CSMA 2022
15ème Colloque National en Calcul des Structures
16-20 Mai 2022, Presqu'île de Giens (Var)

Règles de quadrature "moment-fitting" positives pour les approches de domaines fictifs

Grégory Legrain[1]

[1] *GeM, Ecole Centrale de Nantes, Nantes Université, UMR CNRS 6183 gregory.legrain@ec-nantes.fr*

Résumé — Les approches dites de domaines fictifs permettent la résolution de problèmes physiques sur des grilles indépendantes de la géométrie, limitant ainsi les problématiques de remaillage. Cependant, une intégration précise de la formulation faible est toujours nécessaire pour les éléments partiellement dans le domaine physique. Parmi les approches proposées dans la littérature, nous considérons la construction de règles ad-hoc dites de "moment fitting". Celles-ci ne donnant généralement pas des poids positifs, nous proposons ici une approche permettant de s'assurer de la positivité des règles obtenues.
Mots clés — domaines fictifs, règles de quadrature, moment fitting, non-negative least square.

1 Introduction

Les applications de pointes de l'ingénierie, comme celles rencontrées dans les secteurs aéronautique et spatial se fondent sur un lien fort entre CAO et simulation. La méthode des éléments finis est classiquement mise en œuvre car robuste et éprouvée. Cependant, la méthode ne peut être totalement intégrée à la CAO, principalement à cause des conversions géométriques nécessaires à la construction du maillage : la représentation géométrique est dégradée lors de cette procédure et la topologie du modèle est perdue. C'est pourquoi de nombreuses alternatives ont été proposées dans la littérature : méthodes sans maillage [8, 1], approches isogeometriques [4] et domaines fictifs entres autres [21]. Ces méthodes permettent de meilleurs échanges entre CAO et simulation. Dans la suite, nous considérerons plus spécifiquement les approches de domaines fictifs de haut ordre comme l'approche Finite Cell [19, 7, 20] ou la méthode X-FEM en haut ordre [17, 23, 14]. Ces approches permettent de découpler géométrie et approximation en étendant le domaine d'approximation au-delà des frontières physiques du domaine, permettant ainsi de quasiment éliminer les étapes de maillage et de simplification géométriques (cf figure 1)). De plus, l'utilisation de bases de haut ordre permet d'améliorer les propriétés de convergence de la méthode ainsi que sa précision. Précisons tout de même que toutes les difficultés mentionnées ci-dessus ne sont pas dues à la procédure de maillage : la description dite B-REP classiquement utilisée en CAO ne décrit que la surface du domaine d'intérêt et contient souvent des trous, recouvrements ainsi que des surfaces mal orientées [26].

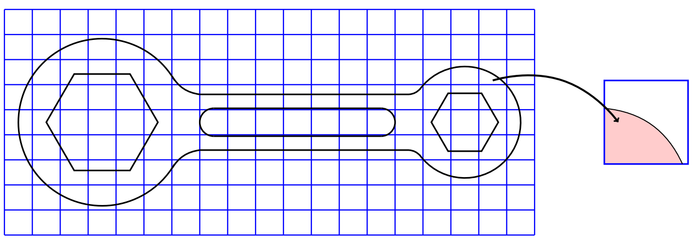


FIGURE 1 – Problème mécanique simulé par une approche de domaines fictifs.

La flexibilité géométrique de la méthode est contrebalancée par le coût de l'intégration des opérateurs éléments finis. En effet, les éléments d'approximation localisés partiellement dans l'espace physique doivent être intégrés seulement sur cette partie (voir le détail sur la figure 1). De nombreuses approches ont été proposées pour l'intégration sur ces éléments (voir figure 2 pour un aperçu général). La plus commune (et robuste) consiste à utiliser un maillage d'intégration raffiné emboité dans les éléments d'approximation. Celui-ci est généré par une structure de type octree/quadtree. La principale limite de cette approche concerne le nombre élevé de points d'intégration qu'elle génère. Récemment, il a été proposé de recourir à la construction de règles d'intégration ad-hoc élément par élément en se basant sur les approches dites de "moment fitting" : les points d'intégration sont positionnés arbitrairement et leur poids est calculé de sorte que la règle d'intégration soit exacte pour un ordre donné.

