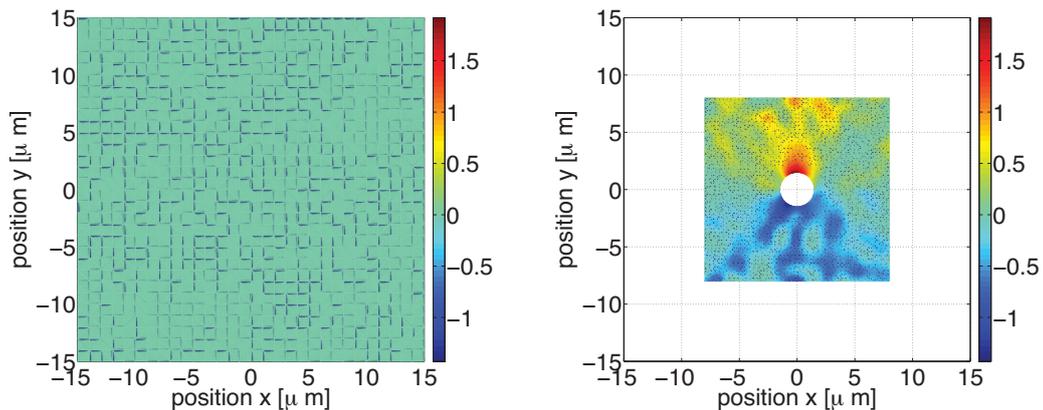


FIGURE 5.10 – Exemple de réalisation de la vitesse d'infiltration suivant l'axe y (en $[\mu m.s^{-1}]$) obtenue par la méthode Arlequin.

L'évolution de la quantité q_u (estimée, corrigée et de référence) en fonction de la longueur de corrélation du milieu est donnée dans la figure 5.11. Comme nous pouvons le constater, la vitesse diminue légèrement (de 10%) alors que la longueur de corrélation aug-

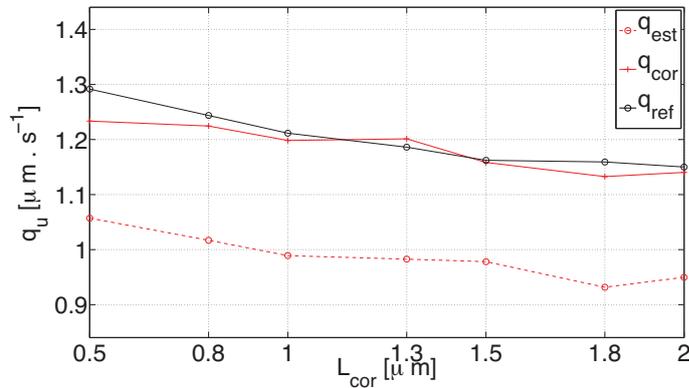


FIGURE 5.11 – Évolution de la quantité q_u estimée (en tirets rouges, q_{est}), corrigée (en rouge, q_{cor}), de référence (en noir, q_{ref}) en fonction de la longueur de corrélation L_{cor} .

mente (quadruple). Les erreurs relatives estimées et vraies sont encore élevées (près de 20%) pour étudier plus spécifiquement cette évolution. Cependant, nous donnons aussi la quantité d'intérêt estimée $q_{cor} = q_{est} + \eta_e$ à partir de q_{est} et de l'estimation de l'erreur $q_{ref} - q_{est} \approx \eta_e$. Cette quantité q_{est} est proche de la quantité d'intérêt de référence q_{ref} . Autrement dit, l'erreur estimée η_e est proche de l'erreur vraie $q_{ref} - q_{est}$.

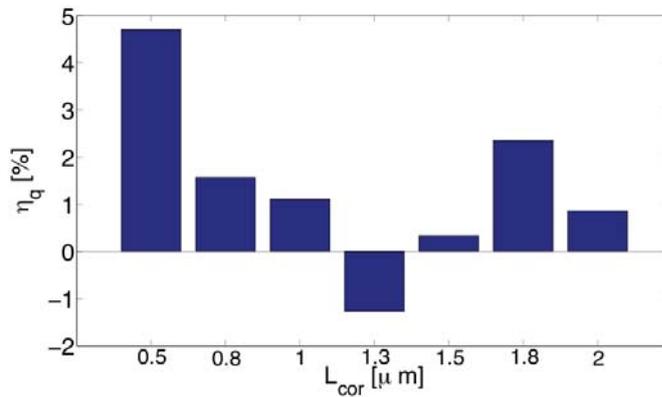


FIGURE 5.12 – Erreurs relatives η_q (en %).

La figure 5.12 montre l'erreur relative

$$\eta_q = \frac{q_{ref} - q_{cor}}{q_{cor}}$$

en fonction de la longueur de corrélation L_{cor} . L'erreur relative obtenue est faible (moins de 5%) : la quantité d'intérêt de référence q_{ref} est correctement estimée par q_{cor} .

5.4 Étude 2 : cas critique d'infiltration déséquilibrée

Dans cette section, nous étudions le cas où l'infiltration ne se fait pas de manière uniforme dans les tubules (voir figure 5.13). Plus particulièrement, nous étudions ce phénomène en modélisant l'infiltration d'un échantillon dans lequel deux tubules sont présents.

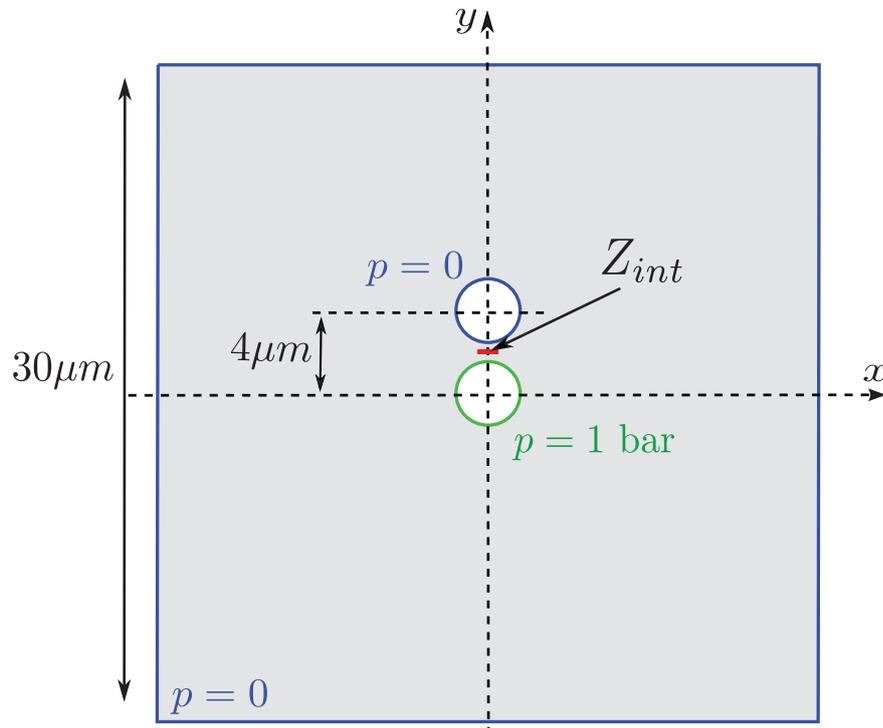


FIGURE 5.13 – Échantillon étudié pour l'infiltration déséquilibrée.

Seul un des tubules est infiltré par la résine. Cette configuration défavorable implique une concentration de l'infiltration entre les deux tubules. Comme précédemment, nous nous intéressons à l'espérance de la vitesse moyenne suivant l'axe y dans la zone d'intérêt Z_{int} (voir figure 5.13). La description stochastique du milieu n'est nécessaire que localement. La méthode Arlequin est utilisée pour modéliser ce phénomène (voir figure 5.14). Le modèle adjoint associé est aussi approché par la méthode Arlequin. L'espérance de la pression dans le patch pour le problème adjoint est donnée sur la figure 5.9.

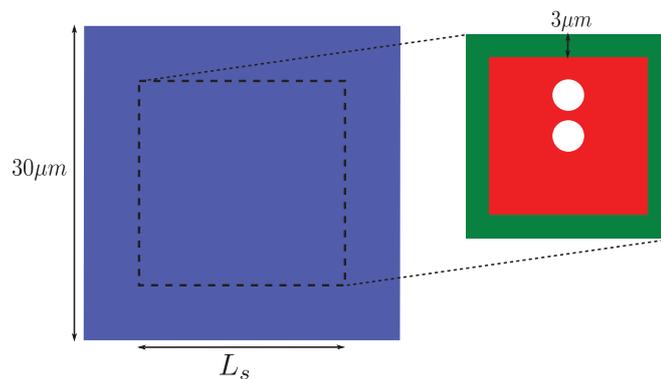


FIGURE 5.14 – Problème Arlequin approché : un patch, dans lequel le problème est finement modélisé (tubule, propriétés stochastiques), est superposé au substrat décrit par un modèle équivalent homogénéisé déterministe.

Les paramètres variant durant l'adaptation sont :

- L_s : la largeur du patch,

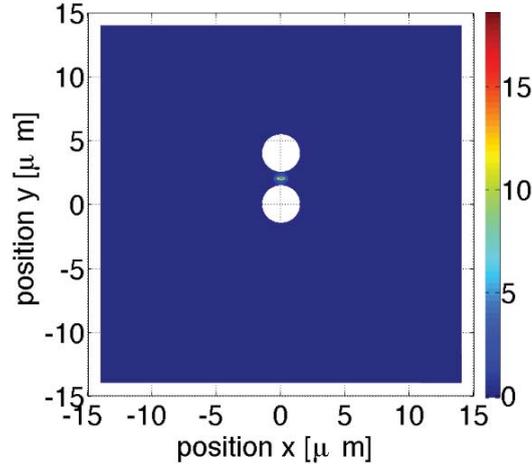


FIGURE 5.15 – Espérance de la pression (en $[Pa]$) dans le patch du problème adjoint relatif à q_u (avec une longueur de corrélation $L_{cor} = 0.5\mu m$) pour l'étude du cas critique, approché par la méthode Arlequin avec un patch de taille $L_s = 28\mu m$ et 5 000 réalisations.

- MC : le nombre de tirages de Monte Carlo utilisés,
- Δh_d : le pas de discrétisation régulière triangulaire du substrat.

Comme précédemment, la taille du maillage triangulaire du patch est fixée. Nous notons R_s le rayon maximal du cercle inscrit dans un élément.

L_{cor}	type	$L_s[\mu m]$	MC	$\Delta h_d[\mu m]$	$R_s[\mu m]$
0.5	Arlequin	18	2 000	3	0.02
1	Arlequin	18	100	3	0.02
1.5	Arlequin	18	500	3	0.02
2	Arlequin	18	500	3	0.02

TABLE 5.2 – Paramètres des modèles utilisés pour l'étude critique pour quatre longueurs de corrélation différentes. Les paramètres ont été optimisés avec un critère d'arrêt de 1% sur l'erreur totale estimée.

L_{cor}	η_e	η_m	η_θ	η_h
0.5	0.22	0.20	0.03	$-9.5e - 3$
1	-0.12	0.059	-0.18	$1.2e - 4$
1.5	0.17	0.024	0.15	$5.2e - 4$
2	0.35	0.012	0.34	$5.7e - 3$

TABLE 5.3 – Erreurs relatives (en %) obtenues pour les cas $L_{cor} = 0.5, 1, 1.5, 2\mu m$.

L'adaptation est associée à la composante y de la vitesse d'infiltration. La figure 5.16 montre cette composante sur l'ensemble du domaine (espérance dans le patch), obtenue à partir d'un couplage Arlequin et après adaptation des paramètres. Dans ce cas critique, la vitesse est localisée entre les deux tubules. Un patch de taille relativement faible peut être suffisant. La source dominante de l'erreur est la discrétisation stochastique (voir tableau 5.3).

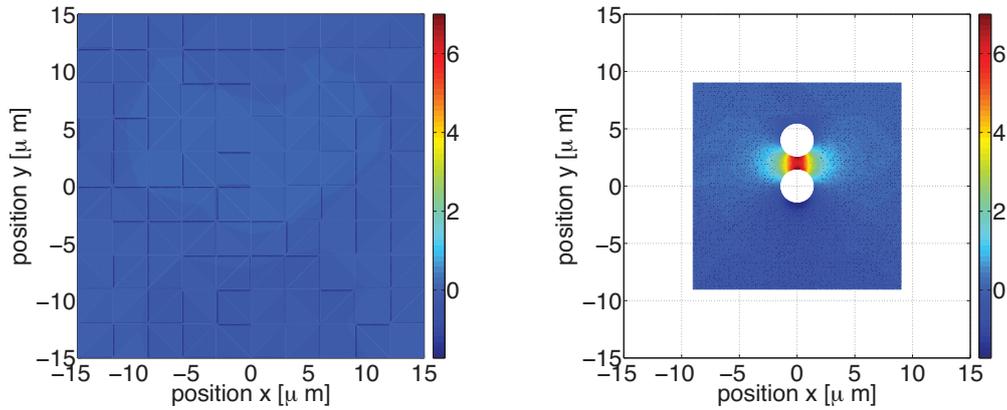


FIGURE 5.16 – Vitesse d'infiltration (en $[\mu m.s^{-1}]$) suivant l'axe y pour l'étude du cas critique, obtenue par la méthode Arlequin avec un patch de taille $L_s = 18\mu m$ et 2 000 réalisations : vitesse dans le substrat à gauche, espérance de la vitesse dans le patch à droite.

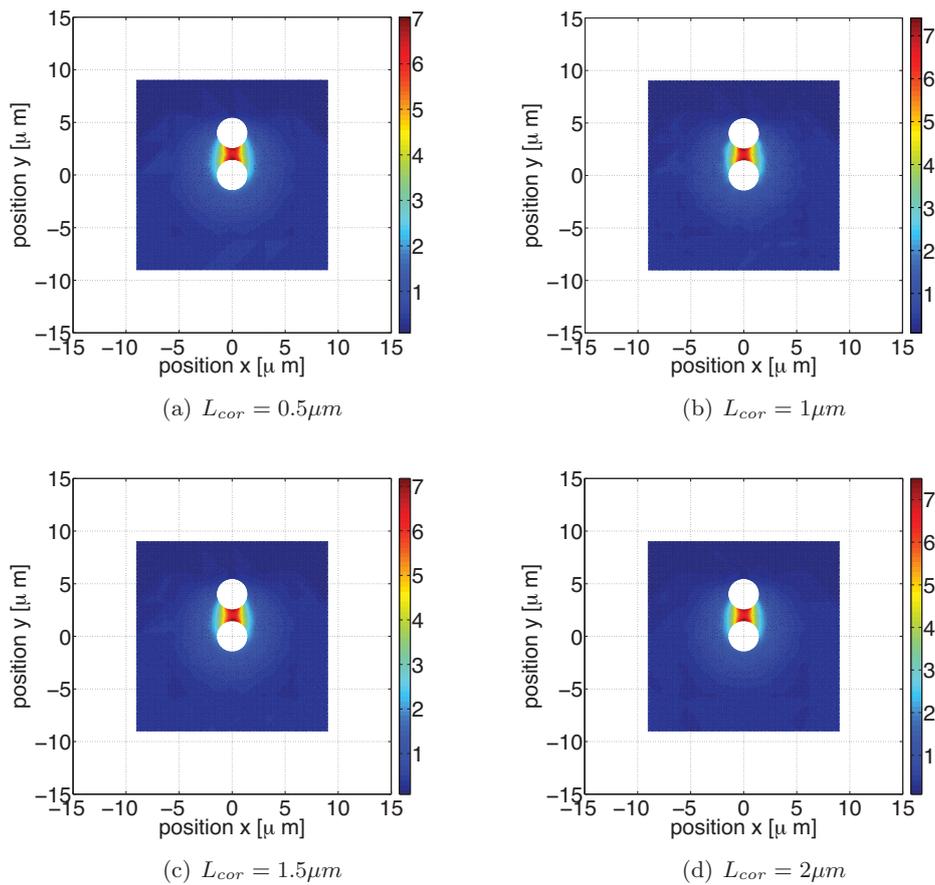


FIGURE 5.17 – Norme de la vitesse d'infiltration (en $[\mu m.s^{-1}]$) pour le cas critique pour différentes longueurs de corrélation ($0.5, 1, 1.5$ et $2\mu m$). Les paramètres associés sont donnés dans le tableau 5.2.

Enfin, la norme de la vitesse d'infiltration, obtenue par un couplage Arlequin, est donnée dans la figure 5.17. Le déséquilibre de l'infiltration dans les tubules provoque une situation critique de non infiltration dans la dentine. L'écoulement de la résine est majoritairement canalisé entre les tubules. Pour préciser ce cas, la méthode Arlequin proposée dans ce manuscrit peut être utilisée pour étudier plusieurs configurations différentes dans lesquelles la distance entre les tubules, le chargement sur les tubules, le nombre de tubules peuvent varier.

5.5 Coût numérique du processus d'estimation d'erreur

Dans cette section, il s'agit plus particulièrement de comparer les temps nécessaires aux principales étapes de l'adaptation : résolution du modèle primal, estimation de l'erreur totale, séparation des sources de l'erreur. Ces temps de calculs sont comparés dans le cas de l'étude critique de la section précédente pour une longueur de corrélation $L_{cor} = 0.5\mu m$. Les paramètres des modèles associés sont donnés dans le tableau 5.4.

modèle	type	$L_s[\mu m]$	MC	N_d	N_s	N
référence	mono	-	5 000	-	-	32 744
grossier	Arlequin	18	100	121	3 811	-
final	Arlequin	18	2 000	121	3 811	-

TABLE 5.4 – Paramètres des modèles utilisés pour l'étude du cas critique.

	modèle grossier	modèle final	modèle de référence
résolution	$\approx 1\,100s (\approx 18min)$	$\approx 23\,000s (\approx 6h20)$	$99\,000s (\approx 27h30)$
erreur totale	$7s$	$7s$	-
sources de l'erreur	$\approx 12\,000s (\approx 3h20)$	$\approx 12\,000s (\approx 3h20)$	-

TABLE 5.5 – Temps de calcul (en [s]) liés aux différentes étapes du processus d'adaptation comparés à la résolution direct du mono-modèle.

Le tableau 5.5 regroupe différents temps de calcul dans le cas de l'adaptation du modèle. Le modèle primal le plus fin utilisé (conduisant à une erreur totale estimée de 0.22%) est résolu en moins de $7h$, alors que la résolu du mono-modèle de référence se fait en plus de $27h$.

L'étape d'estimation de l'erreur globale ne correspond qu'au calcul du résidu. Si les solutions p_{arl} pour le modèle primal et adjoint sont construites, et si les matrices de rigidité sont déjà construites, ce calcul est très rapide (7 secondes pour 5 000 tirages et 32 744 nœuds).

Le temps nécessaire à la séparation des sources de l'erreur correspond principalement à la construction des projections des solutions des modèles primal et adjoint dans les espaces appropriées (voir chapitre 4). Cette construction représente 80% du temps total (soit environ $2h40$). Le reste du temps (40 min) est lié à la construction des modèles intermédiaires et aux calculs des résidus. Bien que la construction des projections ne soit pas optimisée, nous pouvons observer que les estimations de l'erreur total ne demande pas un temps supplémentaire important.

5.6 Bilan sur la stratégie de couplage et d'adaptation

L'utilisation de la méthode Arlequin dans l'étude de l'infiltration d'une résine au sein de la dentine déminéralisée permet d'estimer la quantité d'intérêt recherchée. L'estimation de l'erreur $q_{ref} - q_{est}$ permet de reconstruire une quantité d'intérêt q_{cor} estimée plus précise. L'erreur relative finale obtenue est inférieure à 5%.

Sur l'étude du cas critique d'infiltration déséquilibrée, le modèle Arlequin utilisé permet d'étudier efficacement ce phénomène avec un nombre restreint de degrés de liberté. Les erreurs estimées obtenues sont faibles (moins de 1% d'erreurs totales relatives et le gain en temps de calcul par rapport à l'utilisation d'un mono-modèle est d'environ d'un facteur 4.

Les outils proposés permettent d'obtenir rapidement une estimation de l'erreur totale. Hormis les processus de construction des projections qui n'ont pas été optimisés, la stratégie de séparation des sources de l'erreur permet assez rapidement (moins de 15% du temps de résolution mono-modèle) d'obtenir une estimation des sources de l'erreur et ainsi piloter le processus d'adaptation.

Dans les études proposées ici, le problème adjoint et les constructions des différents champs nécessaires aux calculs des résidus ne sont pas optimisés. Cela réduirait davantage le temps nécessaire à l'estimation des différentes sources de l'erreur.

Conclusions et Perspectives

6.1 Résumé et apports des travaux

Les apports majeurs de ce doctorat résident d'une part dans la mise en place pratique du couplage déterministe-stochastique par la méthode Arlequin, d'autre part dans le contrôle de ce couplage pour l'évaluation d'une quantité d'intérêt spécifique.

Le chapitre 2 de ce manuscrit permet de définir plus précisément le problème type adressé par les travaux de doctorat et de positionner la méthode Arlequin et la problématique d'estimation d'erreur. Cette mise en perspective permet de souligner les aspects originaux spécifiques à cette méthode :

- la superposition de modèles, qui en fait une méthode multi-échelles, mais surtout multi-physiques,
- une distribution de l'énergie mécanique entre les modèles, rendant possible une co-existence locale des modèles superposés sans risques de redondance,
- un couplage faible volumique permettant la communication de modèles complètement différents.

Ce type de modèle étant indissociable du processus d'approximation, la seconde partie du chapitre propose une revue des différents outils d'estimation d'erreur, relatifs à la qualité globale de la solution approchée et relatifs à la qualité de l'estimation d'une quantité d'intérêt spécifique.

Dans le chapitre 3, nous détaillons le modèle Arlequin utilisé pour approcher le modèle stochastique de référence. Dans une zone dite d'intérêt, le modèle stochastique original est conservé alors que dans le reste de la structure, un modèle homogène déterministe est utilisé. La méthode Arlequin permet de coupler ces modèles efficacement, et ce, même au niveau stochastique. Les principaux ingrédients liés à cette extension de la méthode au cas du couplage stochastique sont donnés : espace de couplage, opérateur de couplage, stabilité du problème, technique de discrétisation suivant la dimension stochastique. En fin de chapitre, des exemples simples permettent d'étudier quelques choix dans les ingrédients cités précédemment ainsi que dans les paramètres de résolution (maillage, taille de patch, nombre de tirages de Monte Carlo). Ces premiers travaux sur le couplage stochastique par la méthode Arlequin, prolongeant ceux de Cottreau *et al.* [Cottreau *et al.*, 2010, Cottreau *et al.*, 2011], constituent une base pour des travaux futurs. En effet, certains choix appellent des développements et des études supplémentaires afin d'étayer la théorie associée. Les travaux de ce doctorat se sont davantage orientés vers la mise en place du contrôle de la qualité de la solution obtenue par la méthode Arlequin.

Le chapitre 4 propose la mise en place d'estimation de l'erreur faite lorsque la méthode Arlequin est utilisée pour l'évaluation de quantité d'intérêt spécifique, au lieu de résoudre un problème de référence trop coûteux. En suivant les techniques d'estimation du type *Goal-Oriented*, nous montrons qu'il est possible d'estimer l'erreur en introduisant un problème adjoint approché. Des premières études numériques permettent de montrer l'évolution de

l'erreur lorsque plusieurs paramètres varient indépendamment les uns des autres, et de s'assurer de la convergence de la méthode proposée. L'apport principal de ces travaux dans le cadre de l'estimation d'erreur est la mise en place d'une stratégie de séparation des sources de l'erreur. En effet, nous distinguons l'erreur de modèle (liée au couplage Arlequin), l'erreur de discrétisation (liée à la discrétisation spatiale) et l'erreur stochastique (liée à la discrétisation le long de la dimension stochastique). L'introduction de modèles intermédiaires permet, uniquement grâce à la résolution des problèmes primal et adjoint, d'estimer ces trois erreurs. L'adaptation d'un modèle Arlequin pour l'évaluation d'une quantité spécifique peut ainsi se faire de manière efficace et performante. Nous montrons sur des exemples la pertinence et la justesse de la technique proposée.

En guise d'illustration, le chapitre 5 propose l'utilisation de la méthode Arlequin pour l'étude de l'infiltration de résine dans la dentine dans le domaine de la dentisterie réparatrice. Le problème est décrit par un écoulement permanent de Darcy mono-phasique dans un milieu poreux qu'est la dentine. Les caractéristiques de la dentine constituent encore un sujet de recherche théorique et expérimental. Dans ce contexte, le comportement du milieu est modélisé par un champ stochastique dont la longueur de corrélation associée est mal connue. Dans un premier cas, nous étudions un échantillon incluant un tubule à travers laquelle la résine arrive à une pression supposée constante et arbitrairement fixée à 1 bar. Nous cherchons à déterminer l'espérance de la vitesse du fluide suivant un axe, moyennée sur un domaine d'intérêt, non loin du tubule. Dans un second temps, nous étudions un cas d'infiltration problématique dans lequel deux tubules sont présents, mais seul l'un d'entre eux est sous pression. Ce déséquilibre conduit à une localisation de l'écoulement entre les tubules. En appliquant la démarche proposée dans les chapitres précédents, nous construisons un modèle approché en utilisant la méthode Arlequin, et une stratégie d'adaptation permet d'assurer une précision donnée sur l'évaluation de la quantité d'intérêt.