Les difficultés associées à cette approche sont : (i) le fait que les poids ainsi obtenus puissent être négatifs (ce qui détériore la stabilité de la règle d'intégration) ; (ii) la localisation de ces points est généralement choisie en dehors du domaine physique (pour des raisons numériques), ce qui les rend inopérantes pour des problèmes non-linéaires à variables internes.

L'objectif de cette étude est de proposer une approche permettant de construire des règles de quadrature robustes (i.e. à poids positifs) dont les points sont localisés strictement dans le domaine physique des éléments d'approximation. Nous comparons également les performances de ces règles avec les approches usuellement proposées dans la littérature des domaines fictifs.

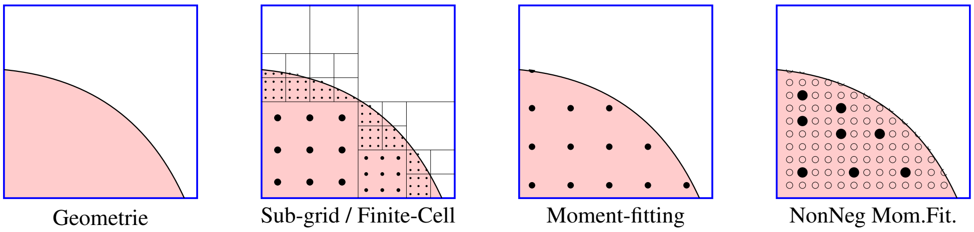


FIGURE 2 – Intégration sur un domaine physique Ω contenu dans un élément. De gauche à droite : Géometrie ; Approches Sub-grid/Finite-Cell : l'élément est découpé récursivement et des règles d'intégration sont définies sur les feuilles de la subdivision ; Approches Moment-fitting : les points de quadrature sont définis arbitrairement et les équations de "moment-fitting" sont résolues pour calculer les poids ; Approche moment-fitting non négative : les points d'intégration sont automatiquement sélectionnés parmi un ensemble de points proposé et les poids sont déterminés.

2 Règles d'intégration "moment fitting"

Construire une règle d'intégration consiste à approcher I, l'intégrale d'une fonction $f(\mathbf{x})$ sur un domaine Ω (voir figure 2) :

$$I = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\Omega \approx \sum_{j=1}^{n_q} f(\mathbf{x}_j) w_j \tag{1}$$

où n_q est le nombre de points d'intégration positionnés en $\mathbf{x}_j$ et w_j leurs poids. Nous chercherons ici à comparer différentes méthodes de construction, en mettant l'accent sur leur précision ainsi que la positivité de leurs poids. Cette dernière condition est une propriété souhaitable pour la robustesse (stabilité) de la règle d'intégration et pour une application en non-linéaire (voir section 3).

Pour utiliser une approche de moment fitting, nous supposons que l'intégrant $f(\mathbf{x})$ peut être correctement approché sur une base de m fonctions $\mathcal{H} = \{h_j\}_{j=1,\ldots,m}$:

$$f(\mathbf{x}) \approx \sum_{j=1}^{m} \beta_j h_j(\mathbf{x}) \tag{2}$$

où les β_j sont les coefficients de l'approximation sur la base. Dans cette contribution, nous choisirons deux types de bases polynomiales d'ordre p_q dans $\mathbb{R}^2$, à savoir la base monomiale :

$$\mathcal{H} = \left\{x^i y^j, i, j = 0, \ldots, p_q\right\} \tag{3}$$

et la base de Legendre :

$$\mathcal{H} = \left\{L_i(x) L_j(y), i, j = 0, \ldots, p_q\right\} \tag{4}$$

où les $L_i(x)$ forment la base unidimensionnelle de Legendre. Dans cette expression, nous considérons une base tensorisée, mais des bases tronquées [24] peuvent également être considérées. L'intégrant dans

I (eq.(1)) peut être remplacé par son approximation polynomiale dans $\mathcal{H}$. Ceci conduit à l'équation dite de "moment fitting" qui définit l'ensemble des poids qui assurent une intégration correcte de l'approximation polynomiale de f :

$$\sum_{j=1}^{n_q} h_i(\mathbf{x}_j)w_j = \int_\Omega h_i(\mathbf{x})d\Omega, \quad i = 1,\ldots,m \tag{5}$$