En conclusion générale, les apports de ces travaux portent sur trois points principaux. D'une part, une contribution théorique et surtout pratique à l'extension du cadre Arlequin au cas d'un couplage entre un modèle déterministe et un modèle stochastique a été apportée. Ces travaux ont permis, en effet, d'affiner les premiers outils et de proposer des choix pour l'utilisation de la méthode dans ce cadre spécifique. D'autre part, la seconde partie des travaux a consisté en la mise en place d'outils de contrôle d'erreur lorsque la méthode Arlequin est utilisée pour évaluer une quantité d'intérêt spécifique. La nouveauté réside dans l'utilisation du cadre *Goal-Oriented* pour le couplage stochastique, et surtout dans la mise en place d'une technique particulière permettant d'identifier et de quantifier les différentes sources de l'erreur : de modèle, de discrétisation et stochastique. Enfin, l'ensemble des outils développés pendant ce doctorat a été utilisé pour l'étude d'un cas concret en dentisterie restauratrice.

6.2 Perspectives

Les travaux de ce doctorat donnent des éléments d'analyse et d'application de la méthode Arlequin dans le cas d'un couplage déterministe-stochastique. Les perspectives et les extensions sont nombreuses.

Sur le couplage stochastique par la méthode Arlequin

Tous les ingrédients spécifiques au couplage stochastique par la méthode n'ont pas été intensivement étudiés et discutés dans ces travaux de doctorat.

C'est le cas par exemple de l'espace de couplage \mathcal{W}_c . Le choix proposé ici n'est pas unique. Il serait intéressant de qualifier le meilleur choix possible, en terme de précision en quantités d'intérêts diverses, mais également en coûts de calcul.

Concernant la distribution de l'énergie, l'influence du choix du type des fonctions de pondérations (constante, linéaire, cubique...) reste à étudier. Nous pouvons aussi imaginer revoir la distribution de l'énergie entre les modèles comme il est fait pour le couplage d'un modèle continu avec un modèle atomistique, dans lequel la partition de l'unité n'est pas respectée point par point mais sur des volumes locaux.

Des techniques de résolution, autre que la technique de Monte Carlo ou que les Éléments Finis Stochastiques, n'ont pas été discutées. Même si cela ne pose a priori aucune difficulté supplémentaire dans la méthode, il est possible qu'il soit néanmoins nécessaire d'opérer des adaptations spécifiques, comme cela a été le cas pour la technique de Monte Carlo (condensation des termes déterministes).

Le couplage présenté dans nos travaux peut être utilisé pour étendre le couplage déterministe continuum-particulaire [Bauman *et al.*, 2008, Prudhomme *et al.*, 2008, Ben Dhia *et al.*, 2011] au couplage d'un modèle continuum déterministe avec un modèle particulaire stochastique.

Enfin, un cas d'extension inédite est le couplage de deux modèles stochastiques.

Sur les techniques d'estimation d'erreur

Dans la méthode d'estimation proposée dans le chapitre 4, et plus particulièrement dans les exemples numériques, l'influence de tous les paramètres n'a pas été étudiée. En suivant une démarche identique à celle proposée, il est possible d'étudier l'influence de h_s la discrétisation spatiale du patch, ou de L_c la taille de la zone de couplage. Le premier paramètre a été choisi directement avec une finesse suffisante afin d'éviter une mauvaise représentation du champ stochastique dans le patch. Ne pas prendre cette précaution conduit à l'introduction d'erreur parasite sur la dimension stochastique. Le second paramètre est plus intéressant. Dans la mesure où le modèle stochastique, associé à une petite longueur de corrélation, est couplé avec un modèle déterministe (de longueur de corrélation infinie), il serait intéressant d'étudier l'influence de la zone de couplage, notamment en fonction de la longueur de corrélation.

La stratégie d'adaptation proposée dans ce même chapitre permet d'identifier la source majeure de l'erreur. Cependant, rien ne nous permet de localiser les zones nécessitant un raffinement. Cela est possible en mettant en place des cartes d'erreur sur la structure. La distribution de l'erreur totale peut être ainsi connue et les zones nécessitant un raffinement identifiées. Nous pouvons même envisager facilement ce processus pour l'erreur de discrétisation spatiale seule, ou l'erreur stochastique.

Concernant la technique d'estimation, la méthode proposée repose sur l'utilisation de résidu sur l'ensemble de la structure et sur la résolution d'un problème adjoint. Nous avons vu que le problème adjoint, initialement défini sur le modèle de référence devait être approché. La qualité de cette approximation influe sur la qualité de l'estimation de l'erreur. Dans ces travaux, nous avons étudié numériquement cette influence dans un cas simple, sans dégager d'outils généraux permettant un choix optimal des paramètres du modèle

adjoint. Il s'agirait de quantifier plus précisément cette influence. Pour palier le problème d'approximation du problème adjoint, une autre possibilité, mentionnée dans l'état de l'art sur le sujet, est de mettre en place des bornes de l'erreur.

Dans le processus d'estimation de l'erreur, nous utilisons une reconstruction particulière de la solution mono-modèle. Le choix fait dans ces travaux n'est pas unique.

6.3 Communications sur les travaux

Les travaux de ce doctorat ont fait l'objet de deux articles à comité de lecture [Cottureau *et al.*, 2011, Zaccardi *et al.*, 2012], de quatre présentations dans des conférences internationales (ECCM 2010, ADMOS 2011, USNCCM 2011, ECCOMAS 2012), et de quatre conférences nationales (CRIEC 2010-2011, MASCOT-NUM 2011, CSMA 2011).

Le code Arlequin utilisé et dénommé CARl est disponible en libre téléchargement à l'adresse : <https://github.com/cottureau/CARl>.

Bibliographie

- [Ainsworth, 1998] Ainsworth, M. (1998). A posteriori error estimation for fully discrete hierarchic models of elliptic boundary value problems on thin domains. *Numerische Mathematik*, 80 :325–362. 36
- [Aragón *et al.*, 2010] Aragón, A. M., Duarte, C. A., and Geubelle, P. H. (2010). Generalized finite element enrichment functions for discontinuous gradient fields. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 82(2) :242–268. 16
- [Azziz et Babuška, 1972] Azziz, K. and Babuška, I. (1972). The mathematical foundations of the finite element method with applications to partial differential equations. *Academic Press, New-York*, 33 :1975–1996. 29
- [Babuška *et al.*, 1994] Babuška, I., Caloz, G., and Osborn, J. E. (1994). Special finite element methods for a class of second order elliptic problems with rough coefficients. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(4) :945–981. 15
- [Babuška et Melenk, 1997] Babuška, I. and Melenk, J. M. (1997). The partition of unity method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40(4) :727–758. 15
- [Babuška et Miller, 1984] Babuška, I. and Miller, A. (1984). The post-processing approach in the finite element method - Part 2 : The calculation of stress intensity factors. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20(6) :1111–1129. 33
- [Babuška et Miller, 1987] Babuška, I. and Miller, A. (1987). A feedback finite element method with a posteriori error estimation - Part 1 : The finite element method and some basic properties of the a posteriori error estimator. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 61(1) :1–40. 30
- [Babuška et Rheinboldt, 1978a] Babuška, I. and Rheinboldt, W. C. (1978a). A-posteriori error estimates for the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 12(10) :1597–1615. 30
- [Babuška et Rheinboldt, 1978b] Babuška, I. and Rheinboldt, W. C. (1978b). Error estimates for adaptive finite element computations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 15(4) :736. 29, 30
- [Babuška *et al.*, 2004] Babuška, I., Tempone, R., and Zouraris, G. E. (2004). Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 42(2) :800–825. 9, 43
- [Bar-On et Daniel Wagner, 2012] Bar-On, B. and Daniel Wagner, H. (2012). Enamel and dentin as multi-scale bio-composites. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 12 :174–183. 11
- [Bauman *et al.*, 2008] Bauman, P. T., Dhia, H. B., Elkhodja, N., Oden, J. T., and Prudhomme, S. (2008). On the application of the arlequin method to the coupling of particle and continuum models. *Computational Mechanics*, 42(4) :511–530. 24, 127
- [Bauman *et al.*, 2009] Bauman, P. T., Oden, J. T., and Prudhomme, S. (2009). Adaptive multiscale modeling of polymeric materials with arlequin coupling and goals algorithms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198 :799–818. 38, 39, 76

- [Becker et Rannacher, 1996] Becker, R. and Rannacher, R. (1996). A feed-back approach to error control in finite element methods : Basic analysis and examples. *East-West Journal of Numerical Mathematics*, 4 :237–264. 33
- [Belytschko et Black, 1999] Belytschko, T. and Black, T. (1999). Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(5) :601–620. 16
- [Belytschko et al., 2001] Belytschko, T., Moës, N., Usui, S., and Parimi, C. (2001). Arbitrary discontinuities in finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50(4) :993–1013. 16
- [Belytschko et Xiao, 2003] Belytschko, T. and Xiao, S. P. (2003). Coupling methods for continuum model with molecular model. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 1(1) :115–126. 23
- [Ben Dhia, 1998] Ben Dhia, H. (1998). Multiscale mechanical problems : the arlequin method. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Series IIB Mechanics Physics Astronomy*, 326 :899–904. 3, 22, 24
- [Ben Dhia, 1999] Ben Dhia, H. (1999). Numerical modelling of multiscale mechanical problems : the arlequin method. In *European Conference on Computational Mechanics, ECCM'99. München.* 3, 22, 24
- [Ben Dhia, 2006] Ben Dhia, H. (2006). Global-local approaches : the arlequin framework. *European Journal of Computational Mechanics/Revue Européenne de Mécanique Numérique*, 15(1-3) :67–80. 22
- [Ben Dhia, 2008] Ben Dhia, H. (2008). Further insights by theoretical investigations of the multiscale arlequin method. *International journal for multiscale computational engineering*, 6(3) :215–232. 22, 23, 24, 25, 26, 47, 48, 49
- [Ben Dhia et al., 2011] Ben Dhia, H., Chamoin, L., Oden, J. T., and Prudhomme, S. (2011). A new adaptive modeling strategy based on optimal control for atomic-to-continuum coupling simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(37–40) :2675–2696. 24, 76, 127
- [Ben Dhia et Jamond, 2010] Ben Dhia, H. and Jamond, O. (2010). On the use of XFEM within the arlequin framework for the simulation of crack propagation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(21–22) :1403–1414. 24
- [Ben Dhia et Rateau, 2001] Ben Dhia, H. and Rateau, G. (2001). Analyse mathématique de la méthode arlequin mixte - mathematical analysis of the mixed arlequin method. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 332(7) :649–654. 26, 47, 48, 49, 53
- [Ben Dhia et Rateau, 2005] Ben Dhia, H. and Rateau, G. (2005). The arlequin method as a flexible engineering design tool. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 62(11) :1442–1462. 19, 24
- [Ben Dhia et Torkhani, 2011] Ben Dhia, H. and Torkhani, M. (2011). Modeling and computation of fretting wear of structures under sharp contact. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 85(1) :61–83. 24
- [Ben Dhia et Zammali, 2004] Ben Dhia, H. and Zammali, C. (2004). Level-sets and arlequin framework for dynamic contact problems. *European Journal of Computational Mechanics*, 13(5-6-7) :403–414. 24

- [Bensoussan *et al.*, 1978] Bensoussan, A., Lions, J., and Papanicolaou, G. (1978). *Asymptotic analysis for periodic structures*. Elsevier. 11
- [Binder et Heermann, 2010] Binder, K. and Heermann, D. W. (2010). *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics : An Introduction*. Springer. 44, 52
- [Blanc *et al.*, 2007] Blanc, X., Le Bris, C., and Lions, P.-L. (2007). Stochastic homogenization and random lattices. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 88(1). 13
- [Brezzi, 1974] Brezzi, F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *Revue Française d'automatique, informatique, recherche opérationnelle. Analyse Numérique*, 8 :129–151. 48
- [Cai, 2003] Cai, X. (2003). Overlapping domain decomposition methods. In Langtangen, H. P., Tveito, A., Barth, T. J., Griebel, M., Keyes, D. E., Nieminen, R. M., Roose, D., and Schlick, T., editors, *Advanced Topics in Computational Partial Differential Equations*, volume 33 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 57–95. Springer Berlin Heidelberg. 21
- [Chamoin *et al.*, 2008] Chamoin, L., Oden, J., and Prudhomme, S. (2008). A stochastic coupling method for atomic-to-continuum Monte-Carlo simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(43-44) :3530–3546. 24
- [Chevreuil *et al.*, 2012] Chevreuil, M., Nouy, A., and Safatly, E. (2012). A multiscale method with patch for the solution of stochastic partial differential equations with localized uncertainties. *Submitted to Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 21
- [Cho et Oden, 1996] Cho, J. and Oden, J. T. (1996). A priori modeling error estimates of hierarchical models for elasticity problems for plate- and Shell-Like structures. *Mathematical and Computer Modelling*, 23(10) :117–133. 36
- [Ciarlet, 1978] Ciarlet, P. G. (1978). *The finite element method for elliptic problems*. Elsevier. 29
- [Coorevits *et al.*, 1998] Coorevits, P., Dumeau, J., Pelle, J., Ladevèze, P., and Oden, J. (1998). Error estimator and adaptivity for three-dimensional finite element analyses. In *Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics*, volume Volume 47, pages 443–457. Elsevier. 32
- [Costaouec *et al.*, 2010] Costaouec, R., Le Bris, C., and Legoll, F. (2010). Approximation numérique d'une classe de problèmes en homogénéisation stochastique = numerical approximation of a class of problems in stochastic homogenization. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 348 :99–103. 13
- [Cottreanu *et al.*, 2010] Cottreanu, R., Ben Dhia, H., and Clouteau, D. (2010). Localized modeling of uncertainty in the arlequin framework. In *IUTAM Symposium on the Vibration Analysis of Structures with Uncertainties*, pages 477–488. R. Langley and A. Belyaev. 3, 24, 48, 125
- [Cottreanu *et al.*, 2011] Cottreanu, R., Clouteau, D., Ben Dhia, H., and Zaccardi, C. (2011). A stochastic-deterministic coupling method for continuum mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(47-48) :3280–3288. 24, 48, 49, 125, 128, 145

- [Cotttereau *et al.*, 2009] Cotttereau, R., Díez, P., and Huerta, A. (2009). Strict error bounds for linear solid mechanics problems using a subdomain-based flux-free method. *Computational Mechanics*, 44(4) :533–547. 31
- [Demkowicz *et al.*, 1984] Demkowicz, L., Oden, J. T., and Strouboulis, T. (1984). Adaptive finite elements for flow problems with moving boundaries. i - variational principles and a posteriori estimates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 46 :217–251. 31
- [Destuynder, 1986] Destuynder, P. (1986). *Une Théorie asymptotique des plaques minces en élasticité linéaire*. Masson, Paris. 36
- [Duarte *et al.*, 2000] Duarte, C., Babuška, I., and Oden, J. (2000). Generalized finite element methods for three-dimensional structural mechanics problems. *Computers & Structures*, 77(2) :215–232. 16
- [Duvaut et Lions, 1972] Duvaut, G. and Lions, J.-L. (1972). *Les Inéquations en mécanique et en physique*. Travaux et recherches mathématiques, ISSN 0564-156X; 21. Dunod, Paris, France. 27
- [Elkhodja, 2010] Elkhodja, N. (2010). *Approches de structures complexes dans des cadres adaptés de la méthode Arlequin*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 53
- [Epanechnikov, 1969] Epanechnikov, V. A. (1969). Non-parametric estimation of a multivariate probability density. *Theory of Probability & Its Applications*, 14(1) :153–158. 101
- [Eshelby, 1957] Eshelby, J. D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. Technical Report 1226, Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 10
- [Farhat et Roux, 1991] Farhat, C. and Roux, F. (1991). A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(6) :1205–1227. 21, 52
- [Feyel, 1999] Feyel, F. (1999). Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16(1-4) :344–354. 13
- [Feyel et Chaboche, 2000] Feyel, F. and Chaboche, J. (2000). FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183(3-4) :309–330. 13
- [Fish, 1992] Fish, J. (1992). The s-version of the finite element method. *Computers & Structures*, 43(3) :539–547. 19
- [Gardiner, 1983] Gardiner, C. W. (1983). *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*. Springer Verlag. 9
- [Ghanem et Spanos, 2003] Ghanem, R. G. and Spanos, P. D. (2003). *Stochastic finite elements : a spectral approach*. Courier Dover Publications. 9, 43, 44
- [Gosselet et Rey, 2006] Gosselet, P. and Rey, C. (2006). Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 13(4) :515–572. 21
- [Greenberg, 1948] Greenberg, H. J. (1948). The determination of upper and lower bounds for the solution of dirichlet problem. *Journal of Mathematical Physics*, 27 :161–182. 33
- [Hammersley et Handscomb, 1975] Hammersley, J. M. and Handscomb, D. C. (1975). *Monte Carlo methods*. Taylor & Francis. 9, 43, 44, 52

- [Hashin, 1962] Hashin, Z. (1962). The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29 :143–150. 10
- [Hou et Wu, 1997] Hou, T. and Wu, X. (1997). A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media. *Journal of Computational Physics*, 134 :169–189. 18, 20
- [Hu *et al.*, 2011] Hu, H., Damil, N., and Potier-Ferry, M. (2011). A bridging technique to analyze the influence of boundary conditions on instability patterns. *Journal of Computational Physics*, 230(10) :3753–3764. 24
- [Hughes, 1995] Hughes, T. J. R. (1995). Multiscale phenomena : Green’s functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 127(1-4) :387–401. 17
- [Hughes *et al.*, 1998] Hughes, T. J. R., Feijóo, G. R., Mazzei, L., and Quincy, J. (1998). The variational multiscale method—a paradigm for computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 166(1-2) :3–24. 17
- [Jeulin, 2005] Jeulin, D. (2005). Random structures in physics. In Bilodeau, M., Meyer, F., Schmitt, M., Berger, J., Fienberg, S., Gani, J., Krickeberg, K., Olkin, I., and Singer, B., editors, *Space, Structure and Randomness*, volume 183 of *Lecture Notes in Statistics*, pages 183–219. Springer New York. 13
- [Jeulin et Ostoja-Starzewski, 2002] Jeulin, D. and Ostoja-Starzewski, M. (2002). *Mechanics of random and multiscale microstructures*. Springer. 13
- [Jiang *et al.*, 2010] Jiang, L., Mishev, I., and Li, Y. (2010). Stochastic mixed multiscale finite element methods and their applications in random porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(41-44) :2721–2740. 20
- [Johnson et Hansbo, 1992] Johnson, C. and Hansbo, P. (1992). Adaptive finite element methods in computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 101(1–3) :143–181. 33
- [Kanit *et al.*, 2003] Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3647–3679. 13
- [Karhunen, 1946] Karhunen, K. (1946). Über lineare methoden in der wahrscheinlichkeitsrechnung. *Annales Academiae Scientiarum Fennicae, Series AI : Mathematica-Physica*, 37 :3–79. 44
- [Ladevèze, 1975] Ladevèze, P. (1975). *Comparaisons de modèles de milieux continus*. PhD thesis, Université Paris VI. 32
- [Ladevèze et Chamoin, 2010] Ladevèze, P. and Chamoin, L. (2010). Calculation of strict error bounds for finite element approximations of non-linear pointwise quantities of interest. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(13) :1638–1664. 33, 106
- [Ladevèze et Chamoin, 2011] Ladevèze, P. and Chamoin, L. (2011). On the verification of model reduction methods based on the proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(23–24) :2032–2047. 39

- [Ladevèze et Dureisseix, 1999] Ladevèze, P. and Dureisseix, D. (1999). Une nouvelle stratégie de calcul micro/macro en mécanique des structures. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Astronomy*, 327(12) :1237–1244. 21
- [Ladevèze *et al.*, 1991] Ladevèze, P., Pelle, J., and Rougeot, P. (1991). Error estimation and mesh optimization for classical finite elements. *Engineering Computations*, 8(1) :69–80. 32
- [Ladevèze et Pelle, 2005] Ladevèze, P. and Pelle, J.-P. (2005). *Mastering calculations in linear and nonlinear mechanics*. Springer. 32
- [Lévy, 1992] Lévy, P. (1992). *Processus stochastiques et mouvement brownien*. Les Grands classiques Gauthier-Villars, ISSN 0989-0602. J. Gabay. 44
- [Lin, 1967] Lin, Y. K. (1967). *Probabilistic theory of structural dynamics*. McGraw-Hill (New-York). 9
- [Loève, 1955] Loève, M. (1955). *Probability theory, foundation, random sequences*. D. Van Nostrand, New-York. 44
- [Melenk et Babuška, 1996] Melenk, J. and Babuška, I. (1996). The partition of unity finite element method : Basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1–4) :289–314. 15
- [Mjör, 2009] Mjör, I. A. (2009). Dentin permeability : the basis for understanding pulp reactions and adhesive technology. *Brazilian Dental Journal*, 20(1) :3–16. 111
- [Moës *et al.*, 1999] Moës, N., Dolbow, J., and Belytschko, T. (1999). A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(1) :131–150. 16
- [Nakabayashi et Pashley, 1998] Nakabayashi, N. and Pashley, D. H. (1998). *Hybridization of dental hard tissues*. Quintessence Publishing Co. Ltd. Tokyo. 111
- [Nouy, 2009] Nouy, A. (2009). Recent developments in spectral stochastic methods for the numerical solution of stochastic partial differential equations. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16(3) :251–285. 9
- [Nouy et Clément, 2010] Nouy, A. and Clément, A. (2010). eXtended stochastic finite element method for the numerical simulation of heterogeneous materials with random material interfaces. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(10) :1312–1344. 17
- [Nouy *et al.*, 2008] Nouy, A., Clément, A., Schoefs, F., and Moës, N. (2008). An extended stochastic finite element method for solving stochastic partial differential equations on random domains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(51–52) :4663–4682. 17
- [Oden *et al.*, 2005] Oden, J. T., Babuška, I., Nobile, F., Feng, Y., and Tempone, R. (2005). Theory and methodology for estimation and control of errors due to modeling, approximation, and uncertainty. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194 :195–204. 39
- [Oden et Prudhomme, 2002] Oden, J. T. and Prudhomme, S. (2002). Estimation of modeling error in computational mechanics. *Journal of Computational Physics*, 182(2) :496–515. 37, 38, 39

- [Oden *et al.*, 2006] Oden, J. T., Prudhomme, S., Romkes, A., and Bauman, P. (2006). Multi-scale modeling of physical phenomena : adaptive control of models. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 28(6) :2359–2389. 39
- [Oden et Vemaganti, 2000] Oden, J. T. and Vemaganti, K. S. (2000). Estimation of local modeling error and Goal-Oriented adaptive modeling of heterogeneous materials : Part I : error estimates and adaptive algorithms. *Journal of Computational Physics*, 164(1) :22–47. 37, 38
- [Oden et Zohdi, 1997] Oden, J. T. and Zohdi, T. I. (1997). Analysis and adaptive modeling of highly heterogeneous elastic structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, (3-4) :367–391. 18, 36, 37
- [Pashley *et al.*, 1993] Pashley, D., Ciucchi, B., Sano, H., and Horner, J. (1993). Permeability of dentin to adhesive agents. *Quintessence international*, 24(9) :618–631. 111
- [Prager et Synge, 1947] Prager, W. and Synge, J. (1947). Approximation in elasticity based on the concept of functions spaces. *Quarterly of Applied Mathematics*, 5 :261–269. 32
- [Prudhomme *et al.*, 2006] Prudhomme, S., Bauman, P. T., and Oden, J. T. (2006). Error control for molecular statics problems. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 4(5-6) :647–662. 38, 39
- [Prudhomme *et al.*, 2009] Prudhomme, S., Chamoïn, L., Dhia, H. B., and Bauman, P. T. (2009). An adaptive strategy for the control of modeling error in two-dimensional atomic-to-continuum coupling simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198 :1887–1901. 38, 39, 76, 107
- [Prudhomme *et al.*, 2008] Prudhomme, S., Dhia, H. B., Bauman, P., Elkhodja, N., and Oden, J. (2008). Computational analysis of modeling error for the coupling of particle and continuum models by the arlequin method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(41-42) :3399–3409. 24, 76, 127
- [Prudhomme *et al.*, 2004] Prudhomme, S., Nobile, F., Chamoïn, L., and Oden, J. T. (2004). Analysis of a subdomain-based error estimator for finite element approximations of elliptic problems. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 20(2) :165–192. 31
- [Prudhomme et Oden, 1999] Prudhomme, S. and Oden, J. (1999). On goal-oriented error estimation for elliptic problems application to the control of pointwise errors. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 176 :313–331. 35
- [Rateau, 2003] Rateau, G. (2003). *Méthode Arlequin pour les problèmes de mécanique multi-échelles. Application à des problèmes de jonction et de fissuration de structure élancées*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 24, 25, 26, 47, 53, 59
- [Robert et Casella, 2004] Robert, C. P. and Casella, G. (2004). *Monte Carlo statistical methods*. Springer. 43, 44, 45, 52
- [Ródenas *et al.*, 2007] Ródenas, J. J., Tur, M., Fuenmayor, F. J., and Vercher, A. (2007). Improvement of the superconvergent patch recovery technique by the use of constraint equations : the SPR-C technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70(6) :705–727. 32
- [Romkes *et al.*, 2006] Romkes, A., Oden, J. T., and Vemaganti, K. (2006). Multi-scale goal-oriented adaptive modeling of random heterogeneous materials. *Mechanics of Materials*, 38 :859–872. 38

- [Sanchez-Palencia, 1974] Sanchez-Palencia, E. (1974). Comportements local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *International Journal of Engineering Science*, 12(4) :331–351. 11
- [Sanchez-Palencia, 1980] Sanchez-Palencia, E. (1980). Non-homogeneous media and vibration theory. *Lectures Notes in Physics*, 127. 12
- [Shinozuka et Deodatis, 1991] Shinozuka, M. and Deodatis, G. (1991). Simulation of stochastic processes by spectral representation. *Applied Mechanics Reviews*, 44 :191. 52, 60
- [Soize et Ghanem, 2004] Soize, C. and Ghanem, R. (2004). Physical systems with random uncertainties : chaos representations with arbitrary probability measure. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(2) :395–410. 44
- [Stefanou, 2009] Stefanou, G. (2009). The stochastic finite element method : Past, present and future. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(9-12) :1031–1051. 43
- [Strouboulis *et al.*, 2000] Strouboulis, T., Babuška, I., and Copps, K. (2000). The design and analysis of the generalized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 181 :43–69. 16
- [Strouboulis *et al.*, 2001] Strouboulis, T., Copps, K., and Babuska, I. (2001). The generalized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(32-33) :4081–4193. 16
- [Strouboulis et Haque, 1992] Strouboulis, T. and Haque, K. (1992). Recent experiences with error estimation and adaptivity, part I : review of error estimators for scalar elliptic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 97(3) :399–436. 31
- [Strouboulis *et al.*, 2008] Strouboulis, T., Hidajat, R., and Babuška, I. (2008). The generalized finite element method for helmholtz equation. part II : effect of choice of handbook functions, error due to absorbing boundary conditions and its assessment. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(5) :364–380. 16
- [Touzeau, 2012] Touzeau, J. (2012). *Approche numérique multiéchelle/multimodèle de la dégradation des matériaux composites*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 53
- [Vemaganti et Oden, 2001] Vemaganti, K. S. and Oden, J. T. (2001). Estimation of local modeling error and goal-oriented adaptive modeling of heterogeneous materials : Part II : a computational environment for adaptive modeling of heterogeneous elastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(46-47) :6089–6124. 37
- [Vennat, 2009] Vennat, E. (2009). *Etude numérique et expérimentale de l'infiltration de la dentine déminéralisée en surface par des résines composites*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 111
- [Vennat *et al.*, 2009] Vennat, E., Bogicevic, C., Fleureau, J.-M., and Degrange, M. (2009). Demineralized dentin 3D porosity and pore size distribution using mercury porosimetry. *Dental Materials*, 25(6) :729–735. 111
- [Verfürth, 1996] Verfürth, R. (1996). *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques*. Wiley-Teubner, Stuttgart. 30
- [Wiberg et Abdulwahab, 1993] Wiberg, N.-E. and Abdulwahab, F. (1993). Patch recovery based on superconvergent derivatives and equilibrium. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36(16) :2703–2724. 32

- [Xiao et Belytschko, 2004] Xiao, S. P. and Belytschko, T. (2004). A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(17-20) :1645–1669. 23
- [Xu, 2007] Xu, X. F. (2007). A multiscale stochastic finite element method on elliptic problems involving uncertainties. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(25-28) :2723–2736. 20
- [Zaccardi *et al.*, 2012] Zaccardi, C., Chamoin, L., Cottureau, R., and Ben Dhia, H. (2012). Error estimation and model adaptation for a stochastic-deterministic coupling in the arlequin framework. *Submitted to International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 128, 171
- [Zienkiewicz et Zhu, 1987] Zienkiewicz, O. C. and Zhu, J. Z. (1987). A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24(2) :337–357. 31
- [Zienkiewicz et Zhu, 1992] Zienkiewicz, O. C. and Zhu, J. Z. (1992). The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. part 2 : Error estimates and adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33(7) :1365–1382. 31, 32
- [Zohdi *et al.*, 1996] Zohdi, T. I., Oden, J. T., and Rodin, G. J. (1996). Hierarchical modeling of heterogeneous bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 138(1-4) :273–298. 18, 36, 37

Table des figures

1.1	Exemple de structures à plusieurs échelles d'analyse.	1
1.2	Structure hétérogène fissurée type en traction.	3
2.1	Schématisme du problème type étudié.	8
2.2	Modélisation multi-échelles du problème.	10
2.3	Milieu hétérogène et VER.	12
2.4	Diagramme schématique de la méthode FE ²	14
2.5	Principes des méthodes de Partition de l'Unité.	16
2.6	Schéma de principe de la Méthode de Projection de Dirichlet Hiérarchique.	18
2.7	Superposition de maillages dans la S-Méthode.	19
2.8	Décomposition en deux sous-domaines ($\Omega_d = \Omega \setminus \Omega_f$).	22
2.9	Type d'opération de modélisation Arlequin.	23
2.10	Exemple de configuration pour le problème couplé dans le contexte Arlequin.	25
2.11	Exemples de fonctions de pondérations possible pour un problème mono-dimensionnel.	26
2.12	Décomposition du processus d'approximation.	36
3.1	Mono-modèle stochastique de référence.	42
3.2	Exemple de configuration de couplage stochastique par la méthode Arlequin.	46
3.3	Paramètre de poids accordé aux modèles.	47
3.4	Mono-modèle 1D stochastique de référence.	54
3.5	Structure de corrélation choisie et densité spectrale associée.	54
3.6	Modèle approché en utilisant la méthode Arlequin.	55
3.7	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 1D.	56
3.8	Indice de corrélation entre la solution en un point et les propriétés matériaux.	56
3.9	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 1D en changeant de support de discrétisation de la zone de couplage.	58
3.10	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 1D avec défaut.	58
3.11	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 1D avec défaut et un poids insuffisant donné au patch.	59
3.12	Échantillon 2D de référence.	59
3.13	Exemple d'une réalisation du champ $K(\mathbf{x}, \theta)$	60
3.14	Solution pour le mono-modèle 2D.	61
3.15	Variance de la solution pour le mono-modèle 2D.	62
3.16	Solution Arlequin 2D.	63
3.17	Variance de la solution Arlequin 2D.	64
3.18	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 2D suivant l'axe y	65
3.19	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 2D suivant l'axe x	66
3.20	Indice de corrélation entre la solution 2D en un point et les propriétés matériaux.	67
3.21	Indice de corrélation entre la norme du gradient solution en un point et les propriétés matériaux.	68

3.22	Solution Arlequin 2D en changeant le support de discrétisation de la zone de couplage.	69
3.23	Variance de la solution pour le mono-modèle 2D en changeant le support de discrétisation pour la zone de couplage.	69
3.24	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 2D suivant l'axe y en changeant le support de discrétisation pour la zone de couplage.	70
3.25	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 2D suivant l'axe x en changeant le support de discrétisation pour la zone de couplage.	70
3.26	Solution Arlequin 2D avec un patch plus grand.	71
3.27	Variance de la solution Arlequin 2D avec un patch plus grand.	71
3.28	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 2D suivant l'axe y avec un patch plus grand.	72
3.29	Comparaison des solutions mono-modèle et Arlequin 2D suivant l'axe x avec un patch plus grand.	72
4.1	Mono-modèle stochastique de référence.	77
4.2	Modèle Arlequin mono-dimensionnel.	78
4.3	Modèle Arlequin primal discrétisé.	79
4.4	Mono-modèle adjoint relatif à la quantité d'intérêt q_∂	80
4.5	Mono-modèle adjoint relatif à la quantité d'intérêt q_v	81
4.6	Modèle Arlequin adjoint discrétisé relatif à la quantité d'intérêt q_∂	81
4.7	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de la demi-largeur du patch pour l'évaluation de q_∂	85
4.8	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction du nombre de réalisations de Monte Carlo pour l'évaluation de q_∂	86
4.9	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de N_d pour l'évaluation de q_∂	86
4.10	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de la demi-largeur du patch pour l'évaluation de q_v	87
4.11	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de MC pour l'évaluation de q_v	88
4.12	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de N_d pour l'évaluation de q_v	88
4.13	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de MC pour l'évaluation de q_∂ avec un modèle de référence Arlequin.	90
4.14	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de MC pour l'évaluation de q_v avec un modèle de référence Arlequin.	90
4.15	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de N_d pour l'évaluation de q_∂ avec un modèle de référence Arlequin.	91
4.16	Évolution (en %) des erreurs relatives η_e et η_{ref} en fonction de N_d pour l'évaluation de q_v avec un modèle de référence Arlequin.	91
4.17	Exemple d'étapes du processus d'approximation.	96
4.18	Exemple d'algorithme du processus d'adaptation.	99
4.19	Évolution (en %) des sources d'erreurs relatives pour l'approximation de q_∂	100
4.20	Allure des densités de probabilité de la quantité q^θ	101
4.21	Évolution (en %) des sources d'erreurs relatives pour l'approximation de q_v	101
4.22	Allure des densités de probabilité de la quantité q^θ	102

4.23	Cas 2D.	103
4.24	Problème adjoint associé à la quantité d'intérêt q_{2D}	104
4.25	Déplacement solution du problème adjoint associé à q_{2D}	104
4.26	Évolution (en %) des sources d'erreurs relatives pour l'approximation de q_{2D}	105
4.27	Allure des densités de probabilité de la quantité q_{2D}^θ	106
5.1	Micrographie optique d'une section longitudinale médiane d'une prémolaire maxillaire.	110
5.2	Image électronique de dentine intacte.	111
5.3	Image électronique de dentine déminéralisée	112
5.4	Échantillon étudié.	112
5.5	Problème d'infiltration.	113
5.6	Exemples de réalisation de $C(\mathbf{x}, \theta)$ pour différentes longueurs de corrélation.	115
5.7	Problème Arlequin approché de l'infiltration dans la dentine.	116
5.8	Réalisation de pression obtenue par la méthode Arlequin.	116
5.9	Pression du problème adjoint relatif à q_u	117
5.10	Vitesse d'infiltration suivant l'axe y	117
5.11	Évolution de la quantité q_u en fonction de L_{cor}	118
5.12	Erreurs relatives η_q (en %).	118
5.13	Échantillon étudié pour l'infiltration déséquilibrée.	119
5.14	Problème Arlequin 2 pour l'étude du cas critique d'infiltration.	119
5.15	Pression du problème adjoint relatif à q_u pour le cas critique.	120
5.16	Vitesse d'infiltration suivant l'axe y pour l'étude du cas critique.	121
5.17	Norme de la vitesse d'infiltration pour le cas critique.	121

Liste des tableaux

4.1	Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de L_s	84
4.2	Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de MC	84
4.3	Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de N_d	84
4.4	Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de MC en prenant un modèle Arlequin comme référence.	89
4.5	Paramètres des modèles utilisés pour l'étude des quantités q_∂ et q_v en fonction de N_d en prenant un modèle Arlequin comme référence.	89
4.6	Définition des modèles utilisés pour la calibration du problème adjoint (paramètre L_s) relatif à l'évaluation de q_∂	92
4.7	Étude de l'influence du paramètre L_s du modèle adjoint sur l'estimation d'erreur relative à q_∂	93
4.8	Définition des modèles utilisés pour la calibration du problème adjoint (paramètre MC) relatif à l'évaluation de q_∂	93
4.9	Étude de l'influence du paramètre MC du modèle adjoint sur l'estimation d'erreur relative à q_∂	94
4.10	Étude de l'influence du paramètre MC seul du modèle adjoint sur l'estimation d'erreur relative à q_∂	94
4.11	Définition des modèles utilisés pour la calibration du problème adjoint (paramètre N_d) relatif à l'évaluation de q_∂	94
4.12	Étude de l'influence du paramètre N_d du modèle adjoint sur l'estimation d'erreur relative à q_∂	95
4.13	Étude de l'influence du paramètre N_d seul du modèle adjoint sur l'estimation d'erreur relative à q_∂	95
4.14	Évolution des paramètres et des erreurs relatives (vraies et estimées, en %) pour l'évaluation de q_∂	100
4.15	Évolution des paramètres et des erreurs relatives estimées (en %) pour l'évaluation de q_v	102
4.16	Évolution des paramètres et des erreurs relatives estimées (en %) pour l'évaluation de q_{2D}	105
5.1	Différentes résines employées et viscosités dynamiques associées.	114
5.2	Paramètres des modèles utilisés pour l'étude critique.	120
5.3	Erreurs relatives (en %) obtenues pour les cas $L_{cor} = 0.5, 1, 1.5, 2\mu m$	120
5.4	Paramètres des modèles utilisés pour l'étude du cas critique.	122
5.5	Temps de calcul associés à l'étude critique.	122

Papier de référence : CMAME 2011

Cette annexe est constituée de l'article [Cottureau *et al.*, 2011] publié dans la revue *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.

A stochastic-deterministic coupling method for continuum mechanics

R. Cottereau*, D. Clouteau, H. Ben Dhia, C. Zaccardi

Laboratoire MSSMat UMR 8579, École Centrale Paris, CNRS, France

Abstract

In this paper, we present a novel approach that allows to couple a deterministic continuum model with a stochastic continuum one. The coupling strategy is performed in the Arlequin method, which is based on a volume coupling and a partition of the energy. A suitable functional space is chosen for the weak enforcement of the continuity between the two models. The choice of this space ensures that the mean of the stochastic solution equals the deterministic solution point-wise, and enforces appropriate boundary conditions on the stochastic dimension. The proof of the existence of the solution of the mixed problem is provided. The numerical strategy is also reviewed, in particular with a view at the Monte Carlo method. Finally, examples show the interest of the method, and possible strategies for use in adaptive modeling.

Keywords: Multiscale method, Coupling method, Stochastic mechanics, Homogenization, Arlequin method

1. Introduction

Classical deterministic models provide global predictions that are satisfactory for many industrial applications. However, when one is interested in a very localized behavior or quantity, or when multiscale phenomena come into play, these models may not be sufficient. For instance, the limited heterogeneity of a material modeled as a continuum might have no influence on its behavior on a large scale, while the study of a local stress intensity factor would strongly depend on the local heterogeneity of the mechanical

*regis.cottereau@ecp.fr

parameters. Unfortunately, for these problems, the information necessary to parameterize the relevant, very complex, models is usually not available. Stochastic methods have therefore been proposed and now appear unavoidable in multiscale modeling.

Although the use of stochastic models and methods has expanded rapidly in the last decades, the related numerical costs are still often prohibitive. Hence, the application of these methods in a complex or industrial context remains limited. An important field of research is therefore concerned with the reduction of the costs associated with the use of stochastic methods, for example by using iterative methods specially adapted to the structure of the matrices arising in the Stochastic Finite Element (FE) method [1, 2], using reduced bases for the representation of random fields [3], or using special domain decomposition techniques for parallel resolution on clusters of computers [4].

The present paper proposes an alternative to these purely mathematical/numerical approaches through the coupling of two models: one deterministic and one stochastic. The general goal is that of modeling a global problem in a mean or homogeneous way where it yields sufficient accuracy, while retaining a stochastic model where needed. Hence, additional complexity is added in the model only where required, and the general approach is both more elegant and numerically cheaper than a global all-over stochastic model would be. Further, the cuts on computational costs mean that industrial applications come within reach.

The core idea for this paper, which is the choice of the operator and functional space for the coupling (Section 3.2) was proposed originally in [5]. It is here further described, in particular by adding the proof of existence and uniqueness of a solution for the mixed problem (Theorem 3.1), and showing how a Monte Carlo approach can be considered for the resolution of that problem (Section 3.4.2).

This work is closely related to two previous works in the literature [6, 7]. However, in [6], the theoretical basis, which is different from the Arlequin formulation, is less general. In particular, it is only aimed at coupling a deterministic Boundary Element method with a stochastic FE method. In the recent work [7], the authors aim at coupling two stochastic models, one continuous, and one atomistic. However, many theoretical questions are left out. In particular, the coupling is performed between realizations of the stochastic operators, while we try to describe here the coupling at the level of the stochastic operators.

In the first part of this paper, we will present each of the two models that will be used: a deterministic continuum model with constant parameters (the "classical" one), and its stochastic counterpart, where the parameter varies randomly in space and is modeled as a random field. This first section will be concluded by a brief review of the uses and limitations of each of these models, taken separately, and the interest of using coupling approaches. The second part will describe the main novelty of the paper, that is the description of a general coupling approach for the two models described above, in the Arlequin framework. Finally, applications in 1D and 2D will show the efficiency and interest of the method. In particular, a first hint at the use of this approach in the context of adaptivity will be described.

2. Description of the two mono-models

In this section, we describe the two models that will be considered in this paper: a continuum scalar mechanics model, with deterministic coefficients, and the same type of model with stochastic coefficients. Some indications will also be given concerning the uses and limitations of each of these two models in physical applications. The two models that are described in this section will be referred to as *mono-models*, in opposition to the *coupled model* that will be considered in the next section. In the section of applications, we will compare extensively the solutions obtained using the coupled model with those obtained with each of the two mono-models.

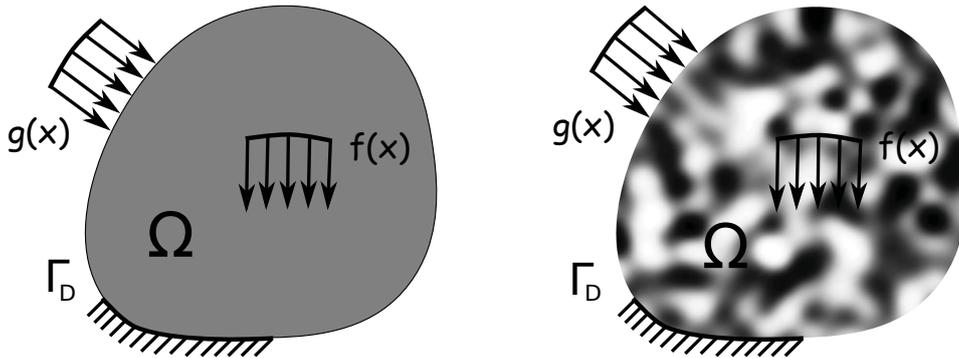


Figure 1: Description of the two mono-models: deterministic mono-model with constant coefficient \underline{K} (left) and stochastic mono-model with heterogeneous coefficient $\mathbf{K}(x)$ (right)

2.1. The deterministic continuum mono-model

Let us consider a domain Ω of \mathbb{R}^d , with outgoing normal vector n and smooth boundary $\partial\Omega$, separated into Dirichlet and Neumann boundaries Γ_D and Γ_N , such that $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \partial\Omega$, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$, and $\Gamma_D \neq \emptyset$ (figure 1, left). We consider Poisson's equation, with a deterministic scalar parameter $\underline{K} > 0$, considered here constant, a bulk loading field $f(x)$, defined on Ω , and a surface loading field $g_n(x)$, defined on Γ_N . Supposing for notational simplicity that the Dirichlet boundary condition is homogeneous, the weak formulation for this problem reads: find $u \in \mathcal{V}$ such that

$$a(u, v) = \ell(v), \forall v \in \mathcal{V}, \quad (1)$$

where $a : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ and $\ell : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ are defined, respectively, by $a(u, v) = \int_{\Omega} \underline{K} \nabla u \cdot \nabla v \, dx$, and $\ell(v) = \int_{\Omega} f v \, dx + \int_{\Gamma_N} g_n v \, dx$, and

$$\mathcal{V} = \{v \in \mathcal{H}^1(\Omega), v|_{\Gamma_D} = 0\}. \quad (2)$$

Endowed with the inner product $(u, v)_{\mathcal{V}} = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx$, and associated norm $\|u\|_{\mathcal{V}}^2 = \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, dx$, \mathcal{V} is a Hilbert space. The problem (1) can be shown to have a unique solution u , for instance using Lax-Milgram theorem [8, chapter 2]. This unique solution can be approximated, for example, by the Finite Element method.

2.2. The stochastic continuum mono-model

Let us now consider the same domain Ω , but this time with a random fluctuating mechanical parameter. Let us model this parameter by a random field $\mathbf{K}(x) \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{C}^0(\Omega))$, where (Θ, \mathcal{F}, P) is a complete probability space, with Θ a set of outcomes, \mathcal{F} a σ -algebra of events of Θ , and $P : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ a probability measure. We additionally assume (as in [9] for example) that this field is bounded and uniformly coercive, that is to say $\exists K_{\min}, K_{\max} \in (0, +\infty)$, such that

$$0 < K_{\min} \leq \mathbf{K}(x) \leq K_{\max} < \infty, \forall x \in \Omega, \text{ almost surely.} \quad (3)$$

The weak formulation of the corresponding stochastic boundary value problem reads: find $\mathbf{u} \in \mathcal{W}$ such that

$$\mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathcal{L}(\mathbf{v}), \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W} \quad (4)$$

where $\mathcal{A} : \mathcal{W} \times \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$ and $\mathcal{L} : \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$ are defined, respectively, by $\mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} \mathbf{K} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v} \, dx \right]$, and $\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} f \mathbb{E}[\mathbf{v}] \, dx + \int_{\Gamma_N} g_n \mathbb{E}[\mathbf{v}] \, dx$, $\mathbb{E}[\cdot] = \int_{\Theta} \cdot \, dP$ denotes the mathematical expectation,

$$\mathcal{W} = \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{V}), \quad (5)$$

and \mathcal{V} is defined in Eq. (2). Endowed with the inner product $(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{\mathcal{W}} = \mathbb{E}[(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{\mathcal{V}}] = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v} \, dx \right]$, and associated norm $\|\mathbf{u}\|_{\mathcal{W}}^2 = \mathbb{E}[\|\mathbf{u}\|_{\mathcal{V}}^2] = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} |\nabla \mathbf{u}|^2 \, dx \right]$, \mathcal{W} is a Hilbert space.

As in the previous case, using Lax-Milgram theorem, it can be proved that this problem has a unique solution \mathbf{u} (see for instance [9]). An approximation of that solution can then be obtained, for example, by using a Stochastic FE method [10, 11] or a Monte Carlo approach [12].

Remark 2.1. *We assume here that the loads f and g are deterministic but this should not be seen as a restriction of the method. In particular, the mixed formulation of the next section and its numerical approximation can be developed with both the parameter $\mathbf{K}(x)$ and the loads modeled as random fields.*

Remark 2.2. *The existence and uniqueness of the solution of the above stochastic boundary value problem can also be proved with less constraining boundary conditions. In particular, the case when*

$$\mathcal{W} = \left\{ \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega)); \mathbb{E}[\mathbf{v}] = 0, \forall x \in \Gamma_D; \int_{\Gamma_D} \mathbf{v} \, dx = 0, \text{ a.s.} \right\} \quad (6)$$

still works. The homogeneous boundary condition is therefore not imposed anymore almost surely and almost everywhere. Rather, the space average of the displacement over the Dirichlet boundary cancels almost surely. This type of boundary condition is similar to what is done within the Arlequin framework in section 3.2.

2.3. Use of the mono-models and interest of coupling approaches

The mono-model described in section 2.1 is interesting when the material is considered on a scale at which homogenization can take place. This statement is intrinsically linked to the quantities of interest that we aim to evaluate. In particular, the estimation of the average displacement over a given area might be well evaluated using such a homogenized mono-model.

On the other hand, considering local quantities with this mono-model is not adequate. For example, following the path of the tip of a fracture can probably not be performed using this model. As a general pattern, the deterministic mono-model of section 2.1 will be appropriate for the evaluation of average quantities in macro-scale problems. In that setting, the FE method can be very efficiently implemented and yields accurate results for a relatively low cost.

The stochastic mono-model tries to take into account, to some extent, the inherent heterogeneity of the material, without falling into the pits of

- really modeling the material at a smaller scale, by considering a fully different physical setting, *e.g.* polycrystalline mechanics;
- having to identify the exact value of the parameter field in each point in space, which, in a fully heterogeneous setting, would result in a infinite number of scalar parameters to be identified.

By introducing a stochastic field for the parameter, we consider a random heterogeneous field that is parameterized only by a few quantities (typically, the mean, the autocorrelation, and the correlation length) and takes into account a possible uncertainty related to the identification of the parameter field. This approach is much richer than the previous homogeneous one, but at the cost of a more expensive solution process. Roughly speaking, we have added one dimension to the size of the problem.

Often, the solution of the refined model is too expensive, while the details provided by the coarse model are not sufficient. Hence, we propose in the next section a coupled approach, for which both models are considered, each on a different (and overlapping) part of the total domain. Note that this requires that each of the models be appropriate where it expresses itself. In particular, this means that only local features of the refined model are required for a good evaluation of the global solution (see the applications in section 4 for more details).