Ce système $m \times n_q$ devrait être résolu avec pour inconnues la position des points d'intégration $\mathbf{x}_j$ ainsi que leurs poids w_j. Le nombre de points d'intégration est a priori inconnu, mais comme proposé dans [18], nous sélectionneront $n_q \geq m$ par la suite. La résolution de ce système d'équations avec les $\mathbf{x}_j$ inconnus rend le problème non-linéaire. Afin d'obtenir un problème linéaire, la position des points d'intégration est fixée a priori. Le problème est alors résolu en utilisant un solveur des moindres carrés classique. Il est possible de positionner les points d'intégration seulement dans Ω [11], ce qui est nécessaire pour le cas des problèmes non-linéaires si des variables internes doivent être stockées. Malheureusement, ce choix semble dégrader le conditionnement du problème et ainsi diminuer la précision de la règle d'intégration obtenue [11]. Il a également été proposé de positionner les points d'intégration aux points de Gauss-Legendre de l'élément d'approximation, conduisant ainsi à une amélioration de la robustesse [11], au prix de points positionnés en dehors du domaine physique. Un tel choix peut donner lieu à de sévères difficultés dans le cas de problèmes non-linéaires, en particulier lors de la mise à jour des variables internes [2].

Notons ici que la construction du problème de moment-fitting nécessite pour chaque élément (partiellement dans la matière) d'intégrer le second membre de l'équation ainsi que de résoudre le problème des moindres carrés. L'intégration du second membre de l'équation (5) (intégration surfacique en 2D, volumique en 3D) peut être réécrite sous forme d'intégrale de frontière en utilisant le théorème de la divergence [18]. Il est également possible d'utiliser une règle d'intégration de type sub-grid (cf figure 2). Bien que cette stratégie puisse sembler très coûteuse, elle l'est bien moins que le calcul des opérateurs éléments finis, et peut enfin être amortie pour les problèmes non-linéaires car ceux-ci nécessitent de nombreux ré-assemblages à règle d'intégration fixe. Finalement, il est nécessaire de mentionner qu'il n'existe aucun moyen de s'assurer a priori que les poids ainsi obtenus seront positifs, même si Tchakaloff [25] a prouvé que de telles solutions existaient lorsque $n_q = m$ (si la position des point d'intégration est libre) et lorsque $n_q \geq m$ si les points sont fixés [5].

3 Motivation

Nous motivons ici sur quelques exemples simples l'intérêt de chercher à construire des règles d'intégration positives.

3.1 Fonction impulsion

Considérons tout d'abord l'intégration d'une fonction de type impulsion sur un élément partiellement dans la matière. Cette fonction représente la prise en compte d'un terme source localisé (figure 3). Un ensemble arbitraire de points d'intégration est choisi pour construire une règle d'intégration de degré 7 (une telle règle intègre exactement un polynôme de degré 7). Les poids, obtenus à partir de la méthode de moment fitting, sont donnés dans le tableau 1 : notez que quatre d'entre eux sont négatifs. L'intégrale de la fonction s'avère être négative (-1.64637) alors que l'intégrale exacte est clairement positive (0.17725). Au contraire, l'utilisation d'une règle de Gauss-Legendre ou d'une règle par moment-fitting positive obtenue via l'approche proposée ici donnent toutes deux des résultats précis. Dans le cas d'un problème réel, l'erreur d'intégration conduirait à des résultats trompeurs dans la zone d'intérêt.