Remark 2.3. *The Arlequin method was originally designed to perform the coupling of different physical models (e.g. shell and 3D continuum [13], continuum and atomistic [7], ...). Hence the generalization of the approach presented in this paper for continuum-continuum coupling to different types of physical models, for which one of the two is stochastic, is not expected to yield any additional difficulty. Other examples of coupling will be presented in forthcoming papers.*

3. A general deterministic-stochastic coupling approach

In this section, we describe the construction of the coupled model, including features of the deterministic continuum mono-model on part of the domain, and features of the stochastic continuum mono-model on another one. As this construction is performed in the Arlequin framework [14, 15, 13, 16], we first recall this method on a more classical deterministic-deterministic continuum model. Then, the stochastic-deterministic case, which is the core of this paper, is described.

3.1. The Arlequin method for coupling two deterministic continuum models

Let us introduce two overlapping subdomains of the domain Ω : Ω_1 , on which the first model will express itself, and Ω_2 , for the second model. We further select a subdomain Ω_c of the overlap $\Omega_1 \cap \Omega_2$ over which the two models will communicate. The parts over which only one model is described and the part of the overlap over which no communication takes place $(\Omega_1 \cup \Omega_2) \setminus \Omega_c$ will be called *free*, in the sense that each model expresses itself with no constraint there.

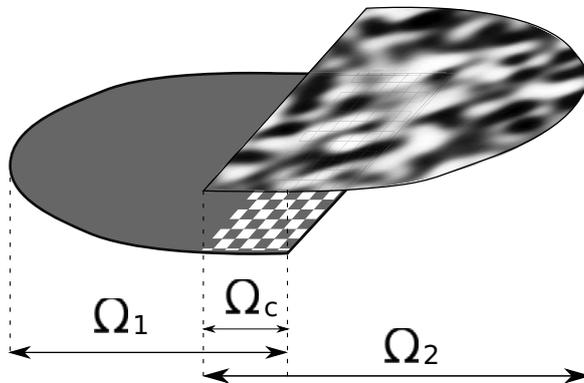


Figure 2: Definition of the different subdomains, with emphasis on the coupling area Ω_c on which both models express themselves.

We consider here the case where the two models are deterministic and similar. This is useful in the context of mesh refinement, as the two models are the same but are not discretized similarly [14, 15, 13]. Hence, a coarse finite element basis (supported by a coarse mesh) will be used on Ω_1 to account for large scale deformations and stresses, and a refined one (supported

on a fine mesh) will be used on Ω_2 to reproduce more accurately some local effects of interest.

The Arlequin method allows to couple these two models through the resolution of the following mixed problem: find $(u_1, u_2, \Phi) \in \mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_2 \times \mathcal{V}_c$ such that

$$\begin{cases} a_1(u_1, v) + C(\Phi, v) = \ell_1(v), & \forall v \in \mathcal{V}_1 \\ a_2(u_2, v) - C(\Phi, v) = \ell_2(v), & \forall v \in \mathcal{V}_2, \\ C(\Psi, u_1 - u_2) = 0, & \forall \Psi \in \mathcal{V}_c \end{cases} \quad (7)$$

where the bilinear forms $a_1 : \mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_1 \rightarrow \mathbb{R}$, $a_2 : \mathcal{V}_2 \times \mathcal{V}_2 \rightarrow \mathbb{R}$ and $C : \mathcal{V}_c \times \mathcal{V}_c \rightarrow \mathbb{R}$ are defined, respectively, by $a_1(u, v) = \int_{\Omega} \alpha_1 \underline{K} \nabla u \cdot \nabla v \, dx$, $a_2(u, v) = \int_{\Omega_2} \alpha_2 \underline{K} \nabla u \cdot \nabla v \, dx$, and

$$C(u, v) = \int_{\Omega_c} (\kappa_0 uv + \kappa_1 \nabla u \cdot \nabla v) \, dx, \quad (8)$$

with κ_0 and κ_1 two constants (see for example [13] for details), the linear forms $\ell_1 : \mathcal{V}_1 \rightarrow \mathbb{R}$ and $\ell_2 : \mathcal{V}_2 \rightarrow \mathbb{R}$ and defined, respectively, by $\ell_1(v) = \int_{\Omega_1} \alpha_1 f v \, dx + \int_{\Gamma_N} \alpha_1 g_n v \, dx$ and $\ell_2(v) = \int_{\Omega_2} \alpha_2 f v \, dx + \int_{\Gamma_N} \alpha_2 g_n v \, dx$, the weights are chosen such that (see figure 3)

$$\begin{cases} \alpha_1, \alpha_2 \geq 0 & \text{in } \Omega_1 \cup \Omega_2 \\ \alpha_1 + \alpha_2 = 1 & \text{in } \Omega_1 \cup \Omega_2 \\ \alpha_1, \alpha_2 \text{ constant} & \text{in } (\Omega_1 \cup \Omega_2) \setminus \Omega_c \end{cases}, \quad (9)$$

and the functional spaces are $\mathcal{V}_1 = \{v \in \mathcal{H}^1(\Omega_1), v|_{\Gamma_D} = 0\}$, $\mathcal{V}_2 = \{v \in \mathcal{H}^1(\Omega_2)\}$ and $\mathcal{V}_c = \{v \in \mathcal{H}^1(\Omega_c)\}$.

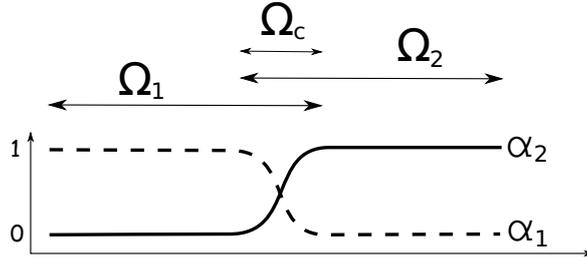


Figure 3: Example of definition of the functions α_1 and α_2 in the case when Ω_2 is not embedded in Ω_1 , as a function of the position, in 1D.

With reasonable assumptions (in particular, that $\Omega_c \neq \emptyset$), the Arlequin system (7) can be shown to have a unique solution [15]. This solution can be approximated by the Finite Element method.

Remark 3.1. *For notational simplicity, this has been derived in the case where the patch Ω_2 is totally included inside the domain Ω . In particular, the patch does not intersect the Dirichlet boundary condition, i.e. $\partial\Omega_2 \cap \Gamma_D = \emptyset$. However, more general results can be obtained without any further theoretical difficulty [16].*

Remark 3.2. *Other coupling operators have been proposed, in particular an L^2 operator. In that case, the Arlequin method shows similarities with the bridging scale method [17].*

3.2. The Arlequin method for deterministic-stochastic coupling

We now wish to superpose, in the Arlequin framework, the following two models: a deterministic continuum model (as in Sec. 2.1), in Ω_1 ; and a stochastic continuum model (as in Sec. 2.2), in Ω_2 . We will therefore consider two models of the parameter field: a deterministic one, \underline{K} , assumed (for simplicity) constant on the domain Ω_1 ; and a stochastic one, $\mathbf{K}(x)$, modeled as a random field on Ω_2 . We further assume that \mathbf{K} verifies on Ω_2 conditions similar to the ones described in Sec. 2.2 on Ω . Finally, for the coupling approach to make sense, the two models should correspond one to the other, through homogenization [18]. In particular, in 1D, one should have $\underline{K} = \mathbb{E}[\mathbf{K}^{-1}]^{-1}$.

The stochastic-deterministic Arlequin problem reads: find $(u_1, \mathbf{u}_2, \Phi) \in \mathcal{V}_1 \times \mathcal{W}_2 \times \mathcal{W}_c$ such that

$$\begin{cases} a_1(u_1, v) + C(\Phi, v) = \ell_1(v), & \forall v \in \mathcal{V}_1 \\ \mathcal{A}_2(\mathbf{u}_2, \mathbf{v}) - C(\Phi, \mathbf{v}) = \mathcal{L}_2(\mathbf{v}), & \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}_2, \\ C(\Phi, u_1 - \mathbf{u}_2) = 0, & \forall \Phi \in \mathcal{W}_c \end{cases}, \quad (10)$$

where the bilinear forms $a_1 : \mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_1 \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathcal{A}_2 : \mathcal{W}_2 \times \mathcal{W}_2 \rightarrow \mathbb{R}$, and $C : \mathcal{W}_c \times \mathcal{W}_c \rightarrow \mathbb{R}$ are defined by

$$a_1(u, v) = \int_{\Omega_1} \alpha_1 \underline{K} \nabla u \cdot \nabla v \, dx, \quad (11)$$

$$\mathcal{A}_2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_2} \alpha_2 \mathbf{K} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v} \, dx \right], \quad (12)$$

and

$$C(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_c} (\kappa_0 \mathbf{u} \mathbf{v} + \kappa_1 \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v}) dx \right], \quad (13)$$

where the linear forms $\ell_1 : \mathcal{V}_1 \rightarrow \mathbb{R}$ and $\mathcal{L}_2 : \mathcal{W}_2 \rightarrow \mathbb{R}$ are defined, respectively, by $\ell_1(v) = \int_{\Omega_1} \alpha_1 f v dx + \int_{\Gamma_N} \alpha_1 g_n v dx$ and $\mathcal{L}_2(\mathbf{v}) = \int_{\Omega_2} \alpha_2 f \mathbb{E}[\mathbf{v}] dx + \int_{\Gamma_N} \alpha_2 g_n \mathbb{E}[\mathbf{v}] dx$, and the functional spaces \mathcal{W}_2 and \mathcal{W}_c are given by

$$\mathcal{W}_2 = \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{V}_2), \quad (14)$$

and

$$\mathcal{W}_c = \left\{ \psi(x) + \boldsymbol{\theta} \mathbb{I}_c(x) \mid \psi \in \mathcal{V}_c, \int_{\Omega_c} \psi dx = 0, \boldsymbol{\theta} \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathbb{R}) \right\}, \quad (15)$$

with $\mathcal{V}_2 = \mathcal{H}^1(\Omega_2)$ and $\mathcal{V}_c = \mathcal{H}^1(\Omega_c)$, and where the indicator function $\mathbb{I}(x)$ is such that $\mathbb{I}_c(x \in \Omega_c) = 1$ and $\mathbb{I}_c(x \notin \Omega_c) = 0$. The condition imposed here on ψ is not necessary for the definition of the space \mathcal{W}_c . It is however presented here in view of the redundancy that arises when the discretization of the corresponding fields is contemplated. Indeed, a deterministic rigid body mode (here, a constant field) can be described equivalently as $(\psi = 0, \boldsymbol{\theta} = 1)$, where $\boldsymbol{\theta} = 1$ is taken as dirac function in the stochastic dimension, or $(\psi = \mathbb{I}(x), \boldsymbol{\theta} = 0)$. One could instead use the condition $\mathbb{E}[\boldsymbol{\theta}] = 0$, but this implies a global condition in the stochastic dimension, and is hence not appropriate for the Monte Carlo solution proposed in section 3.4.2.

Note that the space \mathcal{W}_c can be seen as composed of random fields with a spatially varying mean and perfectly spatially correlated randomness. Thanks to the specific structure of that space, the last line of the system (10) can be written equivalently, $\forall \boldsymbol{\Psi} = \psi(x) + \boldsymbol{\theta} \mathbb{I}_c(x) \in \mathcal{W}_c$,

$$0 = C(\boldsymbol{\Psi}, u_1 - \mathbf{u}_2) \quad (16)$$

$$= \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_c} (\kappa_0 (\psi + \boldsymbol{\theta} \mathbb{I}_c)(u_1 - \mathbf{u}_2) + \kappa_1 \nabla \psi \cdot \nabla (u_1 - \mathbf{u}_2)) dx \right] \quad (17)$$

$$= C(\mathbb{E}[\boldsymbol{\Psi}], u_1 - \mathbb{E}[\mathbf{u}_2]) + \kappa_0 \mathbb{E} \left[\boldsymbol{\theta} \int_{\Omega_c} (u_1 - \mathbf{u}_2) dx \right]. \quad (18)$$

Therefore, this condition imposes that the (ensemble) average of the field \mathbf{u}_2 should be equal to the field u_1 , in all points of Ω_c , and that the variability of the space average quantity $\int_{\Omega_c} (\mathbb{E}[\mathbf{u}_2] - \mathbf{u}_2) dx$ should cancel. In other words, this means that some degree of homogenization takes place within the coupling zone. In particular, if that zone is not big enough with respect

to the correlation lengths of the fields $\mathbf{K}(x)$ or $\mathbf{u}_2(x)$, the Arlequin scheme is expected to yield results that would be different from those obtained with the stochastic monomodel. It would mean that there is not enough localization of the variability and stochasticity for the Arlequin scheme to make sense.

Remark 3.3. *The indicator function $\mathbb{I}(x)$ is a generator of the kernel of the acoustic operator we are considering here. If we were to consider elasticity, the definition of the mediator space would be the superposition of a space-fluctuating average (like here), and six rigid-body movements with random coefficients.*

Theorem 3.1. *If the weight functions do not cancel on their respective domains of definition, including the overlapping area (i.e. $\exists \alpha_0 > 0$ such that $\alpha_0 < \alpha_1(x)$ in Ω_1 and $\alpha_0 < \alpha_2(x)$ in Ω_2), the problem (10) admits a unique solution.*

Proof. To prove the existence and uniqueness of this system of equations, we will follow the theory of Brezzi [19]. To come closer to the format used in the cited paper, we will rewrite the system as: find $(\mathbf{u}, \Phi) \in \mathcal{V} \times \mathcal{W}_c$ such that

$$\begin{cases} \mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \hat{C}(\Phi, \mathbf{v}) = \mathcal{L}(\mathbf{v}), & \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \\ \hat{C}(\Psi, \mathbf{u}) = 0, & \forall \Psi \in \mathcal{W}_c \end{cases}, \quad (19)$$

with $\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 \times \mathcal{W}_2$, $\mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = a_1(u_1, v_1) + \mathcal{A}_2(\mathbf{u}_2, \mathbf{v}_2)$, with $\mathbf{u} = (u_1, \mathbf{u}_2) \in \mathcal{V}$ and $\mathbf{v} = (v_1, \mathbf{v}_2) \in \mathcal{V}$, $\hat{C}(\Phi, \mathbf{u}) = C(\Phi, u_1 - \mathbf{u}_2)$, and $\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \ell_1(v_1) + \mathcal{L}_2(\mathbf{v}_2)$. To ensure the existence and uniqueness of a solution to this problem, we must check a property of coercivity of the bilinear form \mathcal{A} on the kernel of \hat{C} (with respect to the second argument), and the *inf-sup* condition on \hat{C} (the continuity of the linear and bilinear forms defined here is trivial).

To check the coercivity of the bilinear form, we assume that there exists a sequence of normalized functions $\mathbf{v}^n = (v_1^n, \mathbf{v}_2^n)$ in the kernel $N_{\mathcal{W}_c}(\hat{C}) = \{\mathbf{v} \in \mathcal{V} | \forall \Psi \in \mathcal{W}_c, \hat{C}(\Psi, \mathbf{v}) = 0\}$ (with $\|\mathbf{v}^n\| = 1, \forall n > 0$), such that $\lim_{n \rightarrow 0} \mathcal{A}(\mathbf{v}^n, \mathbf{v}^n) = 0$, and prove that it implies the contradiction that the limit sequence $\mathbf{v} = (v_1, \mathbf{v}_2)$ vanishes. Indeed, because it is normalized, the α_1 , α_2 , \underline{K} and \mathbf{K} are strictly positive, and $\mathcal{A}(\mathbf{v}^n, \mathbf{v}^n) = a_1(v_1^n, v_1^n) + \mathcal{A}_2(\mathbf{v}_2^n, \mathbf{v}_2^n)$, the sequence (possibly considering a sub-sequence) converges to a function verifying $\nabla v_1 = 0$ almost everywhere on Ω_1 and $\nabla \mathbf{v}_2 = 0$ almost everywhere in Ω_2 and almost surely. The former condition, along with the homogeneous Dirichlet boundary condition in \mathcal{V}_1 ensures that $v_1 = 0$ almost everywhere

on Ω_1 . The latter condition implies, by definition of \mathcal{W}_c (see Eq. (15)), that $\mathbf{v}_2 \in \mathcal{W}_c$. Because $v_1 = 0$, this implies $\hat{C}(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}) = -C(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2) = 0$, and, since C is a scalar product, $\mathbf{u}_2 = 0$ almost everywhere in Ω_c and almost surely. The extension to Ω_2 comes again from $\nabla \mathbf{v}_2 = 0$. Hence, the limiting sequence verifies $\mathbf{v} = 0$, which is in contradiction with the initial hypotheses, and proves the coercivity of \mathcal{A} on $N_{\mathcal{W}_c}(\hat{C})$. The key concepts for this part of the proof are the positivity of α_1 and α_2 on their respective domains of definition, and the fact that the rigid body modes for \mathbf{u}_2 on Ω_c are contained in \mathcal{W}_c .

To prove the *inf-sup* condition on \hat{C} , we recall that, because \mathcal{W}_c is included inside the restriction of \mathcal{W}_2 to the space support Ω_c , it is possible to prolongate continuously any element $\Psi \in \mathcal{W}_c$ into an element $\overline{\Psi}_2 \in \mathcal{W}_2$. Then, choosing $\mathbf{v} = (0, -\overline{\Psi}_2) \in \mathcal{V}$, we have

$$\sup_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}, \|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}} \neq 0} \frac{\hat{C}(\Psi, \mathbf{v})}{\|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}}} \geq \frac{C(\Psi, \overline{\Psi}_2)}{\|\overline{\Psi}_2\|_{\mathcal{W}_2}}, \quad (20)$$

where $\|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}} = \|v_1\|_{\mathcal{V}_1} + \|\mathbf{v}_2\|_{\mathcal{W}_2}$, $\|v_1\|_{\mathcal{V}_1} = \int_{\Omega_1} v_1^2 + |\nabla u_1|^2 dx$, and $\|\mathbf{v}_2\|_{\mathcal{W}_2} = \mathbb{E}[\int_{\Omega_2} \mathbf{v}_2^2 + |\nabla \mathbf{v}_2|^2 dx]$. Using the continuity of the prolongation operator, $\exists \gamma_1 > 0$, $\|\overline{\Psi}_2\|_{\mathcal{W}_2} \leq \gamma_1 \|\Psi\|_{\mathcal{W}_c}$, where $\|\Psi\|_{\mathcal{W}_c} = \mathbb{E}[\int_{\Omega_c} \Psi^2 + |\nabla \Psi|^2 dx]$. Further, the definition of C (Eq. (13)) gives $C(\Psi, \overline{\Psi}_2) \geq \min(\kappa_0^2, \kappa_1^2) \|\Psi\|_{\mathcal{W}_c}^2$, which yields the desired *inf-sup* condition, with a positive constant γ :

$$\sup_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}, \|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}} \neq 0} \frac{\hat{C}(\Psi, \mathbf{v})}{\|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}}} \geq \gamma \|\Psi\|_{\mathcal{W}_c}, \quad (21)$$

□

Remark 3.4. *At the beginning of this section, we introduced a condition of compatibility between the deterministic and stochastic models $\underline{K} = E[\mathbf{K}^{-1}]^{-1}$ (in 1D). However, this condition is not necessary for the mixed problem (10) to be well-posed. It is only necessary for the results to be meaningful, in the sense that the two models represent the same physical behavior at different scales. More precisely, in the classical Arlequin formulation, the weight functions α_1 and α_2 are requested to be a partition of unity over the coupling domain, while this is not the case anymore here. What is required is that the homogenization, at any point x in the coupling zone, of $\alpha_1 \underline{K} + \alpha_2 \mathbf{K}$ be \underline{K} . In 1D in particular, this means $\underline{K}^{-1} = E[(\alpha_1(x)\underline{K} + \alpha_2(x)\mathbf{K}(x))^{-1}]$. More*

details on this and the convergence of the solution of the Arlequin problem to the solutions of the deterministic and stochastic mono-models will be given in a forthcoming paper.

3.3. Resolution of the deterministic-stochastic coupled system

In the previous section we presented the mixed problem (10) and proved that it admits a unique solution. Here, we describe two concurrent methods to compute this solution: one based on a finite element discretization of both space and random dimensions over an appropriate tensor functional basis, and one based on a classical finite element discretization for space, while the random dimension is treated through a Monte-Carlo approach. As the discretization in space is treated in the same manner for both approaches, we begin with this.

3.4. Finite Element discretization in space

We therefore associate to the domain Ω_1 a mesh \mathcal{T}_1 , composed of elements E_1 , to the domain Ω_2 a mesh \mathcal{T}_2 , composed of elements E_2 , and to the domain Ω_c a mesh \mathcal{T}_c , composed of elements E_c . We look for approximate functions of the elements of \mathcal{V}_1 , \mathcal{V}_2 and \mathcal{V}_c in the functional spaces

$$\mathcal{V}_1^H = \{v \in P_1(E_1), v|_{\Gamma_D} = 0\}, \quad (22)$$

$$\mathcal{V}_2^H = \{v \in P_1(E_2)\}, \quad (23)$$

and

$$\mathcal{V}_c^H = \{v \in P_1(E_c)\}, \quad (24)$$

composed of linear functions on each of the elements of the meshes. We then choose the bases $\{\mathbf{v}_\ell^1(\mathbf{x})\}_{1 \leq \ell \leq m_1}$, $\{\mathbf{v}_\ell^2(\mathbf{x})\}_{1 \leq \ell \leq m_2}$, and $\{\mathbf{v}_\ell^c(\mathbf{x})\}_{1 \leq \ell \leq m_c}$ for the functions in \mathcal{V}_1^H , \mathcal{V}_2^H , and \mathcal{V}_c^H , respectively. We then introduce the matrices \mathbf{A}_1 , \mathbf{A}_2 , \mathbf{C}_1 , and \mathbf{C}_2 , with elements

$$\mathbf{A}_{1,ij} = \int_{\Omega_1} \alpha_1 \underline{\mathbf{K}} \nabla \mathbf{v}_i^1 \cdot \nabla \mathbf{v}_j^1 \, dx, \quad (25)$$

$$\mathbf{A}_{2,ij} = \int_{\Omega_2} \alpha_2 \mathbf{K} \nabla \mathbf{v}_i^2 \cdot \nabla \mathbf{v}_j^2 \, dx, \quad (26)$$

$$\mathbf{C}_{1,ij} = \int_{\Omega_c} (\kappa_0 \mathbf{v}_i^1 \mathbf{v}_j^c + \kappa_1 \nabla \mathbf{v}_i^1 \cdot \nabla \mathbf{v}_j^c) \, dx, \quad (27)$$

$$C_{2,ij} = \int_{\Omega_c} (\kappa_0 v_i^2 v_j^c + \kappa_1 \nabla v_i^2 \cdot \nabla v_j^c) dx, \quad (28)$$

and the vectors S_1 , S_2 , and S_c , with elements

$$S_{1,i} = \int_{\Omega_c} v_i^1 dx, \quad (29)$$

$$S_{2,i} = \int_{\Omega_c} v_i^2 dx, \quad (30)$$

$$S_{c,i} = \int_{\Omega_c} v_i^c dx. \quad (31)$$

The mixed system (10) can now be written, after space discretization only:

$$\mathbf{E} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & 0 & \mathbf{C}_1 & \kappa_0 \mathbf{S}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_2 & -\mathbf{C}_2 & -\kappa_0 \mathbf{S}_2 & 0 \\ \mathbf{C}_1^T & -\mathbf{C}_2^T & 0 & 0 & \mathbf{S}_c^T \\ \kappa_0 \mathbf{S}_1^T & -\kappa_0 \mathbf{S}_2^T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{S}_c & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \\ \Psi \\ \boldsymbol{\theta} \\ \Lambda \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (32)$$

where the coordinates of the vectors \mathbf{F}_1 and \mathbf{F}_2 are given by $F_{1,i} = \ell_1(v_i^1)$ and $F_{2,i} = \mathcal{L}_2(v_i^2)$ and \mathbf{U}_1 , \mathbf{U}_2 and Ψ are the vectors of coordinates of u_1 , \mathbf{u}_2 , and the deterministic part of Φ , in the bases of \mathcal{V}_1^H , \mathcal{V}_2^H , and \mathcal{V}_c^H , respectively. The vector Λ contains the lagrange multipliers used to enforce the condition in the definition of \mathcal{W}_c (15). We emphasize here that only \mathbf{A}_2 , \mathbf{U}_2 and $\boldsymbol{\theta}$ are random.