3.2 Problème non-linéaire

Considérons enfin un problème mécanique unidimensionnel composé d'une barre de longueur 100 mm et de section 0.75 mm^2 constituée d'un matériau élasto-plastique avec écrouissange isotrope linéaire (module de Young 10000 MPa, module tangent 1000 MPa, limite d'élasticité 5 MPa) fixée à son extrémité gauche et soumise à une force volumique $f = 0.1$ MPa (cf figure 4). Nous considérons une approximation

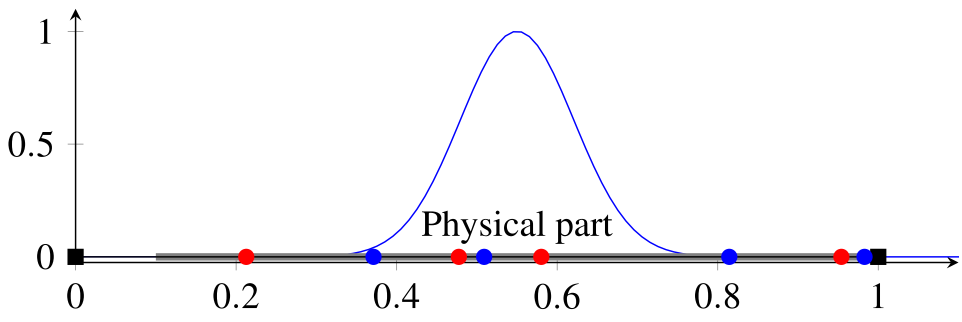


FIGURE 3 – Integration d'une fonction impulsion sur la partie physique $[0.1, 1]$ d'un élément $[0, 1]$. Les points d'intégration sont représentés par des cercles (rouge : poids positifs, bleu : poids négatifs)

Abscisse	Poids
0.21261261	0.40209976
0.37117117	-1.88397568
0.47747748	15.16705032
0.50900901	-17.50788951
0.58018018	4.67401643
0.81441441	-0.18383059
0.95405405	0.41874489
0.98288288	-0.18621563

TABLE 1 – Intégration de la fonction impulsion $e^{-(x-0.55)^2/0.01}$ entre 0.1 et 1. Règle d'intégration moment fitting de degré 7.

éléments finis de degré 4 utilisant une base de Legendre intégrée (5 éléments). Une quadrature de Gauss-Legendre est utilisée pour tous les éléments (4 points), sauf l'élément central pour lequel des règles de quadrature moment-fitting d'ordre variable sont générées à partir de points répartis uniformément (figure 4). Dans le régime élastique linéaire, les opérateurs éléments finis sont intégrés exactement par une règle de degré $2 \times (p-1) = 6$ (présentée sur la figure 4). Les courbes de référence source-déplacement et de déformation plastique obtenues à partir de règles de Gauss-Legendre dans tous les éléments sont présentées sur la figure 5. Le calcul est maintenant réalisé en modifiant la règle d'intégration dans l'élément central (ordres $6, 14, 16, 18$ et 20). L'évolution du nombre maximum d'itération de Newton-Raphson tout au long des 20 pas de chargement est présentée dans le tableau 2. Nous observons clairement que l'algorithme de Newton-Raphson diverge lorsque l'ordre d'intégration augmente. Notons cependant que la procédure itérative converge dans certains cas comprenant des poids négatifs. Par contre, la déformation plastique ne converge pas dans l'élément central, comme présenté sur la figure 6a. Au contraire, l'approche proposée dans cette contribution converge de part ses poids positifs (figure 6b).

Ces deux exemples illustrent la nécessité de construire des règles de quadrature positives, pas seulement d'après des arguments mathématiques, mais aussi d'après des cas pratiques éléments finis.

Order	Sign	Max. Iter
6	> 0	4
14	< 0	8
16	< 0	7
18	< 0	7
20	< 0	∞

TABLE 2 – Barre soumise à une force linéique. Evolution du nombre d'itérations en fonction de l'ordre de la règle d'intégration de l'élément central (règles de type moment fitting).

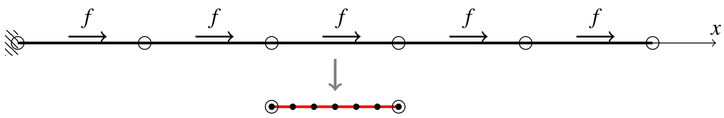
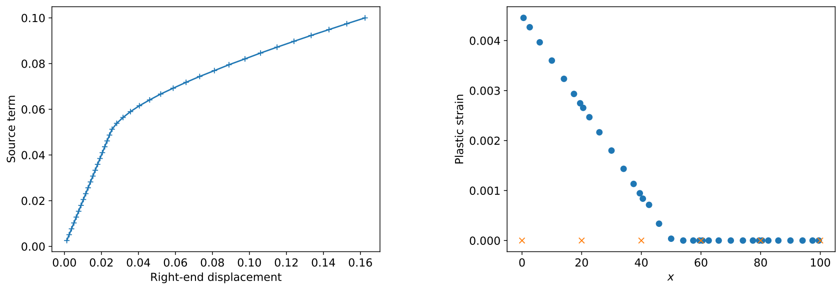


FIGURE 4 – Barre soumise à une force linéique. Exemple de points d'intégration dans l'élément central.



a. b.

FIGURE 5 – Barre soumise à une force linéique. a. Déplacement de l'extrémité droite en fonction du terme source ; b. Déformation plastique et nœuds du maillage (×).

4 Règles d'intégration "moment fitting" non-négatives

Dans l'objectif de construire des règles d'intégration positives, nous proposons une approche très simple permettant d'assurer la positivité de la solution du problème de moment fitting (5), basée sur une idée similaire à [9]. Rappelons tout d'abord qu'il a été prouvé dans [25, 6, 5] que le problème (non-linéaire) de moment fitting admet une solution positive avec $n_q = m$ points d'intégration (théorème de Tchakaloff). Malheureusement, il n'est généralement pas possible de capturer cette solution en résolvant le problème de moment fitting linéaire (à points d'intégration fixés). Dans ce cas, il est toujours possible de trouver une solution positive, mais pour $n_q \geq m$ points [9, 27, 5]. Le problème admet alors une infinité de solutions (under-determinated least squares) : afin de capturer la solution positive du problème (si elle existe), le problème (5) est réécrit en problème des moindres carrés positif :

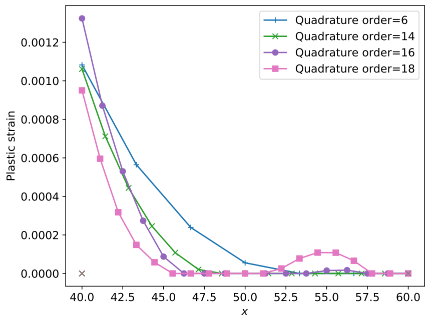
$$\text{Minimiser} \| [V]\{w\} - \{d\} \|_2^2 \quad \text{tel que } w_i \geq 0,\, i = 1, \ldots, n_q \tag{6}$$

où $[V]$ et $\{d\}$ sont respectivement la matrice et le vecteur qui apparaissent dans (5). La solution de ce problème peut être obtenue en utilisant des algorithmes d'optimisation contrainte comme TRON (Trust Region Newton method) [15] ou LBFGS-B (Limited-memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) [3]. Malheureusement, le nombre de points d'intégration nécessaire à assurer l'existence d'une solution positive peut être élevé, ce qui diminuerait l'efficacité de la règle d'intégration ainsi obtenue (il a été montré que même dans le cas "simple" de points équidistants placés dans un hypercube, $n_q \gg m$ [27]).

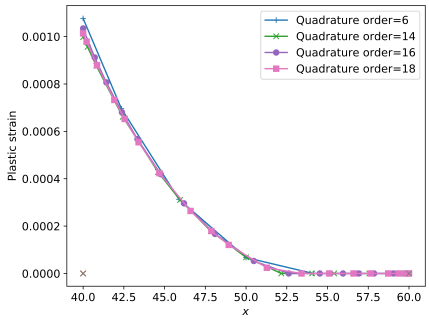
Heureusement, Davis [6, 22] a prouvé le théorème 1 qui montre qu'il est toujours possible de trouver une solution "creuse" (i.e. avec seulement m poids non-nuls) aux équations de moment fitting à condition que n_q soit suffisamment grand pour assurer qu'une solution positive ("pleine") existe.

Theorem 1 (Davis [6]) *Si une règle d'intégration d'ordre p_q existe avec $n_q \geq m$ points et des poids positifs, alors une règle d'intégration d'ordre p_q existe avec les mêmes points, mais seulement m poids non nuls et positifs.*

Nous proposons de capturer cette solution en considérant un solveur aux moindres carrés non-négatifs comme `nnls` [12]. Ce solveur est basé sur un algorithme d'ensemble actif (active set). Il a été prouvé que cet algorithme était convergent, fini, et produisait une solution creuse. Des algorithmes de type LASSO non-négatifs pourraient également être considérés [28]. Notons que si trop peu de points sont proposés lors de l'initialisation de l'algorithme, la résolution de (6) pourrait s'avérer impossible (ou plutôt converger vers un large résidu). Ceci est dû au fait que des solutions positives n'existent que



a.



b.