3.4.1. Spectral-like approaches

We now discretize the random dimension using some spectral form, such as a polynomial chaos expansion [10]. In particular, we choose an approximating space as the span of the polynomial chaos basis of order n and degree p , $\{\hat{\Gamma}_\ell[\boldsymbol{\xi}]\}_{1 \leq \ell \leq N}$, in conjunction with the previous bases for the space dimension. N is the number of elements in the polynomial chaos basis, which depends both on n and p , $\boldsymbol{\xi}$ is a vector of independent random variables not necessarily gaussian (see [20]), and the $\hat{\Gamma}_\ell$ are the corresponding orthogonal polynomials [20]. We expand the parameter field \mathbf{K} , the solution \mathbf{u}_2 and $\boldsymbol{\theta}$ in these bases, and finally obtain the matrix \mathbf{A}_2 for the stochastic part of the mixed system

$$\mathbb{A}_{j\ell, JL} = \sum_{i=1}^N c_{ijJ} \int_{\Omega_2} \alpha_2(x) k_i(x) \nabla v_\ell^2(x) \cdot \nabla v_L^2(x) dx, \quad (33)$$

where $c_{ijJ} = \mathbb{E}[\hat{\Gamma}_i[\boldsymbol{\xi}]\hat{\Gamma}_j[\boldsymbol{\xi}]\hat{\Gamma}_J[\boldsymbol{\xi}]]$, $k_i(x) = \mathbb{E}[\mathbf{K}(x)\hat{\Gamma}_i(\boldsymbol{\xi})]$, as well as the vectors of coordinates \mathbf{U}_2 and θ of \mathbf{U}_2 and $\boldsymbol{\theta}$, respectively. Note that the double indices (j, ℓ) and (J, L) each correspond to only one index in the matrix form of the system. The mixed system (10) can now be written:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & 0 & \mathbf{C}_1 & \kappa_0 \mathbf{S}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_2 & -\mathbf{C}_2 & -\kappa_0 \mathbf{S}_2 & 0 \\ \mathbf{C}_1^T & -\mathbf{C}_2^T & 0 & 0 & \mathbf{S}_c^T \\ \kappa_0 \mathbf{S}_1^T & -\kappa_0 \mathbf{S}_2^T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{S}_c & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \\ \Psi \\ \theta \\ \Lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (34)$$

Although the form of this matrix system is very similar to that of Eq. (32), the size of the latter is much smaller than the former because \mathbf{A}_2 is a $Nm_2 \times Nm_2$ matrix while \mathbf{A}_1 is a $m_2 \times m_2$ matrix, with N often very large. Note also that, for notational simplicity, we have used the same name \mathbf{F}_2 for two different quantities in the two systems. The detail of these quantities is irrelevant here.

3.4.2. Monte-Carlo approach

We now turn to a discretization of the random dimension based on the Monte-Carlo approach. The general idea is to note that only \mathbf{A}_2 , \mathbf{U}_2 , and $\boldsymbol{\theta}$ are random in equation (32), and to perform a static condensation of the large matrix with respect to the two latter quantities.

As the part of the stiffness matrix that should be condensed is not necessarily positive definite, we introduce an additional set of degrees of freedom $\boldsymbol{\beta}$ to control the rigid-body modes of the coupling area (see more details in the literature of domain partitioning, for example [21]). We therefore introduce

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{S}_1 \\ -\mathbf{C}_2^T & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (35)$$

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{C}_1 & 0 \\ \mathbf{C}_1^T & 0 & \mathbf{S}_c^T \\ 0 & \mathbf{S}_c & 0 \end{bmatrix}^{-1}, \quad (36)$$

where the inverse matrix should be understood in the pseudo-inverse sense,

$$\mathbf{K}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_2 & -\mathbf{S}_2 \\ -\mathbf{S}_2^T & 0 \end{bmatrix} - \mathbf{B}^T \mathbf{A}^* \mathbf{B}, \quad (37)$$

$$\mathbf{F}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_2 \\ 0 \end{bmatrix} - \mathbf{B}^T \mathbf{A}^* \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (38)$$

and a matrix \mathbf{R} of vectors spanning the null space of \mathbf{A}^* (a vector in acoustics and a matrix in elasticity).

The condensation of system (32) then leads to:

$$\mathbb{E} \left[\begin{bmatrix} \mathbf{K}^* & \mathbf{B}^T \mathbf{R} \\ \mathbf{R}^T \mathbf{B} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_2 \\ \boldsymbol{\theta} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} \right] = \begin{bmatrix} \mathbf{F}^* \\ \mathbf{R}^T \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}. \quad (39)$$

The system (39) can then be solved by the Monte Carlo method. Realizations of \mathbf{A}_2 are drawn following the appropriate probability law, and statistics of the solution vector $[\mathbf{U}^T \boldsymbol{\theta}]^T$ can then be evaluated from the corresponding realizations. The vector of solutions $[\mathbf{U}_1^T \Psi \Lambda]^T$ is finally retrieved by expansion back to the original system (32).

Remark 3.5. *This approach is the one that will be used for the applications proposed in the next section. However, that should not be seen as a statement by the authors that the Monte-Carlo resolution is more efficient than the spectral approach. Indeed the matrix system to be solved by Monte Carlo is much smaller, but the matrices are non-sparse. Nevertheless, the implementation of the Monte-Carlo approach is much simpler than the other one, and was chosen here mainly for that reason. Also it should be noted that the rates of convergence of both the Monte Carlo and the spectral approaches are different and dependent and the quantity of interest. Grossly, the Monte Carlo is expected to provide an accurate estimate of the first few moments of a quantity of interest for a reasonable cost, while the spectral solution should be preferred for the estimation of higher moments;*

4. Examples of application

Two examples are proposed in this section to illustrate the interest of the coupling strategy, in terms of efficiency in particular. For the first one in a mono-dimensional case, we describe the three different possible modeling approaches: deterministic mono-model, stochastic mono-model, and deterministic-stochastic coupled model, and compare the results obtained. For a bi-dimensional case, we assume that the stochastic mono-model is not available, and only the results of the Arlequin method are presented.

4.1. 1D Bar in traction

The first application we describe here is a very simple one that allows a full investigation of the behavior of the method. We consider a simple bar of unit length in traction under imposed displacements, with an unit bulk load. All lengths and stresses are normalized for simplicity.

4.1.1. Deterministic mono-model

The deterministic mono-model of this bar is controlled by a deterministic stiffness $\underline{K} = 1$. The displacement field \underline{u} verifies, almost everywhere:

$$\frac{d}{dx} \left(\underline{K} \frac{d\underline{u}}{dx} \right) + 1 = 0, \quad (40)$$

with the boundary conditions $\underline{u}(0) = 0$ and $\underline{u}(1) = 1$. The analytical solution for the deterministic mono-model is $\underline{u} = x(3-x)/2$ and $d\underline{u}/dx = 3/2 - x$.

4.1.2. Stochastic mono-model

The stochastic mono-model is controlled by the stochastic field $\mathbf{K}(x)$, which we choose to model as a uniform field with bounds $\ln 2$ and $2 \ln 2$ (arithmetic mean $E[\mathbf{K}] = 3 \ln 2/2 \approx 1.04$, geometric mean $1/E[1/\mathbf{K}] = 1$, standard deviation $\sigma_{\mathbf{K}} = \ln 2/2\sqrt{3} \approx 0.20$), and exponential correlation with correlation length $L_c = 10^{-2}$. This field obviously verifies conditions (3).

Remark 4.1. *A uniform random variable with bounds $0 < \alpha < \beta$ has arithmetic mean $(\beta + \alpha)/2$, geometric mean $\ln(\beta/\alpha)/(\beta - \alpha)$, and standard deviation $(\beta - \alpha)/2\sqrt{3}$.*

The stochastic displacement field verifies, almost surely and almost everywhere:

$$\frac{d}{dx} \left(\mathbf{K} \frac{d\mathbf{u}}{dx} \right) + 1 = 0, \quad (41)$$

with the boundary conditions $\mathbf{u}(0) = 0$ and $\mathbf{u}(1) = 1$, almost surely. The solution for the stochastic mono-model is

$$\mathbf{u}(x) = \int_0^x \frac{\mathbf{K}^* - x'}{\mathbf{K}(x')} dx', \quad (42)$$

where \mathbf{K}^* verifies $1 = \int_0^1 \frac{\mathbf{K}^* - x'}{\mathbf{K}(x')} dx'$ almost surely, and

$$\frac{d\mathbf{u}}{dx} = \frac{\mathbf{K}^* - x}{\mathbf{K}(x)}. \quad (43)$$

With the parameters above, and assuming that $\mathbf{K}^* \approx 1/\mathbb{E}[1/\mathbf{K}] = 1$, almost surely, (because the correlation length is much smaller than the total length of the rod, and with some ergodicity assumptions), one gets $\mathbb{E}[\mathbf{u}] = x(3-x)/2$ and $\mathbb{E}[d\mathbf{u}/dx] = 3/2 - x$. The standard deviations $\sigma_{\mathbf{u}}$ and $\sigma_{d\mathbf{u}/dx}$ and other statistical quantities can also be evaluated numerically (using Monte Carlo sampling for example).

In figure 4, we plot the displacements \underline{u} for the deterministic mono-model, as well as the mean $\mathbb{E}[\mathbf{u}]$ and the 90%-confidence interval for \mathbf{u} , for the stochastic mono-model, evaluated using 10000 Monte Carlo trials. In both cases, \underline{u} and $\mathbb{E}[\mathbf{u}]$ are perfectly overlapping. This is due to the fact that homogenization is indeed taking place and that $\mathbb{E}[1/\mathbf{K}(x)] \approx 1/\underline{K}$, almost everywhere.

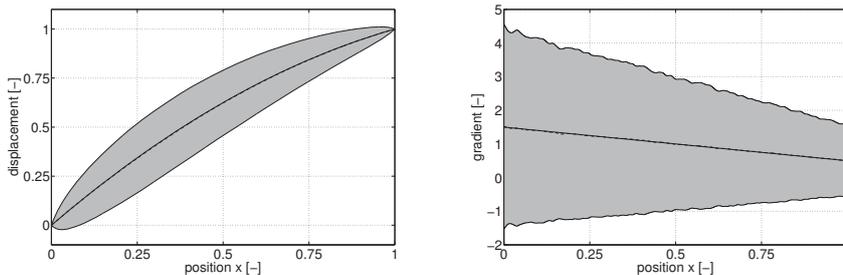


Figure 4: Value of the displacement (left figure) and gradient (right figure) for the deterministic mono-model \underline{u} (solid line), the mean of the stochastic mono-model $\mathbb{E}[\mathbf{u}]$ (dashed line, overlapping the solid line) and the 90%-confidence interval for the stochastic mono-model (grey patch).

4.1.3. Deterministic-stochastic coupled approach

We now move on to the Arlequin coupling model, for which we choose a domain $\Omega_1 = [0, 1]$, a domain $\Omega_2 = [0.3, 0.7]$, and a coupled zone $\Omega_c = [0.3, 0.5] \cup [0.6, 0.7]$. The domain Ω_1 is discretized using 10 elements of constant length 0.1. The domain Ω_2 is discretized using 4000 elements of constant length 10^{-4} . The meshes are therefore embedded and no mesh interpolation is required. In the Arlequin formulation, the mediator space \mathcal{W}_c defined by Eq. (15) is chosen here with $\mathcal{V}_c = \mathcal{V}_2$. The coupled zone is therefore discretized following the same mesh as that of domain Ω_2 . The Monte-Carlo approach was followed, as described in section 3.4.2, and 10000 samples were used. In this 1D case, the results are obtained almost instantaneously. The

results for u_1 (on domain Ω_1) and \mathbf{u}_2 (on domain Ω_2 , in terms of the mean and 90%-confidence interval) are plotted in figure 5, and compared to the results obtained with the stochastic mono-model in figure 6.

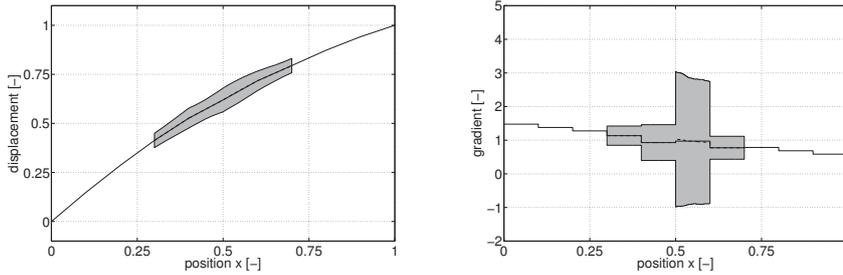


Figure 5: Displacement (left) and gradient of the displacement (right) for the solution of the Arlequin problem in terms of u_1 (solid line), $E[\mathbf{u}_2]$ (dashed line, overlapping the solid line over Ω_2), and 90%-confidence interval for \mathbf{u}_2 (grey patch).

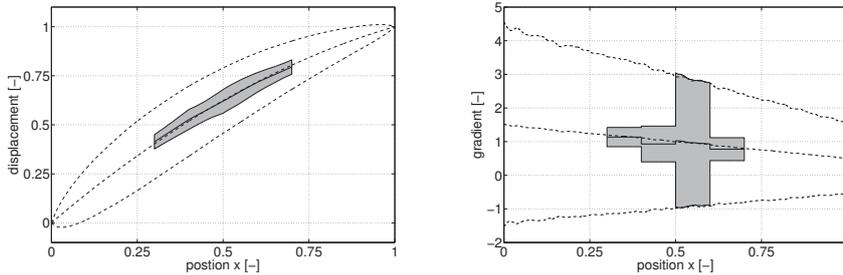


Figure 6: Comparison, in terms of displacement (left) and gradient of the displacement (right), of the Arlequin solution \mathbf{u}_2 (solid line for the mean and grey patch for the 90%-confidence interval) and the solution of the stochastic mono-model \mathbf{u}_s (dashed lines for the mean and the 90%-confidence interval).

It can be observed that the averages of both the displacement and the gradient, as well as the confidence interval for the gradient compare well on the part where the second model expresses itself (that is $\Omega_2 \setminus \Omega_c = [0.5, 0.6]$). However this is not the case for confidence interval of the displacement. To analyze this, we plot in figure 7 the correlation between the value of the displacement \mathbf{u} at the position $x = 0.55$ (which is a random variable) with the values of \mathbf{K} at all positions (which is a random field). For this 1D case,

the gradient at $x = 0.55$ is here a very local quantity (in the sense that it is not influenced by the variability of $\mathbf{K}(x)$ at distant positions), while the displacement in $x = 0.55$ is not.

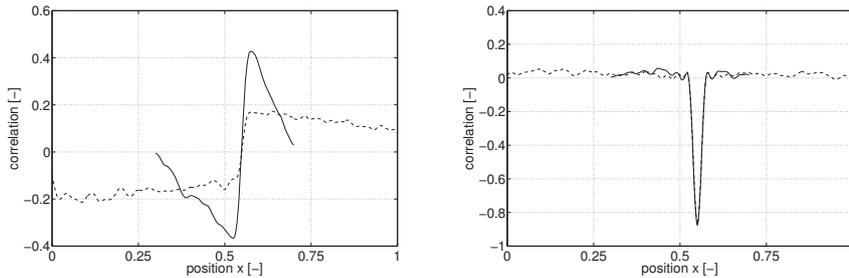


Figure 7: Value of the correlation between the random field $\mathbf{K}(x)$ at all points and the displacement in position $x = 0.55$ (left figure) and the gradient in position $x = 0.55$ (right figure), for the stochastic mono-model (dashed line) and the Arlequin model (solid line).

In the same figure 7, we plot the same two correlations but evaluated based on the Monte-Carlo samples used in the Arlequin model, therefore only available over Ω_2 . Except the faster decrease of the correlation for the displacement, which is due to the influence of the shape function α_2 in factor of \mathbf{K} in the integrals of the weak formulation (see equation (12)), they are perfectly well represented. This seems to indicate that it is possible, only based on the Arlequin solution, to evaluate the quality of the estimation of the confidence interval for a given quantity of interest by considering the localization of the correlation of that quantity of interest with the stochastic data (here \mathbf{K}). More specifically, and before further studies, it could be said that the support of the correlation should be included in the non-coupled zone of the model (that is $\Omega_2 \setminus \Omega_c = [0.5, 0.6]$). Further research is however needed to refine this idea. It will be discussed in a forthcoming paper.

4.2. 2D sample in traction

We now consider a 2D sample Ω inscribed in the box $[-3, 3] \times [-1, 1]$ (see figure 8). The sample is submitted to an imposed displacement, with no bulk load. The boundary conditions are $\mathbf{u}(x = -3, y) = 0$, $\mathbf{u}(x = 3, y) = 1$, and $\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ for the other edges, almost surely.

The Arlequin model is used to approximate the solution of the previous problem by coupling a deterministic model described by a stiffness $\underline{K} = 1$

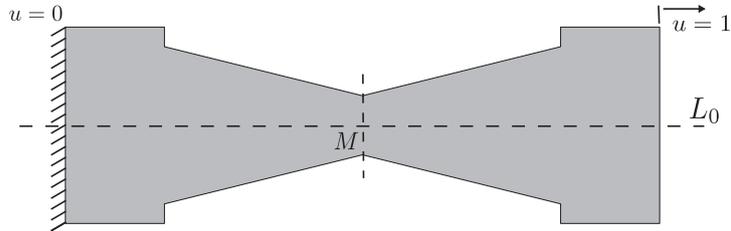


Figure 8: Geometry of the 2D sample

with a stochastic one described by a stochastic stiffness $\mathbf{K}(x)$, modeled as an uniform field with bounds 0.3194 and 2.3027, and exponential correlation with correlation length $L_c = 0.2$ in each direction. We choose the domain Ω_1 to cover the entire sample, while the domain Ω_2 is given by $\Omega_2 = \Omega \cap \{(x, y) | x \in [-1.2, 1.2]\}$, and a coupled zone $\Omega_c = \Omega \cap \{(x, y) | x \in [-1.2, -0.6] \cup [0.6, 1.2]\}$. The domain Ω_1 , described by a deterministic model, is discretized using 292 elements. The domain Ω_2 is discretized using a finer mesh composed of 6272 elements. The meshes are embedded and no mesh interpolation is required. As in the previous case, the space support of the mediator space \mathcal{W}_c , defined by Eq. (15) is chosen to overlap the space support \mathcal{V}_2 . The coupled zone is therefore discretized following the same mesh as that of domain Ω_2 . The Monte-Carlo approach was followed, as described in section 3.4.2, and 10000 samples were used. Note that, even on this simple example, it is not possible to solve the full fine scale problem, because the correlation length of the stochastic field is very small and must be larger than the size of the elements in order that the stochastic realizations be well sampled. However, by reducing the zone in which randomness is considered, the stochastic-deterministic Arlequin coupling method allows to overcome the size limitation.

The displacement and the gradient are investigated along a line L_0 (defined by $\{(x, y) | y = 0\}$, see figure 8). The results for u_1 (on domain Ω_1) and \mathbf{u}_2 (on domain Ω_2 , in terms of the mean and 90%-confidence interval) are plotted in figure 9.

As in the previous example, we plot in figure 10 the correlation between the value of the displacement \mathbf{u} at the position defined by the point M of coordinates $(x = 0, y = 0)$ (which is a random variable) with the values of

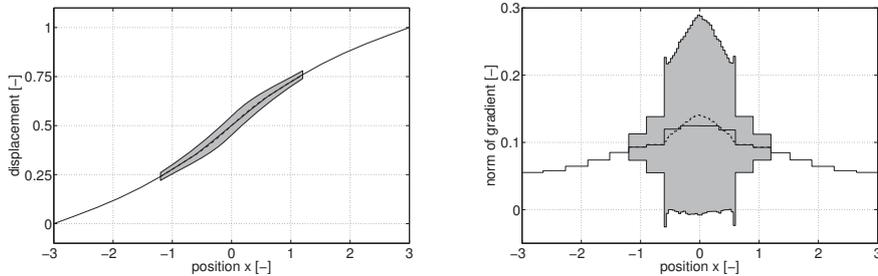


Figure 9: Displacement (left) and gradient of the displacement (right) for the solution of the Arlequin problem in terms of u_1 (solid line), $E[\mathbf{u}_2]$ (dashed line, overlapping the solid line), and 90%-confidence interval on \mathbf{u}_2 (grey patch).

$\mathbf{K}(x)$ everywhere on the domain (which is a random field). As previously,

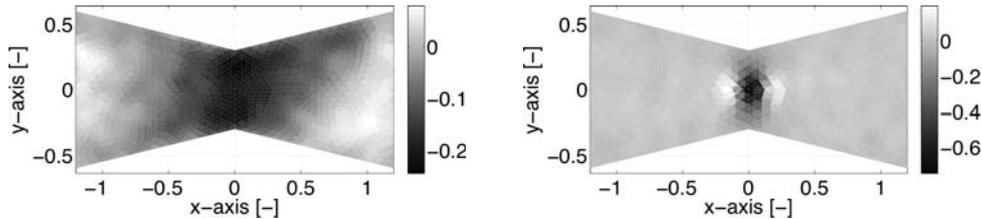


Figure 10: Value of the correlation between the random field $\mathbf{K}(x)$ in all elements and the displacement (left figure) and gradient (right figure) at position $M = (x = 0, y = 0)$ for the Arlequin model.

we observe that the correlation for the gradient is much more local than that for the displacement. Here, the solution for the stochastic mono-model is not available, so that more precise conclusions cannot be drawn, but we expect the same as before to hold true: the gradient evaluated by the Arlequin method is a good approximation to the gradient evaluated using the mono-model solution, while this is not the case for the displacement. It is expected that the support of the correlation should be included in the free zone of the model (that is $\Omega_2 \setminus \Omega_c$). Further research is however needed in that direction.

5. Conclusions

In this paper, we have presented a method that allows to couple two models, one stochastic and one deterministic. The presentation, and in particular

the choice of the mediator space, was mainly concentrated on the random dimension. The "space" part of the coupling was chosen in a very similar way as in deterministic-deterministic coupling cases considered previously in the Arlequin framework. Hence, it is expected that the pattern followed in this paper can be extended quite straightforwardly to other type of coupling, and in particular to those for which the two models are different (here both models were continuum models).

The formulation that is proposed is both elegant, in the sense that the complexity is localized only where needed, and computationally reasonable, as this decreasing complexity goes along with a lower numerical cost. Both the existence and uniqueness of the solution of the mixed problem and numerical considerations for the computation of approximations of that solution have been considered. Finally, a first attempt to quantify the appropriateness of the approach for the evaluation of local quantities of interest has been discussed. This will be completed in a future work by a more general approach for adaptive simulation within the stochastic-deterministic Arlequin framework.

6. Acknowledgements

This work was partially supported by the ANR project TYCHE (Advanced methods using stochastic modeling in high dimension for uncertainty modeling, quantification and propagation in computational mechanics of solids and fluids), with project number ANR-2010-BLAN-0904, and by grants from DIGITEO and Région Ile-de-France, with project number 2009-26D.

References

- [1] R. G. Ghanem, R. Kruger, Numerical solution of spectral stochastic finite element systems, *Comp. Meths. Appl. Mech. Engr.* 129 (1996) 289–303.
- [2] M. F. Pellissetti, R. G. Ghanem, Iterative solution of systems of linear equations arising in the context of stochastic finite elements, *Adv. Engng. Sftw.* 31 (2000) 607–616.
- [3] A. Doostan, R. G. Ghanem, J. Red-Horse, Stochastic model reduction for chaos representation, *Comp. Meths. Appl. Mech. Engr.* 196 (2007) 3951–3966.

- [4] A. Sarkar, N. Benabbou, R. G. Ghanem, Domain decomposition of stochastic PDEs: theoretical formulations, *Int. J. Numer. Meths. Engr.* 77 (2009) 689–701.
- [5] R. Cottereau, H. Ben Dhia, D. Clouteau, Localized modeling of uncertainty in the Arlequin framework, in: R. Langley, A. Belyaev (Eds.), *Vibration Analysis of Structures with Uncertainties*, IUTAM Bookseries, Springer, 2010, pp. 477–488.
- [6] E. Savin, D. Clouteau, Elastic wave propagation in a 3-D unbounded random heterogeneous medium coupled with a bounded medium. Application to seismic soil-structure interaction (SSSI), *Int. J. Numer. Meths. Engr.* 54 (2002) 607–630.
- [7] L. Chamoin, J. T. Oden, S. Prudhomme, A stochastic coupling method for atomic-to-continuum Monte-Carlo simulations, *Comp. Meths. Appl. Mech. Engr.* 197 (2008) 3530–3546.
- [8] A. Ern, J.-L. Guermond, Theory and practice of finite elements, volume 159 of *Applied Mathematical Sciences*, Springer, 2004.
- [9] I. Babuška, R. Tempone, G. E. Zouraris, Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic partial differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.* 42 (2004) 800–825.
- [10] R. G. Ghanem, P. D. Spanos, *Stochastic finite elements: a spectral approach*, Springer-Verlag, 1991.
- [11] G. Stefanou, The stochastic finite element method: past, present and future, *Comp. Meths. Appl. Mech. Engr.* 198 (2009) 1031–1051.
- [12] C. P. Robert, G. Casella, *Monte Carlo statistical methods*, Springer, 2004.
- [13] H. Ben Dhia, G. Rateau, The Arlequin method as a flexible engineering design tool, *Int. J. Numer. Meths. Engr.* 62 (2005) 1442–1462.
- [14] H. Ben Dhia, Multiscale mechanical problems: the Arlequin method, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series IIB* 326 (1998) 899–904.