FIGURE 6 – Barre soumise à une force linéique. Déformation plastique dans l'élément central. a. Règles d'intégration moment fitting ; b. Règles d'intégration moment fitting positives en utilisant l'approche développée dans cette contribution (cf section 4).

si n_q est suffisamment grand par rapport à m. Dans ce cas, $\exists \varepsilon > 0$ tel que $\| [V] \{w\} - \{d\} \|_2 < \varepsilon$, et la règle d'intégration n'est pas exacte. Néanmoins, la règle d'intégration peut être suffisamment précise en pratique si $\varepsilon \ll 1$. Nous utilisons ici l'implémentation de l'algorithme `nnls` provenant de `scipy` [10]. Les points d'intégration peuvent être positionnés de manière aléatoire ou selon une grille régulière (en ne gardant que ceux positionnés dans l'espace physique). Il est également possible de se baser sur des points d'intégration obtenus à partir de la tesselation de l'approche sub-grid [13]. L'approche sélectionne ensuite au plus m points d'intégration parmi ce premier ensemble, à la manière de l'approche EIM [16].

5 Conclusion

Suivant [13], les performances de l'approche proposée seront illustrées au travers d'exemples représentatifs en se focalisant sur la précision, la robustesse et le coût de mise en œuvre de la méthode. Différentes approches permettant de limiter le coût de construction de la règle d'intégration seront présentées, puis appliquées à des problèmes non-linéaires en mécanique.

6 Références bibliographiques

[1] Ted BELYTSCHKO et al. "Meshless Methods : An Overview and Recent Developments". In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 139 (1998), p. 3-47.

[2] Hoang-Giang BUI, Dominik SCHILLINGER et Gunther MESCHKE. "Efficient Cut-Cell Quadrature Based on Moment Fitting for Materially Nonlinear Analysis". In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (), p. 30. DOI : `10.1016/j.cma.2020.113050`.

[3] R. BYRD et al. "A Limited Memory Algorithm for Bound Constrained Optimization". In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 16.5 (sept. 1995), p. 1190-1208. ISSN : 1064-8275. DOI : `10/bpjm24`.

[4] J.A. COTTRELL, Thomas J. R. HUGHES et Yuri BAZILEVS. *Isogeometric Analysis*. 2009.

[5] PHILIP J DAVIS. "Approximate Integration Rules with Nonnegative Weights". In : *Lectures in differential equations* 2 (1969), p. 233-256.

[6] Philip J. DAVIS. "A Construction of Nonnegative Approximate Quadratures". In : *Mathematics of Computation* 21.100 (1967), p. 578-582. ISSN : 0025-5718. DOI : `10/dvvjkv`.

[7] A. DÜSTER et al. "The Finite Cell Method for Three-Dimensional Problems of Solid Mechanics". In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.45 (août 2008), p. 3768-3782. ISSN : 0045-7825. DOI : `10/ccm6j5`.

[8] Antonio HUERTA, Ted BELYTSCHKO et Timon RABCZUK. "Meshfree Methods". In : 2004, p. 1-49. DOI : `10.1002/9781119176817.ecm2005`.

[9] Daan HUYBRECHS. “Stable High-Order Quadrature Rules with Equidistant Points”. In : *Journal of Computational and Applied Mathematics* 231.2 (sept. 2009), p. 933-947. ISSN : 0377-0427. DOI : 10/bw9nk5.

[10] Eric JONES, Travis OLIPHANT, Pearu PETERSON et al. “SciPy : Open Source Scientific Tools for Python”. In : (2001).

[11] Meysam JOULAIAN, Simeon HUBRICH et Alexander DÜSTER. “Numerical Integration of Discontinuities on Arbitrary Domains Based on Moment Fitting”. In : *Computational Mechanics* 4.C (mars 2016). DOI : 10.1007/s00466-016-1273-3.