- [15] H. Ben Dhia, G. Rateau, Mathematical analysis of the mixed Arlequin method, *Comptes Rendus Acad. Sci. - Series I - Math.* 332 (2001) 649–654.
- [16] H. Ben Dhia, Further insights by theoretical investigations of the multi-scale Arlequin method, *Int. J. Multiscale Comp. Engr.* 6 (2008) 215–232.
- [17] S. P. Xiao, T. Belytschko, A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics, *Comp. Meths. Appl. Mech. Engr.* 193 (2004) 1645–1669.
- [18] G. W. Milton, *The theory of composites*, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mechanics, Cambridge University Press, 2002.
- [19] F. Brezzi, On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers, *Revue Française d’automatique, informatique, recherche opérationnelle. Analyse numérique* 8 (1974) 129–151.
- [20] C. Soize, R. G. Ghanem, Physical systems with random uncertainties: chaos representations with arbitrary probability measures, *SIAM J. Sci. Comp.* 26 (2004) 395–410.
- [21] C. Farhat, F.-X. Roux, A method of finite element tearing and inter-connecting and its parallel solution algorithm, *Int. J. Numer. Meths. Engr.* 32 (1991) 1205–1227.

Papier de référence : IJNME 2012

Cette annexe est constituée de l'article [Zaccardi *et al.*, 2012] soumis pour publication dans la revue *International Journal for Numerical Methods in Engineering*.

Error estimation and model adaptation for a stochastic-deterministic coupling in the Arlequin framework

C. Zaccardi^{1,2}, L. Chamoin^{2*}, R. Cottereau¹, H. Ben Dhia¹

¹ MSSMat UMR 8579, École Centrale Paris/CNRS, Grande Voie des Vignes, 92295 Châtenay-Malabry Cedex, France

² LMT-Cachan, ENS Cachan/CNRS/Paris 6 University, 61 avenue du Président Wilson, 94235 Cachan Cedex, France

SUMMARY

The paper deals with the issue of accuracy for multiscale methods applied to solve stochastic problems. It more precisely focuses on the control of a coupling, performed using the Arlequin framework, between a deterministic continuum model and a stochastic continuum one. Using residual-types estimates and adjoint-based techniques, a strategy for goal-oriented error estimation is presented for this coupling and contributions of various error sources (modeling, space discretization, and discretization along the random dimension) are assessed. Furthermore, an adaptive strategy is proposed to enhance the quality of outputs of interest obtained by the coupled stochastic-deterministic model. Performances of the approach are given on 1D and 2D numerical experiments. Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

Received ...

KEY WORDS: Multiscale methods, Stochastic Mechanics, Arlequin method, Goal-oriented error estimation, *a posteriori* error estimation

1. INTRODUCTION

Numerical simulation has become an essential tool in design processes, providing for more flexibility and decreasing production costs. Recent advances in this field include the development and consideration of multiscale and stochastic models. Multiscale models, on the one hand, aim at introducing appropriate models at each of the scales considered in a general problem and complementing them with a coupling scheme. Stochastic models, on the other hand, aim at explicitly taking into account data uncertainties and modeling variabilities, which traditionally limit the predictability of deterministic numerical models. Such stochastic multiscale models, and the control of their accuracy, are the object of the present paper.

We assume that there exists, for the study of a structure, a hierarchy of models defined at different scales. While coarse models might yield effective results for the average response of the structure under distributed loading, these models may become ineffective when a localized defect exists (crack, hole, local weakness), or when one is interested in local quantities. Finer-scale models are then required, but usually involve higher numerical costs, which renders their use unrealistic for industrial structures. The general idea of multiscale models is then to get around this dilemma by considering a coarse model wherever possible, while refining it locally around the zone of interest. Various multiscale strategies have been developed: (i) enrichment methods [1, 2] in the Finite Element Method (FEM) framework, in which appropriate fine-scale basis functions are used around local defects; (ii) splitting methods [3, 4, 5, 6] in which the solution field is split additively into a coarse field and a finer-scale field, each being solved at its own scale, with fictitious boundary

*Correspondence to: chamoin@lmt.ens-cachan.fr

conditions at the lower scale; and (iii) superposition methods [7, 8, 9], in which both coarse and fine-scale models coexist in the local subdomain of interest and are solved concurrently, together with an equation that ensures their equality in an appropriate weak sense. Extensions of these multiscale strategies to stochastic models have been proposed in the context of the heterogeneous multiscale method [10] and of the Arlequin method [11, 12]. The latter is a superposition method that has been applied to the coupling of various models in the past decade (see [7, 13, 14, 15, 9, 16, 17, 18, 19], among others), and on which we will concentrate in this paper [20, 12].

The purpose of stochastic multiscale models is to provide reliable results for engineering problems, with explicit account of data uncertainties and modeling variabilities, and for a relatively low numerical cost. However, to reach that goal, the numerical errors associated to their solution must be evaluated and controlled. For more than thirty years, and particularly in the context of the FEM, *a posteriori* error estimations have been proposed (see [21, 22, 23] for reviews). These techniques allow to complement a FEM solution with an estimation of its accuracy. After initial works on global error estimators, based on global energy norms of the solution, goal-oriented error estimators have been developed [24, 25, 26] in order to assess the accuracy of specific outputs of interest (for example: stress average in a given zone, or maximal displacement). While most of the studies on error estimation concern monoscale models, some specific developments have been proposed for coupled multi-scale models. In particular, in the Arlequin framework, several papers have dealt with the evaluation and control of the accuracy of coupled atomistic and continuum models assessing both discretization and modeling errors, in the deterministic case [17, 27, 28]. A preliminary work has also been presented in the context of atomistic-continuum stochastic models [11], but in a very different coupling context as what will be considered in the present paper.

The main objective of this paper is to develop a framework for goal-oriented error estimation when the Arlequin method is used to couple a deterministic model with a stochastic one, as developed in [20, 12]. To control the quality of approximate local quantities, we use residual-type estimates and classical adjoint-based techniques to get bounds on the local error. A second objective of this paper then consists in proposing a method to split the different error sources, *i.e.* modeling error, space discretization error, and stochastic discretization errors. This splitting is based on the introduction of intermediate reference models and on the construction of error estimates with respect to these new models, following [23, 29, 30]. The idea of evaluating modeling errors, and separating it from the (space) discretization errors, was already discussed [5, 31, 32, 27, 28] by comparing, in some adequate manner, the solutions obtained for the same problem evaluated at different scales. The extension to stochastic problems of such methodologies is, to the best of our knowledge, the first of its kind. This separation of sources enables to adapt the Arlequin model effectively by choosing, in a greedy manner, parameters of the numerical model that lead to the computation of the output of interest within a prescribed accuracy.

The paper is organized as follows. Section 2 introduces the reference (stochastic) model and recalls its approximation in the context of the multiscale Arlequin method. In Section 3, which deals with the first objective of this paper, the framework for goal-oriented error estimation applied to the stochastic-deterministic Arlequin coupling is introduced. In Section 4, we address the second objective of this paper. We propose a technique to split the error into different error sources by the introduction of intermediate models, and we set up the associated adaptive modeling process. Finally, numerical results are presented in Section 5, both to discuss some key numerical issues, and to present the effectivity and interest of the error estimates for adaptivity. Conclusions are drawn in Section 6.

2. REFERENCE MODEL AND APPROXIMATE ARLEQUIN FORMULATION

In this section, we describe the different models used in this paper. The reference monomodel is a continuum stochastic linear elliptic boundary value problem. This model is approximated using the Arlequin method which leads to a surrogate problem, called the coupled model, where a continuum deterministic model and a stochastic one interact.

2.1. Reference monomodel

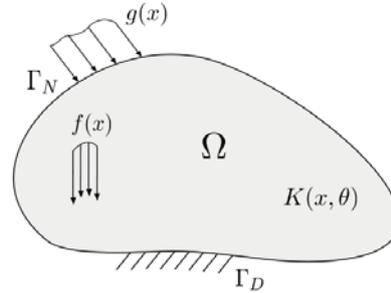


Figure 1. Reference stochastic monomodel with heterogeneous random coefficient $K(x, \theta)$.

We consider here a stochastic linear elliptic Poisson problem representing a wide range of physical fields (heat equation, membrane flexion, Darcy equation). The problem is defined over an open bounded domain Ω with boundary $\partial\Omega$ (see Fig. 1). Considering (Θ, \mathcal{F}, P) a complete probability space with Θ a set of outcomes, \mathcal{F} a σ -algebra of events, and $P : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ a probability measure, the problem reads:

$$\nabla \cdot (K(x, \theta) \nabla u(x, \theta)) + f(x) = 0, \text{ almost everywhere (a.e.) in } \Omega, \text{ and almost surely (a.s.)}, \quad (1)$$

with :

$$\begin{cases} u(x, \theta) = 0 & \text{a.e. on } \Gamma_D \text{ and a.s.}, \\ K(x, \theta) \nabla u \cdot \mathbf{n} = g(x) & \text{a.e. on } \Gamma_N \text{ and a.s.} \end{cases} \quad (2)$$

The behavior is driven by parameter $K(x, \theta)$ considered as a stochastic field: $K(x, \theta) \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{C}^0(\Omega))$. We assume that $K(x, \theta)$ verifies $0 < K_{min} \leq K(x, \theta) \leq K_{max} < \infty$, a.e. in Ω and a.s. [33]. Denoting $\mathcal{W} = \{v \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega)), v = 0 \text{ on } \Gamma_D, \text{ a.s.}\}$, the weak formulation of the problem (1)-(2) reads:

Find $u \in \mathcal{W}$ such that:

$$A(u, v) = L(v), \quad \forall v \in \mathcal{W}, \quad (3)$$

where the internal virtual work is given by the bilinear form $A : \mathcal{W} \times \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$ and the external virtual work is given by the linear form $L : \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$. They are defined, respectively, by:

$$A(u, v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} K(x, \theta) \nabla u(x, \theta) \cdot \nabla v(x, \theta) d\Omega \right],$$

and

$$L(v) = \int_{\Omega} f(x) \mathbb{E}[v(x, \theta)] d\Omega + \int_{\Gamma_N} g(x) \mathbb{E}[v(x, \theta)] d\Gamma,$$

where $\mathbb{E}[\bullet]$ is the mathematical expectation. It can be proved that the problem described above admits a unique solution (see for example [33]). We refer to this solution as the exact solution and denote it u_{ex} .

Let us notice that problem (3) is a continuous stochastic problem. Therefore, two classical processes of discretization have to be used: one for the spatial discretization and one along the stochastic dimension. These discretizations could induce high numerical cost, specially with regard to the stochastic dimension. To get an accurate approximation of statistical moments of u_{ex} using a Monte-Carlo approach for instance, a huge number of realizations [34] may be required, specially where critical zones have to be considered. Another method based on the polynomial chaos decomposition [35, 33] can also be followed but the size of the matrix which has to be inverted can increase dramatically. In practice, due to the problem size, surrogate problems derived from this reference model are used. In the next paragraph, we present a family of surrogate problems, in the context of the Arlequin approach.

2.2. Surrogate model using the Arlequin coupling

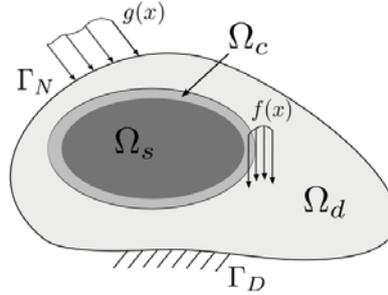


Figure 2. Arlequin description of the problem with coupling between the two models in zone Ω_c .

Here, we assume that we are interested in a local quantity of interest inside an assumed given zone $\Omega_s \subset \Omega$. In order to reproduce accurately the effect of the randomness on this quantity, we choose to keep the stochastic description in the local zone Ω_s only. The parameter K is thus kept in this area as a stochastic field denoted by $K_s(x, \theta)$ while it is changed to a deterministic parameter denoted by K_d in the remaining of the structure. The latter is derived from K by means of a stochastic homogenization [36, 37]. In the Arlequin framework, this multi-model representation is made possible by considering a deterministic model defined over $\Omega_d \equiv \Omega$ (called the substrate) on which we superpose a stochastic model defined over Ω_s (called the patch). For simplicity of notation, we consider the case where the patch Ω_s is fully embedded in Ω_d as shown by Fig. 2. The two models are coupled in a coupling zone $\Omega_c \subset \Omega_s$ (see Fig. 2) and the mechanical energy is distributed between the two models using weight functions $(\alpha_d(x), \alpha_s(x))$ (see [7, 9, 20, 12] for more details). The Arlequin problem then reads:

Find (u_d, u_s, λ) in $\mathcal{V}_d \times \mathcal{W}_s \times \mathcal{W}_c$ such that:

$$\begin{cases} a_d(u_d, v_d) + C(\lambda, v_d) &= \ell_d(v_d), & \forall v_d \in \mathcal{V}_d, \\ A_s(u_s, v_s) - C(\lambda, v_s) &= L_s(v_s), & \forall v_s \in \mathcal{W}_s, \\ C(\mu, u_d - u_s) &= 0, & \forall \mu \in \mathcal{W}_c, \end{cases} \quad (4)$$

where $\mathcal{V}_d = \{v \in \mathcal{H}^1(\Omega_d), v(x) = 0 \text{ on } \Gamma_D\}$ and $\mathcal{W}_s = \mathcal{L}^2(\Theta, \mathcal{H}^1(\Omega_s))$. The internal and external virtual works $a_d : \mathcal{V}_d \times \mathcal{V}_d \rightarrow \mathbb{R}$, $A_s : \mathcal{W}_s \times \mathcal{W}_s \rightarrow \mathbb{R}$, $\ell_d : \mathcal{V}_d \rightarrow \mathbb{R}$ and $L_s : \mathcal{W}_s \rightarrow \mathbb{R}$ are defined, respectively, by:

$$a_d(u, v) = \int_{\Omega_d} \alpha_d(x) K_d \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) d\Omega,$$

$$A_s(u, v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_s} \alpha_s(x) K_s(x, \theta) \nabla u(x, \theta) \cdot \nabla v(x, \theta) d\Omega \right],$$

and

$$\ell_d(v) = \int_{\Omega_d} \alpha_d(x) f(x) v(x) d\Omega + \int_{\Gamma_N} g(x) v(x) d\Gamma,$$

$$L_s(v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_s} \alpha_s(x) f(x) v(x, \theta) d\Omega \right].$$

The mediator space \mathcal{W}_c is built as a space of functions with a spatially varying expectation and a perfectly spatially correlated randomness: $\mathcal{W}_c = \{\psi + \theta_c \mathbb{I}_{\Omega_c} | \psi \in \mathcal{H}^1(\Omega_c), \theta_c \in \mathcal{L}^2(\Theta, \mathbb{R})\}$ with θ_c a random variable and where \mathbb{I}_{Ω_c} is the characteristic function of Ω_c , namely $\mathbb{I}_{\Omega_c} = 1$ in Ω_c and $\mathbb{I}_{\Omega_c} = 0$ elsewhere. The coupling operator $C : \mathcal{W}_c \times \mathcal{W}_c \rightarrow \mathbb{R}$ is defined as:

$$C(u, v) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega_c} (\kappa_0 uv + \kappa_1 \nabla u \cdot \nabla v) d\Omega \right],$$

where κ_0 and κ_1 are two positive parameters homogeneous to as string rigidity divided by a length and to a material rigidity, respectively (see [9] for details). The well-posedness of problem (4) can be found in [12].

The surrogate Arlequin problem provides two fields: u_d defined on \mathcal{V}_d , and u_s defined on \mathcal{W}_s . We additionally introduce the continuous field $u_{arl}^c \in \mathcal{W}$ from u_d and u_s given by:

$$u_{arl}^c = \begin{cases} u_d & \text{in } \Omega_d \setminus \Omega_s, \\ \alpha_d u_d + \alpha_s u_s & \text{in } \Omega_s. \end{cases}$$

Obviously, the solution of the Arlequin model u_{arl}^c and the exact solution u_{ex} are different, even in the patch. An error has therefore been introduced by the consideration of the Arlequin model, even before any discretization process is introduced.

3. GENERAL FRAMEWORK FOR GOAL-ORIENTED ERROR ESTIMATION

Actually, the Arlequin problem is further approximated using classical discretization processes, both along the spatial dimension and along the stochastic dimension. We denote u_d^a and u_s^a the computed approximate fields. We assume that we can construct, from (u_d^a, u_s^a) , a field $u_{arl} \in \mathcal{W}$. We then define the error $e = u_{ex} - u_{arl}$.

Let us recall here that the Arlequin model is used to estimate a local quantity of interest inside the patch Ω_s . This quantity is a function of the monomodel solution, denoted $q(u)$. We therefore seek to quantify the error $\eta = q(u_{ex}) - q(u_{arl})$ using goal-oriented techniques.

In the case of deterministic Arlequin models, first works dealing with goal-oriented error estimation were conducted for 1D tests [17]. With the introduction of an adjoint problem and tools for modeling error control defined in [32], the error on a given quantity of interest was assessed. These works were extended to 2D and 3D applications in [38, 27, 28] for adaptive modeling of polymeric materials.

3.1. Quantity of interest and adjoint problem

We seek to quantify the error on a quantity of interest $q(u) : \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$ obtained with the Arlequin method. The associated error is expressed as $\eta = q(u_{ex}) - q(u_{arl})$. The quantity of interest could be for example, the space average over a given subdomain of the mathematical expectation of u or of a given component of ∇u .

To achieve this quantification, the idea is to express the output of interest in a global form (see [24, 39, 32]):

$$q(u) = \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} f_q u \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} g_q u \, d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{p}_q \cdot \nabla u \, d\Omega \right],$$

where quantities f_q , g_q and \mathbf{p}_q are called the extractors.

We then define the so-called adjoint problem, which reads in the case of a linear quantity of interest:

Find $p \in \mathcal{W}$ such that:

$$A(v, p) = q(v), \quad \forall v \in \mathcal{W}. \quad (5)$$

In the remainder, we denote the exact solution of this problem p_{ex} . As shown below, the error η can then be estimated as a function of u_{arl} and p_{ex} .

3.2. Error estimates

Defining the residual function $\mathcal{R} : \mathcal{W} \times \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{R}$ associated to (3) by:

$$\mathcal{R}(u, v) = L(v) - A(u, v), \quad (6)$$

the use of the adjoint problem provides a tool to estimate the error η [26] and one can easily show that:

$$\eta = \mathcal{R}(u_{arl}, p_{ex}). \quad (7)$$

Indeed, using the definitions of η and p_{ex} , we have:

$$\begin{aligned} \eta &= q(u_{ex}) - q(u_{arl}) \\ &= q(u_{ex} - u_{arl}) && \text{since } q \text{ is linear} \\ &= A(u_{ex} - u_{arl}, p_{ex}) && \text{thanks to Eq. (5) with } v = u_{ex} - u_{arl} \\ &= L(p_{ex}) - A(u_{arl}, p_{ex}) && \text{since } A \text{ is bilinear and } u_{ex} \text{ verifies (3)} \end{aligned}$$

which proves (7).

In the case of a nonlinear quantity of interest, $q(u_{ex}) - q(u_{arl})$ would usually be linearized around u_{arl} by writing [40]:

$$\begin{aligned} q(u_{ex}) &= q(e + u_{arl}) = q(u_{arl}) + q'(u_{arl}, e) + o(e), \\ \Rightarrow q(u_{ex}) - q(u_{arl}) &\approx q'(u_{arl}, e) \end{aligned} \quad (8)$$

where $q'(u, v) = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{q(u+\theta v) - q(u)}{\theta}$ is the tangent operator used to define the extractor.

3.3. Approximation of the adjoint solution

In practice, as the adjoint problem is defined on the same space as the reference one, its solution is as intractable as the solution of the reference problem. It then has to be approximated by a surrogate problem. Using again the Arlequin framework, the approximate adjoint problem reads:

Find (p_d, p_s, p_λ) in $\tilde{\mathcal{V}}_d \times \tilde{\mathcal{W}}_s \times \tilde{\mathcal{W}}_c$ such that:

$$\begin{cases} a_d(w_d, p_d) + C(w_d, \lambda) = q_d(w_d), & \forall w_d \in \tilde{\mathcal{V}}_d, \\ A_s(w_s, p_s) - C(w_s, \lambda) = q_s(w_s), & \forall w_s \in \tilde{\mathcal{W}}_s, \\ C(p_d - p_s, \mu) = 0, & \forall \mu \in \tilde{\mathcal{W}}_c, \end{cases} \quad (9)$$

where $\tilde{\mathcal{V}}_d$, $\tilde{\mathcal{W}}_s$ and $\tilde{\mathcal{W}}_c$ can be different from \mathcal{V}_d , \mathcal{W}_s and \mathcal{W}_c respectively (see [27, 28] in the case of a deterministic coupling between continuum and discrete models). In the case studied here, under the continuum form, we have $\tilde{\mathcal{V}}_d \equiv \mathcal{V}_d$ and $\tilde{\mathcal{W}}_s$ may be defined over a domain $\tilde{\Omega}_s$ which is larger than Ω_s and included in Ω ($\Omega_s \subset \tilde{\Omega}_s \subset \Omega$). Moreover, in a discretized form, the spaces $\tilde{\mathcal{V}}_d$, $\tilde{\mathcal{W}}_s$ and $\tilde{\mathcal{W}}_c$ are chosen richer than \mathcal{V}_d , \mathcal{W}_s and \mathcal{W}_c , respectively. The number of finite elements used to describe the different spaces may thus be increased and the description of the stochastic dimension may be finer also (using more Monte-Carlo trials for instance).

Using the FEM and Monte-Carlo techniques for instance, an approximate solution can be computed for the coupled adjoint problem (9). We denote this solution $(p_d^a, p_s^a, p_\lambda^a)$ and additionally introduce p_{arl} similarly to u_{arl} , assuming $p_{arl} \in \mathcal{W}$. The error on q is then approximated by:

$$\eta \approx \mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl}), \quad (10)$$

Note here that, since we approximate $\mathcal{R}(u_{arl}, p_{ex})$ by $\mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl})$, the approximation of p_{arl} has to be more accurate than the approximation of u_{ex} by u_{arl} . This will be extensively discussed in the examples of Section 5.

3.4. Approximation of the residual function

To estimate the error η , we therefore need to evaluate $\mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl}) = A(u_{arl}, p_{arl}) - L(p_{arl})$. In practice, the fields u_{arl} and p_{arl} are approximated by the discrete field u_{arl}^a and p_{arl}^a given by:

$$u_{arl}^a = \begin{cases} u_d^a & \text{in } \Omega_d \setminus \Omega_s, \\ u_s^a & \text{in } \Omega_s. \end{cases} \quad (11)$$

Through simple Monte-Carlo sampling, and using realizations of p_{arl}^a generated by the solution of the adjoint Arlequin system (9), $L(p_{arl}^a)$ can be easily computed. Nevertheless, the Monte-Carlo estimation of $A(u_{arl}^a, p_{arl}^a)$ involves realizations of product $K \nabla u_{arl}^a \cdot \nabla p_{arl}^a$. Realizations of pairs (K, u_{arl}^a) on the one hand, and (K, p_{arl}^a) on the other hand, were generated in the previous sections by the solution of the Arlequin systems (4) and (9), respectively. However, realizations of K are not necessarily the same for the two systems, so that, in general, we cannot compute directly $A(u_{arl}^a, p_{arl}^a)$.

We present in the following, a manner to generate realizations of u_{arl}^a that correspond to the realizations of K being used to compute realizations of p_{arl}^a in the adjoint Arlequin system (9), while following the same first- and second-order statistics of the solution u_{arl}^a of the primal Arlequin system (4).

Actually, we generate realizations of u_s^a that correspond to the restriction of the realizations of K used for the adjoint model. The next step is then to reconstruct the field u_{arl}^a .

To simplify the presentation, we first assume that both $K(x, \theta)$ and $u_s^a(x, \theta)$ are Gaussian random fields (which is of course not true in general). An extension to more general first-order marginal distributions will be presented at the end of this section. Also, we consider random vectors Ξ , and U , that correspond to the random fields $K(x, \theta)$ and $u_s^a(x, \theta)$ after space discretization.

The objective is to generate realizations \hat{U} of U such that:

$$\begin{cases} \mathbb{E}[\hat{U}] = \mathbb{E}[U] := \underline{U}, \\ \mathbb{E}[(\hat{U} - \underline{U})(\hat{U} - \underline{U})^T] = \mathbb{E}[(U - \underline{U})(U - \underline{U})^T] := \text{Cov}_U, \\ \mathbb{E}[(\hat{U} - \underline{U})(\Xi - \underline{\Xi})^T] = \mathbb{E}[(U - \underline{U})(\Xi - \underline{\Xi})^T] := \text{Cov}_{U\Xi}, \end{cases} \quad (12)$$

where we have introduced notations \underline{U} and $\underline{\Xi}$ for the expectation of U and Ξ respectively, and covariance matrices Cov_U and $\text{Cov}_{U\Xi}$. For latter consideration, we also introduce the auto-covariance of Ξ : $\text{Cov}_\Xi = \mathbb{E}[(\Xi - \underline{\Xi})(\Xi - \underline{\Xi})^T]$ that is known because the stochastic model of K is given. All expectations and covariance matrices are estimated using realizations of the solution of the primal Arlequin problem (4).