[12] Charles L LAWSON et Richard J HANSON. *Solving Least Squares Problems*. T. 15. Siam, 1995.

[13] Gregory LEGRAIN. “Non-Negative Moment Fitting Quadrature Rules for Fictitious Domain Methods”. In : *Computers & Mathematics with Applications* (2021), p. 34. DOI : 10/gmnnst.

[14] Grégory LEGRAIN et al. “Numerical Simulation of CAD Thin Structures Using the eXtended Finite Element Method and Level Sets”. In : *Finite Elements in Analysis and Design* 77 (2013). DOI : 10.1016/j.finel.2013.08.007.

[15] C. LIN et J. MORÉ. “Newton’s Method for Large Bound-Constrained Optimization Problems”. In : *SIAM Journal on Optimization* 9.4 (jan. 1999), p. 1100-1127. ISSN : 1052-6234. DOI : 10/d8pvcq.

[16] Yvon MADAY et al. “A General Multipurpose Interpolation Procedure : The Magic Points”. In : *Communications on Pure and Applied Analysis* 8.1 (2009), p. 383-404. ISSN : 1534-0392. DOI : 10.3934/cpaa.2009.8.383.

[17] Nicolas MOËS, John E. DOLBOW et Ted BELYTSCHKO. “A Finite Element Method for Crack Growth without Remeshing”. In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 46 (1999), p. 131-150. DOI : 10.1002/(SICI)1097-0207(19990910)46:1<131::AID-NME726>3.0.CO;2-J.

[18] Björn MÜLLER, F. KUMMER et M. OBERLACK. “Highly Accurate Surface and Volume Integration on Implicit Domains by Means of Moment-Fitting”. In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 96.8 (nov. 2013), p. 512-528. ISSN : 978-1-4577-0079-8. DOI : 10.1002/nme.4569.

[19] Jamshid PARVIZIAN, Alexander DÜSTER et Ernst RANK. “Finite Cell Method”. In : *Computational Mechanics* 41.1 (2007), p. 121-133. DOI : 10.1007/s00466-007-0173-y.

[20] Ernst RANK et al. “Shell Finite Cell Method : A High Order Fictitious Domain Approach for Thin-Walled Structures”. In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200.45-46 (oct. 2011), p. 3200-3209. DOI : 10.1016/j.cma.2011.06.005.

[21] V K SAULÈV. “On the Solution of Some Boundary Value Problems on High Performance Computers by Fictitious Domain Method”. In : *Siberian Math. J.* 4 (1963), p. 912-925.

[22] Ernst STEINITZ. “Bedingt Konvergente Reihen Und Konvexe Systeme.” In : *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 143 (1913), p. 128-176.

[23] Natarajan SUKUMAR et al. “Modeling Holes and Inclusions by Level Sets in the Extended Finite-Element Method”. In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190.46-47 (2001), p. 6183-6200. DOI : 10.1016/S0045-7825(01)00215-8.

[24] Barna SZABÓ et Ivo BABUŠKA. *Finite Element Analysis*. First. John Wiley & Sons, 1991. ISBN : 0-471-50273-1.

[25] Vladimir TCHAKALOFF. “Formules de Cubatures Mécaniques à Coefficients Non Négatifs”. In : *Bull. Sci. Math* 81.2 (1957), p. 123-134.

[26] Benjamin WASSERMANN et al. “Integrating CAD and Numerical Analysis : ‘Dirty Geometry’ Handling Using the Finite Cell Method”. In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 351 (juill. 2019), p. 808-835. ISSN : 0045-7825. DOI : 10/gfzscx.

[27] M. WILSON. “Necessary and Sufficient Conditions for Equidistant Quadrature Formula”. In : *SIAM Journal on Numerical Analysis* 7.1 (mars 1970), p. 134-141. ISSN : 0036-1429. DOI : 10/c2z96f.

[28] Lan WU, Yuehan YANG et Hanzhong LIU. “Nonnegative-Lasso and Application in Index Tracking”. In : *Computational Statistics & Data Analysis* 70 (fév. 2014), p. 116-126. ISSN : 0167-9473. DOI : 10/gf2tn3.