We introduce a unitary centered Gaussian random vector Θ with uncorrelated components ($\mathbb{E}[\theta_i \theta_j] = \delta_{ij}$) and independent from Ξ , and the vector:

$$\hat{U} = \underline{U} + \text{Cov}_{U\Xi} \text{Cov}_\Xi^{-1} (\Xi - \underline{\Xi}) + \sqrt{\text{Cov}_U - \text{Cov}_{U\Xi} \text{Cov}_\Xi^{-1} \text{Cov}_{U\Xi}^T} \Theta,$$

where the square root sign for a matrix C indicates that $\sqrt{C} \sqrt{C}^T = C$. Simple algebra (remembering the independence of Θ and Ξ and $\mathbb{E}[\Theta] = 0$) indicates that this random vector indeed verifies the desired first- and second-order statistics (12) sought.

As neither $K(x, \theta)$ nor $u_s^a(x, \theta)$ are Gaussian random fields, an isoprobabilistic approach should be followed to transform the original fields into Gaussian fields. After construction of Gaussian vector \hat{U} , the inverse approach can be used to transform new realizations of U into the original first-order marginal distribution.

With the procedure described in this section, it is possible to generate realizations of u_{arl}^a that correspond to both K and p_{arl}^a . Hence, it allows us to estimate $A(u_{arl}^a, p_{arl}^a)$ through Monte-Carlo sampling, and then η using equation (10).

4. SPLITTING BETWEEN ERROR SOURCES AND MODEL ADAPTATION

The error introduced by the use of the surrogate problem can stem from several sources. In fact, if we split the different steps of construction of the approximate solution, we can distinguish (see Fig. 3):

- the use of a surrogate problem described by the Arlequin method,
- the spatial discretization of continuum models,
- the discretization along the random dimension (using the Monte-Carlo technique for example).

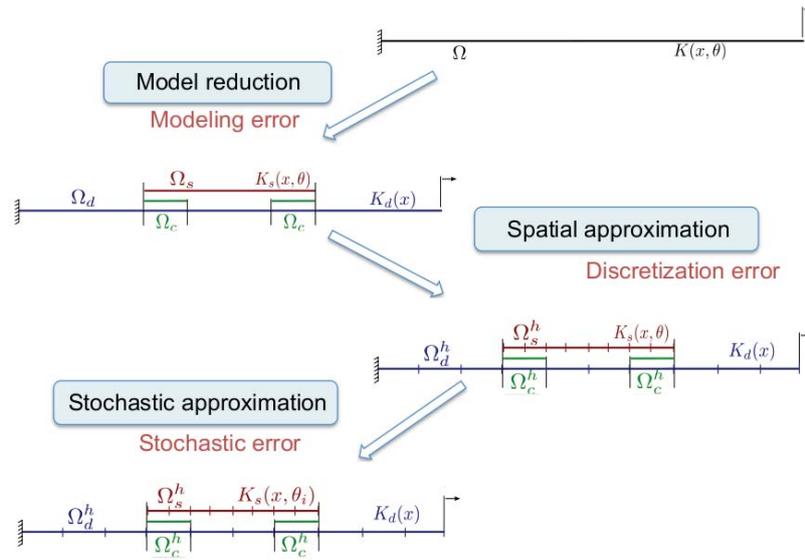


Figure 3. Approximation steps for the resolution of a 1D stochastic problem.

Each step is driven by specific parameters. The Arlequin model is described by the sizes of the patch and the coupling zone used. The spatial discretization is driven by the element size on each domain (Ω_d , Ω_s and Ω_c). Finally, if we use the Monte-Carlo technique for the discretization of random dimension, the third step is driven by the number of Monte-Carlo samples used to describe the material property. We propose here a methodology to assess the error induced by each step and separate η into corresponding error indicators.

4.1. Introduction of intermediate models and specialized error indicators

To split different error sources, we have to consider intermediate problems. In the following, the term "continuum" refers to the opposite of "discretized" (using FEM) or "approximate" (using FEM and Monte-Carlo technique). We call:

- Reference problem, the monomodel stochastic continuum problem (we denote the solution u_{ex} and the associated residual function \mathcal{R} introduced in (6)).
- First intermediate problem, the Arlequin problem, defined by (4) and Fig. 2, coupling a deterministic continuum and a stochastic continuum models. We denote the solutions (u_d, u_s, λ) , the associated monomodel solution u_{arl}^c , and the associated residual function \mathcal{R}^c . The associated residual function $\mathcal{R}^c((\cdot, \cdot, \cdot); (\cdot, \cdot, \cdot))$ is then defined for all (v_d, v_s, μ) as:

$$\mathcal{R}^c((u_d, u_s, \lambda); (v_d, v_s, \mu)) = \ell(v_d, v_s) - a((u_d, u_s, \lambda), (v_d, v_s, \mu)).$$

where $\ell(v_d, v_s) = \ell_d(v_d) + L_s(v_s)$ and $a((u_d, u_s, \lambda), (v_d, v_s, \mu)) = a_d(u_d, v_d) + A_s(u_s, v_s) + C(\lambda, v_d - v_s) + C(\mu, u_d - u_s)$.

- Second intermediate problem, the Arlequin problem coupling a deterministic discretized and a stochastic spatially discretized models. We denote the solution $(u_d^h, u_s^h, \lambda^h)$, the associated monomodel solution u_{arl}^h , and the associated residual function \mathcal{R}^h . This problem is defined from the previous one using a discretization technique along the space dimension, by means of the FEM, for instance. The associated residual function $\mathcal{R}^h((\cdot, \cdot, \cdot); (\cdot, \cdot, \cdot))$ is also defined for all (v_d^h, v_s^h, μ^h) as:

$$\mathcal{R}^h((u_d^h, u_s^h, \lambda^h); (v_d^h, v_s^h, \mu^h)) = \ell^h(v_d^h, v_s^h) - a^h((u_d^h, u_s^h, \lambda^h), (v_d^h, v_s^h, \mu^h)),$$

where ℓ^h and a^h correspond to discretized forms of ℓ and a ;

- Computable problem, the Arlequin problem coupling a deterministic and a stochastic models with discretization in space, and using Monte Carlo technique to treat the random dimension. The associated solution (u_d^a, u_s^a) with monomodel solution u_{arl} is the only one we compute in practice. We will see how this solution can be used to estimate different error sources.

We can notice that:

$$\eta = q(u_{ex}) - q(u_{arl}) = [q(u_{ex}) - q(u_{arl}^c)] + [q(u_{arl}^c) - q(u_{arl}^h)] + [q(u_{arl}^h) - q(u_{arl})]$$

The different errors on q are then defined as follows:

- the stochastic error (mainly due to the discretization along the random dimension):

$$\eta_\theta = q(u_{arl}^h) - q(u_{arl}),$$

- the discretization error (mainly due to the discretization along the spatial dimension):

$$\eta_h = q(u_{arl}^c) - q(u_{arl}^h),$$

- the modeling error induced by the use of the Arlequin method (use of a patch, and use of a deterministic material parameter instead of the stochastic one in Ω_d):

$$\eta_m = q(u_{ex}) - q(u_{arl}^c),$$

As the only data available are the solution of the primal problem (u_d^a, u_s^a) , the solution of the adjoint problem (p_d^a, p_s^a) , and the model (residual function) associated to each intermediate problem, we can derive estimates of the previous errors using (7):

$$\eta_\theta \simeq \mathcal{R}^h(u_{arl}, p_{arl}),$$

$$\eta_h = [q(u_{arl}^c) - q(u_{arl})] - [q(u_{arl}^h) - q(u_{arl})] \simeq \mathcal{R}^c(u_{arl}, p_{arl}) - \mathcal{R}^h(u_{arl}, p_{arl}),$$

$$\eta_m = [q(u_{ex}) - q(u_{arl})] - [q(u_{arl}^c) - q(u_{arl})] \simeq \mathcal{R}(u_{arl}, p_{arl}) - \mathcal{R}^c(u_{arl}, p_{arl}),$$

where (u_{arl}, p_{arl}) are appropriate projections of (u_d, u_s) and (p_d, p_s) . These quantities are only error indicators as the adjoint problem is approximated using the Arlequin solution. More precisely, for each error, we neglect terms $\mathcal{R}(u_{arl}, p_{ex} - p_{arl})$, $\mathcal{R}^c(u_{arl}, p_{ex} - p_{arl})$, and $\mathcal{R}^h(u_{arl}, p_{ex} - p_{arl})$. Let us notice that the different indicators can be estimated using only solutions u_{arl} and p_{arl} (direct post processing), avoiding additional cost.

4.2. Algorithm for model adaptation

The basic adaptation process, based on a greedy algorithm, is described in Fig. 4. The approach consists in the following steps:

1. A set of initial parameters is used to perform primal and associated adjoint problems which are both of Arlequin type.
2. The total error η associated to the quantity of interest is estimated.
3. If this error is higher than a given precision, we follow the technique described previously to split the error sources.
4. The dominating error source is identified (in modulus) and the corresponding parameter is refined.
5. We continue the process until the total error is below the required precision (in modulus), or when the parameter which has to be refined is already as fine as possible.

This choice of adaptation strategy is not unique; indeed, step 4 could be changed and we could identify two (or more) dominating errors and refine the corresponding parameters.

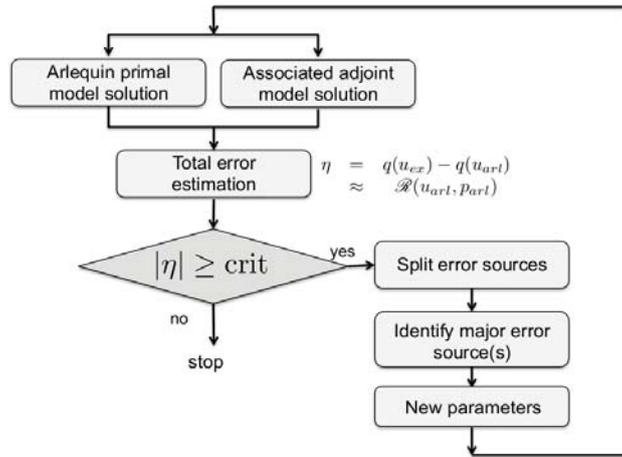


Figure 4. Greedy algorithm for the adaptation process.

5. NUMERICAL RESULTS

In this section, we present some numerical results. The first two subsections (5.1 and 5.2) discuss several numerical issues, while the two following subsections (5.3 and 5.4) are full applications (in 1D and 2D) of the contents of this paper. The first subsection (5.1) explores the convergence of the error estimate proposed with respect to several key parameters, and compares that error estimate with the real error. The second subsection (5.2) develops on the importance to solve adequately the adjoint problem, in order for the error estimate to be precise. Finally, in Sections 5.3 and 5.4, full 1D and 2D cases are treated to assess the methodology proposed in this paper, including the interest of splitting error sources to drive adaptation. All the numerical examples of this section have been computed using the software CARl (*Code Arlequin*), freely available at <https://github.com/cottureau/CARl>.

5.1. 1D model: study of the influence of various parameters

In this part we study the influence of various parameters of the Arlequin strategy in a simple 1D problem (Fig. 5). This problem consists in a bar of unit length under traction loading with prescribed Dirichlet conditions, as well as a unit bulk load. The material property is random and modeled as uniform field with bounds 0.3013 and 2.3601 (arithmetic average 1.3307, harmonic mean $1/E[1/K(x, \theta)] = 1$, and standard deviation $\sigma_K = 0.2$), and exponential correlation with correlation length $L_{cor} = 0.01$.

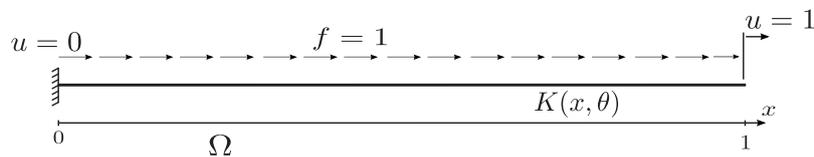


Figure 5. 1D reference problem of a cantilever beam.

It is approximated by an Arlequin model defined in Fig. 6 where (α_d, α_s) are chosen linear in the coupling zone Ω_c . The model is driven by several parameters: L_s and L_c for the definition of the patch, h_d and h_s for the size of the spatial discretization (for domains Ω_d and Ω_s respectively) and MC for the number of samples used for the Monte-Carlo description. The spatial discretization of Ω_c is driven by the same size h_s as for Ω_s .

We study here two quantities of interest:

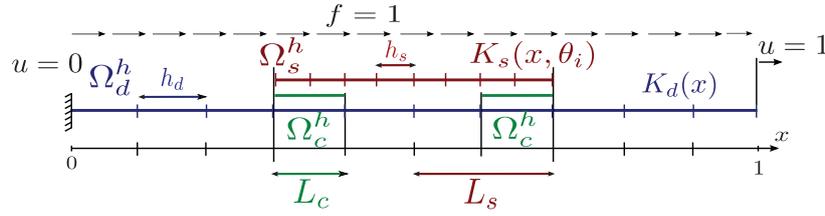


Figure 6. 1D surrogate model with the Arlequin method.

- one related to the gradient mean in a zone near the middle of the bar:

$$q_{\nabla}(u) = \frac{1}{0.05} \mathbb{E} \left[\int_{0.45}^{0.5} \frac{du(x)}{dx} dx \right].$$

The associated extractor, using integration by parts, is defined by (see Fig. 7):

$$q_{\nabla}(v) = \frac{1}{0.05} \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} \{ \delta(x - 0.5) - \delta(x - 0.45) \} v(x) d\Omega \right],$$

- one related to the variance of the gradient mean near the middle of the bar (which is nonlinear with respect to u):

$$q_v(u) = \text{Var} \left[\frac{1}{0.05} \int_{0.45}^{0.5} \frac{du(x)}{dx} dx \right].$$

Following the idea developed in (8), for the nonlinear quantity $q_v(u)$, we can write (see Fig. 8):

$$q_v(u) - q_v(u_{arl}) \approx \frac{2}{0.05^2} \mathbb{E} [\Delta e \{ \Delta(u_{arl}) - \mathbb{E}[\Delta(u_{arl})] \}]$$

where $\Delta e = e(x = 0.5) - e(x = 0.45)$ and $\Delta u_{arl} = u_{arl}(x = 0.5) - u_{arl}(x = 0.45)$. The extractor is therefore defined by:

$$q_v(v) = \frac{2}{0.05^2} \mathbb{E} \left[\int_{\Omega} (\delta(x - 0.5) - \delta(x - 0.45)) \{ \Delta u_{arl} - \mathbb{E}[\Delta u_{arl}] \} v(x) d\Omega \right].$$

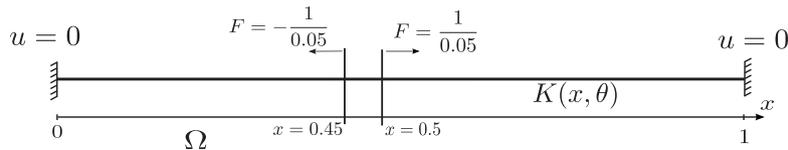


Figure 7. 1D adjoint monomodel associated to $q_{\nabla}(u)$.

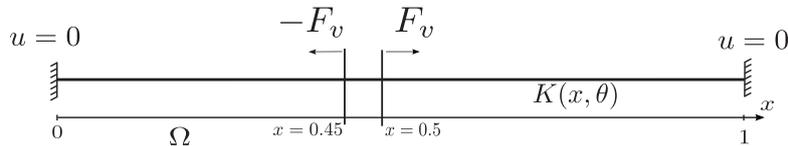


Figure 8. 1D adjoint monomodel associated to $q_v(u)$ where $F_v = \frac{2}{0.05^2} (\Delta u_{arl} - \mathbb{E}[\Delta u_{arl}])$.

In this part, we study the evolution of the relative error indicator:

$$\eta_r = \frac{\mathcal{R}(u_{arl}, p_a)}{q(u_{arl})},$$

where p_a is the approximate solution of the adjoint problem (using the FEM and Monte-Carlo techniques for instance). This error indicator will be compared for each of the two quantities of interest to the true relative error:

$$\eta_{ref} = \frac{q(u_{ref}) - q(u_{arl})}{q(u_{arl})}.$$

In next subsections, we study the evolution of the error related to $q_{\nabla}(u)$ (results in Section 5.1.1), and $q_v(u)$ (results in Section 5.1.2), with respect to two parameters: the half-size of the stochastic patch L_s and the number MC of Monte-Carlo draws used for the primal model. The set of parameters used for the reference model, the primal model and the adjoint model are defined in Tab. I and Tab. II. In these tables, when a monomodel is used, we give also the spatial discretization mesh size h .

models	type	L_s	L_c	MC	h_d	h_s	h
reference	mono	-	-	100000	-	-	0.002
primal	arlequin	0.3	0.01	[20, 100000]	0.002	0.002	-
adjoint	mono	-	-	100000	-	-	0.002

Table I. Definition of model parameters used for the study of q_{∇} and q_v with respect to MC .

models	type	L_s	L_c	MC	h_d	h_s	h
reference	mono	-	-	100000	-	-	0.002
primal	arlequin	[0.2, 0.5]	0.01	100000	0.002	0.002	-
adjoint	mono	-	-	100000	-	-	0.002

Table II. Definition of model parameters used for the study of q_{∇} and q_v with respect to L_s .

5.1.1. Example A: study of the evolution of the relative error associated to $q_{\nabla}(u)$

The adjoint problem associated to the study of $q_{\nabla}(u)$ is described in Fig. 7. Fig. 9 shows the evolution of the true relative error η_{ref} (solid line) and the error estimate η_r (dashed line and circles) with respect to: (i) the number of Monte-Carlo draws used for the primal model (left); (ii) to the half-size of the stochastic patch (right). As the adjoint model is solved with the same refinement as for the reference model, the estimate error is superposed to the true relative error. As expected, the error decreases in both cases. On Fig. 9 (right), when the half-size of the stochastic patch evolves from 0.2 to 0.5, the error decreases from almost 2% up to less than 0.4%. On Fig. 9 (left), with more than 500 Monte-Carlo draws, for a half-size of 0.3, the error is lower than 5%. Nevertheless, we can remark that when the number of Monte-Carlo draws increases, the error does not tend to zero. This comes from the fact that for the primal model is approximated using Monte-Carlo draws but also using the Arlequin method. That means that both Monte-Carlo draws and half-size of the stochastic patch ($L_s = 0.3$) contribute to the total error. Indeed, the asymptotic value of the error in the left picture corresponds to the error of 1.35% for $L_s = 0.3$ in Fig. 9 (right).

5.1.2. Example B: study of the evolution of the relative error associated to $q_v(u)$

The adjoint problem associated to the study of $q_v(u)$ is described in Fig. 8. Fig. 10 shows the evolution of the true relative error η_{ref} (solid line) and the error estimate η_r (dashed line and circles) with respect to: (i) the number of Monte-Carlo draws used for the primal model (left); (ii) the half-size of the stochastic patch (right). We remark that the true error and the estimated error decrease. Nevertheless, the error estimate is very optimistic (lower in modulus). Contrary to the cases involving q_{∇} , here, the main difference is that the adjoint problem cannot be solved perfectly as its load is defined from the primal displacement solution. Moreover, the difference between the true error and the estimate one is also due to the linearization of the quantity of interest in (8). Again,

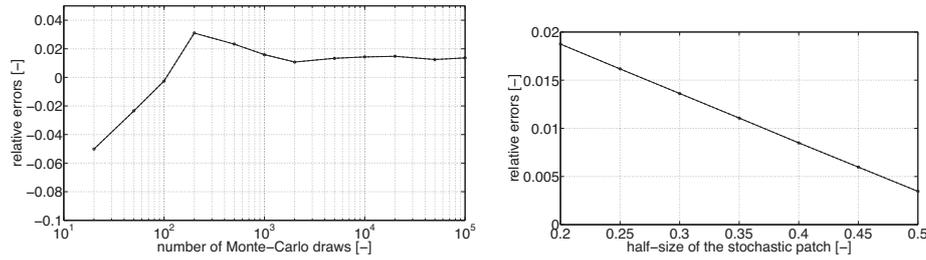


Figure 9. Evolution of η_r (dashed line and circles) and η_{ref} (solid line) with respect to the number of Monte-Carlo draws [left] and with respect to the half-size of the stochastic patch [right], for the evaluation of q_∇ with primal models defined by Tab. I and Tab. II.

a key point here is that the true error, in the picture on the left, does not tend to zero. For the same reasons as those seen previously, it is due to the fact that both Monte-Carlo draws and half-size of the stochastic patch contribute to the total error. We then propose in the next section to study the evolution of the error when we take an Arlequin model with the same half-size of the stochastic patch as the reference.

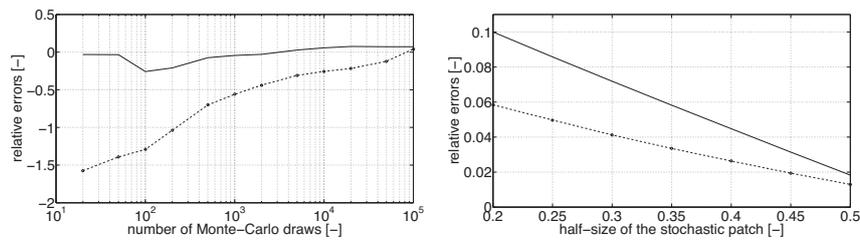


Figure 10. Evolution of η_r (dashed line and circles) and η_{ref} (solid line) with respect to the number of Monte-Carlo draws [left] and with respect to the half-size of the stochastic patch [right], for the evaluation of q_v with primal models defined by Tab. I and Tab. II.

5.1.3. Study of parameter MC when the reference model is an Arlequin model

We can remark that the parameter MC studied before drives the discretization of the stochastic dimension. If we follow the splitting description of the total process, we can observe that the stochastic approximation process occurs between two spatially discretized Arlequin models. That explains the fact that when we study the evolution of the error with respect to MC , we also evaluate the error induced by the use of the Arlequin method. To avoid that, we propose here to study the evolution of the error with respect to a reference model which is an Arlequin model with the same coupling and the same spatial mesh step as described in Tab. III.

models	type	L_s	L_c	MC	h_d	h_s	h
reference	arlequin	0.3	0.1	100000	0.002	0.002	-
primal	arlequin	0.3	0.1	[20, 100000]	0.002	0.002	-
adjoint	arlequin	0.3	0.1	100000	0.002	0.002	-

Table III. Definition of models used for the study of q_∇ or q_v with respect to MC with Arlequin model as the reference.

Fig. 11 shows the evolution of the true relative error η_{ref} (solid line) and the error estimate η_r (dashed line and circles) with respect to the number of Monte-Carlo draws used in the primal problem, for the evaluations of q_∇ (left) and q_v (right). We remark in this case that we capture efficiently the error related to the parameter MC alone. This time, the true errors actually decrease

up to zero. In fact, the last point proposed here corresponds to the Arlequin reference model used in the example. These curves correspond to a translation of the curves in Fig. 9 and Fig. 10 (left) of a value corresponding to the error when a patch of half-size $L_s = 0.3$ is used.

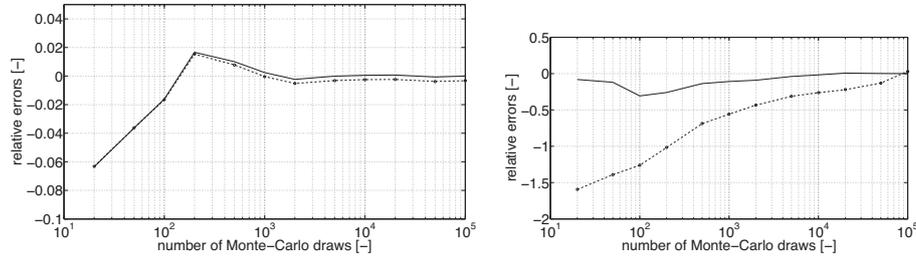


Figure 11. Evolution of η_r (dashed line and circles) and η_{ref} (solid line) with respect to the number of Monte-Carlo draws for the evaluation of q_{∇} [left] and q_v [right] with models defined by Tab. III.

5.1.4. General conclusions on the influence of the parameters

For the quantities of interest studied here, the size of the stochastic patch or the number of Monte-Carlo draws used for the primal problem have strong influences on the error. When the adjoint model is solved with a sufficient accuracy, the estimated error matches perfectly with the true error in the case of the linear quantity of interest q_{∇} . For the estimation of q_v , the difference between the errors is due to the fact that $q(u_{ex}) - q(u_{arl})$ is estimated by $q'(u_{arl}, e)$ that corresponds to the first order term only (see (8)). Finally, Section 5.1.3 showed that the error for high MC and large L_s comes from the use of an Arlequin surrogate model for the solution of the adjoint problem.

In Section 5.2, we propose to study the influence of the enrichment of the adjoint model, compared to the primal model one, when an approximate adjoint model is used to estimate the quantity of interest q_{∇} .

5.2. 1D model: adjoint problem approximation

5.2.1. Approximation of the adjoint model

As seen previously, in practice, the adjoint problem will also be approximated by the Arlequin method. Not to increase too much the computation time, parameters of the adjoint problem have to be set up correctly. In this part, we study the effectivity of the error estimation when adjoint model parameters vary. The studied parameters are:

- the half-size of the stochastic patch (L_{sa}) used for the adjoint model (when the corresponding parameter L_{sp} varies in the primal model),
- the number of Monte-Carlo draws (MC_a) used for the adjoint model (when the corresponding parameter MC_p varies in the primal model).

The aim is to get a feeling of how to enrich the adjoint model compared to the primal model to get an accurate estimation of the true error.

5.2.2. Influence of the parameter L_s for the estimation of $q_{\nabla}(u)$

models	type	L_s	L_c	MC	h_d	h_s	h
reference	mono	-	-	100000	-	-	0.002
primal	arlequin	[0.2, 0.5]	0.1	100000	0.002	0.002	-
adjoint	arlequin	[0.2, 0.5]	0.1	100000	0.002	0.002	-

Table IV. Definition of models used for the calibration of the adjoint problem (parameter L_s) associated to $q_{\nabla}(u)$.

Tab. V shows the evolution of η_r and η_{ref} with respect to the half-size of the stochastic patch used for the primal model (L_{sp}). In this case, we globally see a loss of 3% of accuracy in the error evaluation when we decrease of 0.05 the half-size of the stochastic patch for the adjoint model. When we use the same patch size, for the adjoint problem, as for the primal problem, the estimation is not correct. We can also notice that with a half-size of patch of 0.5 for the adjoint model, the difference between the true error and the estimated error is lower than 4% but still significant. That means that even with the biggest patch, the adjoint problem is not solved as accurately as in the previous section; this is mainly due to the fact that the coupling zone constrains the stochastic solution in a non-zero part of the problem. For the adaptive examples described in Section 5.3, we choose to set the patch size of the adjoint model with only one value ($L_{sa} = 0.45$) independently of the patch size of the primal model (L_{sp}).

L_{sa}	0.2	0.25	0.3	0.35	0.4	0.45	0.5	η_{ref}
$L_{sp} = 0.2$	-0.0857	0.1998	0.1717	0.1418	0.1120	0.0821	0.0521	0.0187
0.25	-	0.0057	0.1678	0.1391	0.1092	0.0791	0.0489	0.0162
0.3	-	-	0.0596	0.1353	0.1066	0.0765	0.0462	0.0136
0.35	-	-	-	0.0803	0.1028	0.0739	0.0437	0.0111
0.4	-	-	-	-	0.0767	0.0702	0.0411	0.0085
0.45	-	-	-	-	-	0.0565	0.0374	0.0060
0.5	-	-	-	-	-	-	0.0264	0.0035

Table V. Evolution of η_r with respect to the half-size of the stochastic patch of the primal model (L_{sp}), for the evaluation of $q_{\nabla}(u)$ with models defined by Tab. IV.

5.2.3. Influence of the parameter MC for the estimation of $q_{\nabla}(u)$

models	type	L_s	L_c	MC	h_d	h_s	h
reference	mono	-	-	100000	-	-	0.002
primal	arlequin	0.3	0.1	[20, 100000]	0.002	0.002	-
adjoint	arlequin	0.45	0.1	[20, 100000]	0.002	0.002	-

Table VI. Definition of models used for the calibration of the adjoint problem (parameter MC) associated to q_{∇} .

Tab. VII shows the evolution of η_r and η_{ref} with respect to the number of Monte-Carlo draws used for the primal model. We remark again that the estimation is better than when we take a large number of Monte-Carlo draws for the adjoint model. In Tab. VII, for $MC_p = MC_a = 100000$, we can recognize the error of 7,6% for $L_s = 0.3$ for the primal model and $L_s = 0.45$ for the adjoint model in Tab. V. For the adaptive examples described in Section 5.3, the number of Monte-Carlo draws for the adjoint model (MC_a) is set to 100000.

MC_a	20	200	2000	20000	100000	η_{ref}
$MC_p = 20$	-0.1271	-0.0359	-0.0034	0.032	0.0086	-0.0496
200	-	-0.0128	0.0547	0.0713	0.0947	0.0310
2000	-	-	0.0198	0.0411	0.0734	0.0107
20000	-	-	-	0.0452	0.0775	0.0147
100000	-	-	-	-	0.0765	0.0136

Table VII. Evolution of η_r with respect to the number of Monte-Carlo draws used for the primal model (MC_p), for the evaluation of q_{∇} with models defined by Tab. VI.

5.2.4. General conclusions on the approximation of the adjoint model

As soon as the Arlequin model is used for the adjoint problem, the estimation of the error loses efficiency. Nevertheless, when the stochastic patch is long enough, the difference between the reference error and the estimated error is quite small. In these cases, the estimated error tends to overestimate the true error. As regards the number of Monte-Carlo draws used for the adjoint model, it seems that the estimated error is sufficiently accurate when this number is large. For instance, if we take 20000 Monte-Carlo draws, the estimated error is quite accurate as the patch size of the adjoint problem ($L_{sa} = 0.45$) still affects the approximation of the adjoint solution, and therefore the quality of the estimation. Finally, for model adaptation, we choose to approximate the adjoint problem using the Arlequin method but with a large patch size ($L_s = 0.45$), and a large number of Monte-Carlo trials ($MC = 100000$). The other parameters are set to: $h_d = 0.01$ and $h_s = 0.002$. This choice is non unique and can be discussed and changed if needed (in the case where we have to refine the mesh size for example).

5.3. Model adaptation for the 1D problem

We study in this section the problem described in Section 5.1. This part presents the adaptivity results obtained when we investigate the two quantities of interest q_∇ and q_v . The parameters are L_s (half-size of the stochastic patch), MC (number of Monte-Carlo draws used), the spatial mesh size h_d of the deterministic model, while the spatial mesh size h_s of the stochastic model is fixed at 0.002.

In Fig. 12 and Tab. VIII, we study the error associated to q_∇ . The study shows that the main error sources are due to the use of a low number of Monte-Carlo draws then due to the use of the Arlequin method. By increasing the corresponding parameters (L_s from 0.2 to 0.45 and MC from 5 to 2000), the relative estimate error η_r decreases from 8.7% to finally get an error estimate of 6.6%. The corresponding true error decreases from 14% to 0.7%. More precisely, the algorithm stops after the iteration 3 and the dominant error is due to the use of the Arlequin model. The last iteration is added manually to illustrate the possibility to decrease the total error by increasing the number of Monte-Carlo draws (the second main source of the error), and therefore decreasing the stochastic error. Tab. VIII also shows the evolution of the true errors with respect to the patch size, the discretization and the Monte-Carlo truncation. As we can see, the various error estimates ($\eta_m, \eta_h, \eta_\theta$) give a good indication on the true errors, specially for η_θ and η_h . The difference due to the use of an Arlequin model for the adjoint model can be remarked only for the modeling error estimate.

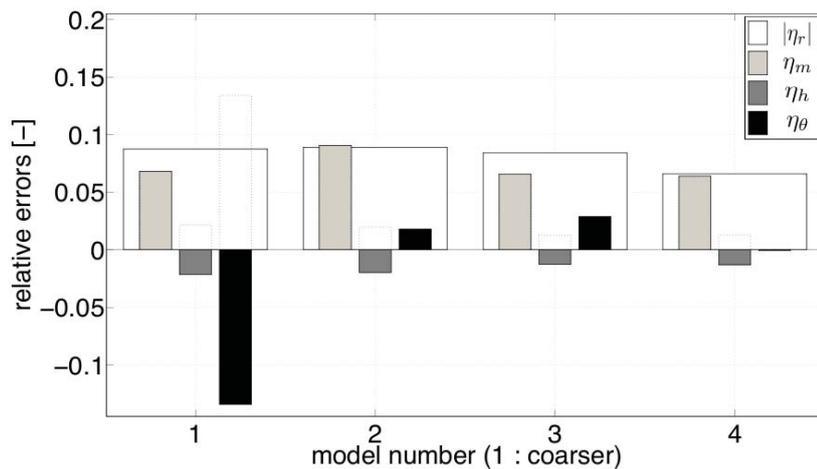


Figure 12. Evolution of the relative estimates of the total error η_r (white), modeling error η_m (light gray), discretization error η_h (dark gray) and stochastic error η_θ (black) during adaptive process for the estimation of q_∇ .

model	1	2	3	4
L_s	0.2	0.2	0.45	0.45
MC	5	200	200	2000
h_d	0.05	0.05	0.05	0.05
h_s	0.002	0.002	0.002	0.002
η_m	0.0682	0.0907	0.0658	0.0639
η_m^{ref}	0.0158	0.0189	0.0061	0.0059
η_h	-0.0216	-0.0197	-0.0127	-0.0131
η_h^{ref}	0.0432	-0.0150	-0.0103	-0.0126
η_θ	-0.1342	0.0180	0.0288	-0.0005
η_θ^{ref}	-0.1995	0.0210	0.0265	-0.0009
$ \eta_r $	0.0876	0.089	0.0842	0.0660
$ \eta_{ref} $	0.1405	0.0248	0.0223	0.0077

Table VIII. Evolution of parameters and relative errors (true and estimate) for the evaluation of q_∇ .

In Fig. 13 and Tab. IX, we study the error associated to q_v . In this case, the study shows that the main error sources are due to: (i) the use of a low number of Monte-Carlo draws; (ii) the size of the stochastic patch; (iii) finally (for the last iteration) the size of the mesh of the deterministic model. By increasing the corresponding parameters alternately, the relative estimate error η_r decreases from more than 86% to less than 0.5% as error estimate.

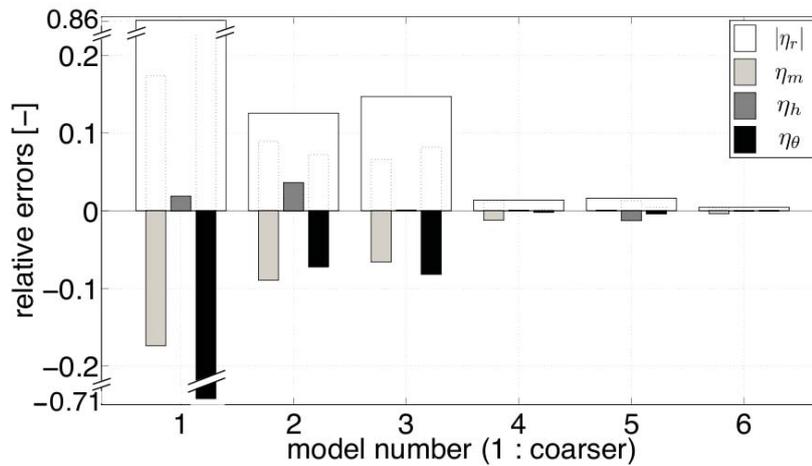


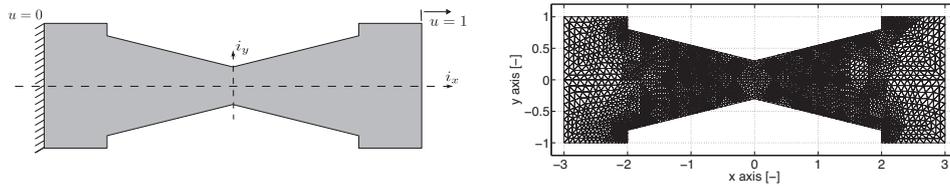
Figure 13. Evolution of the relative estimates of the total error η_r (white), modeling error η_m (light gray), discretization error η_h (dark gray) and stochastic error η_θ (black) during adaptive process for the estimation of q_v .

This simple example shows the efficiency of the splitting error sources methodology. Indeed, the stochastic error and the discretization error correspond to the true ones at least from the second iteration. The approximation of the adjoint problem using an Arlequin model mainly affects the modeling error estimate. Finally, the use of this technique permits to decrease efficiently the error estimate by adapting the corresponding parameter for each step of the process.

5.4. Model adaptation of a 2D problem

We now consider a 2D sample Ω inscribed in the box $[-3, 3] \times [-1, 1]$ (see Fig. 14). The sample is submitted to an imposed Dirichlet condition, with no bulk load. The boundary conditions are $u(x = -3, y) = 0$, $u(x = 3, y) = 1$, and $\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$ for the other edges, almost surely. The model

model	1	2	3	4	5	6
L_s	0.2	0.2	0.3	0.3	0.35	0.35
MC	200	10000	10000	50000	50000	50000
h_d	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.01
h_s	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
η_m	-0.174	-0.0893	-0.0661	-0.0121	0.0007	-0.0036
η_θ	-0.7077	-0.0724	-0.0819	-0.0022	-0.0040	-0.0001
η_h	0.0189	0.0360	0.0009	0.0006	-0.0128	-0.0008
$ \eta_r $	0.862	0.126	0.147	0.0137	0.0161	0.0045

Table IX. Evolution of parameters and relative error for the evaluation of q_b .Figure 14. 2D case and associated mesh used for the estimation of the residual \mathcal{R} .

is described by a random material property $K(x, \theta)$, modeled as a uniform field with bounds 0.3542 and 2.1938 (with geometric mean $1/E[1/K(x, \theta)] = 1$, and standard deviation $\sigma_K = 0.2$), and exponential correlation with correlation length $L_{cor} = 0.05$ in each direction. To estimate the residual numerically, the reference monodel problem is spatially discretized by 33792 elements and we use $MC = 5000$ Monte-Carlo draws to represent the stochastic field K .

The quantity of interest considered here is the component x of the gradient in a given zone Ω_{int} . Considering the model given in Fig. 15, Ω_{int} is located near the middle of the sample (where the loading is applied). This quantity of interest is defined by:

$$q_{2D}(u) = E \left[\int_{\Omega_{int}} \nabla u \cdot \mathbf{i}_x d\Omega \right]. \quad (13)$$

The reference problem is approximated by the Arlequin method with a centered patch. The corresponding adjoint problem is described in Fig. 15. It is loaded by $\mathbf{p}_q = K(x, \theta) \nabla u(x, \theta) = \mathbf{i}_x$ with \mathbf{i}_x the unit vector of the X-axis. It is spatially discretized by 8448 elements for the deterministic model and 6144 for the stochastic model in a patch of half-size $L_s = 1.8$. Moreover, we use also 5000 Monte-Carlo draws for the adjoint model.

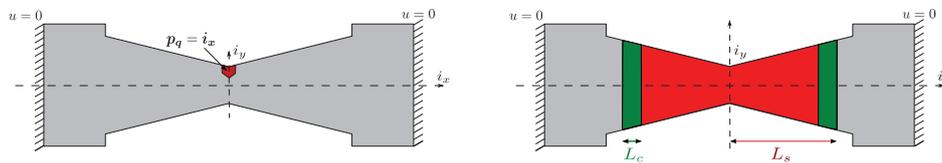


Figure 15. 2D associated adjoint problem.

Using the adaptive strategy introduced in Section 4.2, we investigate the absolute value of η_r :

$$\eta_r = \frac{\mathcal{R}(u_{arl}, p_a)}{q_{2D}(u_{arl})}. \quad (14)$$

Fig. 16 and Tab. X show that the main error sources are due to the use of a weak number of Monte-Carlo draws and due to the use of the Arlequin method. By increasing the corresponding parameters, the relative estimate error η_r decreases from 21% to 5%.

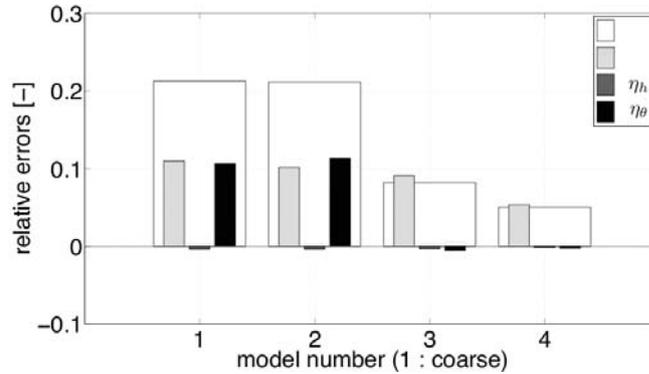


Figure 16. Evolution of relative estimates of the total error η_r (white), modeling error η_m (light gray), discretization error η_h (dark gray) and stochastic error η_θ (black) during adaptive process for the estimation of q_{2D} .

L_s	0.75	0.9	0.9	1.65
MC	5	5	500	500
N_d	528	528	528	528
N_s	3040	3424	3424	5632
η_m	0.1098	0.1018	0.0908	0.0539
η_h	-0.0038	-0.0038	-0.0031	-0.0013
η_θ	0.1067	0.1135	-0.0057	-0.0024
$ \eta_r $	0.2128	0.2116	0.0820	0.0502

Table X. Evolution of parameters and relative errors for the evaluation of q_{2D} . N_d and N_s represent the number of elements of the deterministic discretized model and of the stochastic patch respectively. Note that N_s increases only because L_s increases, the patch mesh is not finer.

As for the 1D adaptation example, the splitting of error sources technique permits to identify the dominating error source. The associated parameter can then be refined. For this 2D example, the Arlequin model with a relatively small number of Monte-Carlo draws, and a medium-sized patch, gives an estimation of the quantity of interest with less than 6% of error.

6. CONCLUSIONS

In this contribution, the main achievement is providing a framework for addressing the control of errors coming from three different sources:

1. the modeling error, due to the use of the Arlequin method coupling a deterministic model with a stochastic one to approximate a full stochastic problem,
2. the discretization error, due to the discretization of the spatial dimension, using the FEM for instance,
3. the stochastic error, due to the discretization along the stochastic dimension, using the Monte-Carlo technique for instance.

A goal-oriented error estimation technique was introduced to quantify the capability of the Arlequin framework to evaluate some specific quantities of interest. Adaptivity was also considered. For that purpose, the corresponding error strategy was enriched to identify separately the different

error sources. Using only the solution of the primal problem, the solution of the adjoint problem, and the definition of the residual associated to specific intermediate problems, we showed that it is possible to identify the major error source and refine the corresponding parameter to decrease the total error.

Future research will deal with an optimal adaptive process where the error could be spatially analyzed for instance, as well as the coupling between two stochastic models.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was partially supported by the ANR project TYCHE (Advanced methods using stochastic modeling in high dimension for uncertainty modeling, quantification and propagation in computational mechanics of solids and fluids), with project number ANR-2010-BLAN-0904, and by grants from DIGITEO and Région Ile-de-France, with project number 2009-26D.

REFERENCES

1. Babuška I., Melenk J.M., 1997. *The partition of unity method*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 40:727-758.
2. Moës N., Dolbow J., Belytschko T., 1999. *A finite element method for crack growth without remeshing*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 46:131-150.
3. Hughes T.J.R., Feijóo G.R., Mazzei L., Quincy J., 1998. *The variational multiscale method—a paradigm for computational mechanics*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 166(1-2):3-24.
4. Hou T.Y., Wu X.H., 1997. *A Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems in Composite Materials and Porous Media*, Journal of Computational Physics, 134:169-189.
5. Oden J.T., Zohdi T.I., 1997. *Analysis and adaptive modeling of highly heterogeneous elastic structures*, Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering, 138(3-4):367-391.
6. Fish J., 1992. *The s-version of the finite element method*, Computers & Structures, 43(3):539-547.
7. Ben Dhia H., 1998. *Multiscale mechanical problems: the Arlequin method*, Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences - séries IIB, Mechanics, Physic, Astronomy, 326(12):899-904.
8. Xiao S.P., Belytschko T., 2004. *A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 193(17-20):1645-1669.
9. Ben Dhia H., 2008. *Further insights by theoretical investigations of the multiscale Arlequin method*, International Journal for Multiscale Computational Engineering, 6(3):215-232.
10. Xu X.F., 2007. *A multiscale stochastic finite element method on elliptic problems involving uncertainties*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 196(25-28):2723-2736.
11. Chamoin L., Oden J.T., Prudhomme S., 2008. *A stochastic coupling method for atomic-to-continuum Monte-Carlo simulations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 197(43-44):3530-3546.
12. Cottreau R., Clouteau D., Ben Dhia H., Zaccardi C., 2011. *A stochastic-deterministic coupling method for continuum mechanics*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 200:3280-3288.
13. Ben Dhia H., Rateau G., 2001. *Mathematical analysis of the mixed Arlequin method*, Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences - séries I, Mathematics, 332(7):649-654.
14. Ben Dhia H., Zammali C., 2004. *Level-Sets and Arlequin framework for dynamic contact problems*, European Journal of Computational Mechanics, 13(5-6-7):403-414.
15. Ben Dhia H., Rateau G., 2005. *The Arlequin method as a flexible engineering design tool*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 62(11):1442-1462.
16. Bauman P.T., Ben Dhia H., Elkhodja N., Oden J.T., Prudhomme S., 2008. *On the application of the Arlequin method to the coupling of particle and continuum models*, Computational Mechanics, 42:511-530.
17. Prudhomme S., Ben Dhia H., Bauman P.T., Elkhodja N., Oden J.T., 2008. *Computational analysis of modeling error for the coupling of particle and continuum models by the Arlequin method*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 197(41-42):3399-3409.
18. Ben Dhia H., Torkhani M., 2011. *Modeling and computation of fretting wear of structures under sharp contact*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 85:61-83.
19. Hu H., Damil N., Potier-Ferry M., 2011. *A bridging technique to analyse the influence of boundary conditions on instability patterns*, Journal of Computational Physics, 230(10):3753-3764.
20. Cottreau R., Ben Dhia H., Clouteau D., 2010. *Localized modeling of uncertainty in the Arlequin framework*, IUTAM Symposium on the Vibration Analysis of Structures with Uncertainties, 477-488. R. Langley and A. Belyaev.
21. Ainsworth M., Oden J.T., 1997. *A posteriori error estimation in finite element analysis*, Computational Mechanics Advances, 142:1-88.
22. Stein E., 2003. *Error-controlled Adaptive Finite Elements in Solid Mechanics*. J. Wiley (ed.).
23. Ladevèze P., Pelle J.-P., 2004. *Mastering calculations in linear and nonlinear mechanics*, Springer.
24. Becker R., Rannacher R., 2001. *An optimal approach to shape a posteriori error estimation in finite element methods*, In Acta Numerica, Iserles A (ed.), Cambridge University Press, 10:1-102.
25. Paraschivoiu M., Peraire J., Patera A.T., 1997. *A posteriori finite element bounds for linear functional outputs of elliptic partial differential equations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 150:289-312.
26. Prudhomme S., Oden J.T., 1999. *On goal-oriented error estimation for elliptic problems: application to the control of pointwise errors*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 176:313-331.

27. Prudhomme S., Chamoin L., Ben Dhia H., Bauman P.T., 2009. *An adaptive strategy for the control of modeling error in two-dimensional atomic-to-continuum coupling simulations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 197:1887-1901.
28. Ben Dhia H., Chamoin L., Oden J.T., Prudhomme S., 2011. *A new adaptive modeling strategy based on optimal control for atomic-to-continuum coupling simulations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 200(37-40):2675-2696.
29. Oden J.T., Babuška I., Nobile F., Feng Y., Tempone R., 2005. *Theory and methodology for estimation and control of errors due to modeling, approximation, and uncertainty*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 194:195-204.
30. Ladevèze P., Chamoin L., 2011. *On the verification of model reduction methods based on the Proper Generalized Decomposition*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 200:2032-2047.
31. Oden J.T., Vemaganti K.S., 2000. *Estimation of Local Modeling Error and Goal-Oriented Adaptive Modeling of Heterogeneous Materials: I. Error Estimates and Adaptive Algorithms*, Journal of Computational Physics, 164(1):22-47.
32. Oden J.T., Prudhomme S., 2002. *Estimation of modeling error in computational mechanics*, Journal of Computational Physics, 182:496-515.
33. Babuška I., Tempone R., Zouraris G.E., 2004. *Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic partial differential equations*, SIAM Journal on Numerical Analysis, 42(2):800-825.
34. Robert C.P., Casella G., 2004. *Monte Carlo statistical methods*, Springer (ed.).
35. Ghanem R.G., Spanos P.D., 2003. *Stochastic finite elements: a spectral approach*, Courier Dover Publications.
36. Bourgeat A., Piatnitski A., 2004. *Approximations of effective coefficients in stochastic homogenization*, Annales de l'Institut Henri Poincaré (B) Probability and Statistics, 40(2):153-165.
37. Cottreau R., 2012. *Numerical strategy for the unbiased homogenization of random materials*, Submitted for publication in International Journal for Numerical Methods in Engineering.
38. Bauman P.T., Oden J.T., Prudhomme S., 2009. *Adaptive multiscale modeling of polymeric materials with Arlequin coupling and goals algorithms*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 198:799-818.
39. Oden J.T., Prudhomme S., 2001. *Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method*, Computers & Mathematics with Applications, 41:735-756.
40. Ladevèze P., Chamoin L., 2010. *Calculation of strict error bounds for finite element approximations of non-linear pointwise quantities of interest*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 84:1638-1664.