

Estimateurs d'erreur en quantités d'intérêt dans *Code_Aster*

Josselin DELMAS^(1,2)

Patrice COOREVITS⁽²⁾

Pierre BADEL⁽¹⁾

Mohamed GUESSASMA⁽²⁾

(1) LaMSID, UMR CNRS/EDF 2832

(2) LTI, Université de Picardie

CANUM 2006 - Session « Adaptation de maillages » - 1 juin 2006

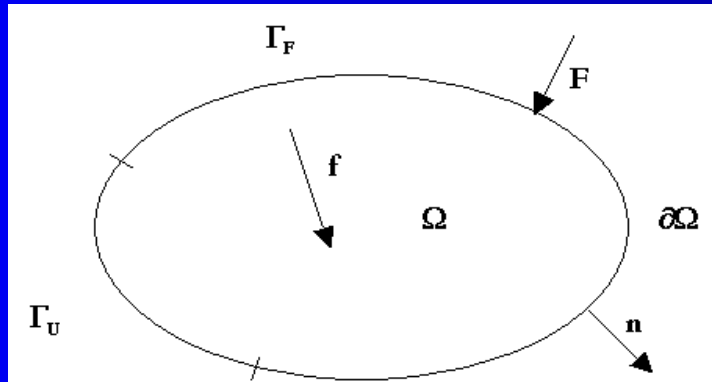
J. DELMAS, P. COOREVITS, P. BADEL, M. GUESSASMA

Contexte et motivations

- **Approximations éléments finis : erreurs de discrétisation ;**
- **Nécessité de les quantifier pour les contrôler ;**
- **Existence d'estimateurs trop abstraits ;**
- **Définition d'un estimateur local utilisant des quantités mécaniques ;**
- **Implémentation dans *Code_Aster*[®] ;**
- **Utilisation avec le logiciel *HOMARD*[®].**

Problème d'élasticité linéaire statique

Le domaine



Les équations

$$\begin{cases} \sigma_{ij,j} + f_i = 0 & \text{dans } \Omega \\ \sigma_{ij} = a_{ijkh} \varepsilon_{kh} & \text{dans } \Omega \\ \varepsilon_{ij}(u) = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \\ u_i(x) = 0 & \text{sur } \Gamma_U \\ \sigma_{ij} n_j(x) = F_i(x) & \text{sur } \Gamma_F \end{cases}$$

Formulation variationnelle du problème

$$\begin{cases} \text{Trouver } u^h \in V^h \text{ tel que} \\ a(u^h, v) = l(v) \quad \forall v \in V^h \end{cases}$$

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V \text{ tel que} \\ a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V \end{cases}$$

Problème discrétisé

$$a(u, v) = \int_{\Omega} a_{ijkh} \varepsilon_{kh}(u) \varepsilon_{ij}(v) dx \quad l(v) = \int_{\Gamma_F} F_i v_i ds - \int_{\Omega} f_i v_i dx$$

Estimateurs d'erreur « classiques »

Estimation globale de l'erreur (normes L^2 , normes en énergie, etc.) → trois démarches :

- Estimateurs d'erreur en relation de comportement (Ladevèze, 1975)
 - Construction d'un couple admissible déplacement-contrainte ;
 - Erreur en relation de comportement : $R_{dC} = \hat{\sigma} - K \varepsilon(\hat{u})$
- Estimateurs d'erreur en résidus d'équilibre (Babuska-Rheinboldt, 1978)
 - Construction des résidus d'équilibre : $R_h^u(v) = l(v) - a(u^h, v)$
 - L'erreur est solution d'un problème d'élasticité dont les données en effort sont les résidus d'équilibre. $e = u - u^h$
- Estimateurs d'erreur en contrainte lissée (Zienkiewicz-Zhu, 1987)
 - Construction d'un champ de contraintes lissées à partir de la solution EF ;
 - Substitution du champ exact au champ lissé dans la norme en énergie ;
 - Estimateur global : $\|e\|^2 = \int_{\Omega} (\tilde{\sigma}_h - \sigma_h)^T K^{-1} (\tilde{\sigma}_h - \sigma_h) d\Omega$

Les résidus d'équilibre

Résidu global = Source d'erreur

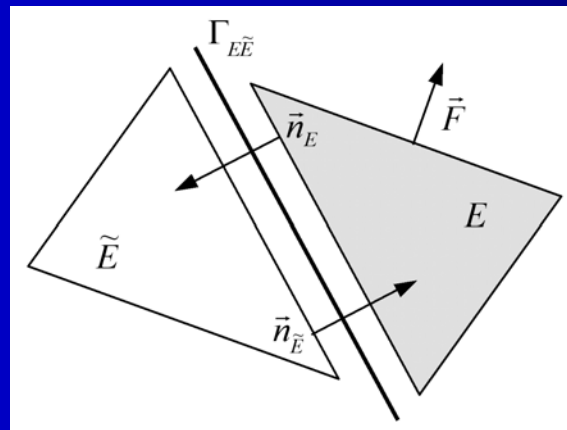
$$R_h^u(v) = l(v) - a(u^h, v)$$

Mesure la non-vérification des équations d'équilibre.

Résidu intérieur

$$\vec{r}_E = \operatorname{div} \sigma_E^h + \vec{f}$$

Mesure la non-vérification de l'équation d'équilibre intérieure.



Résidu de bord

$$\vec{t}_\Gamma = \sigma_E^h \vec{n}_E + \vec{\Phi}_E$$

Mesure la discontinuité du vecteur contrainte et la non-vérification des conditions d'équilibre sur le bord.

Estimateur d'erreur en résidus

On montre que l'erreur en solution est solution d'un problème d'élasticité dont les données en efforts sont les résidus d'équilibre.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } e \in V \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} \text{Tr}[\varepsilon(e) K \varepsilon(v)] d\Omega = \sum_E \int_E r_E v dE - \sum_{\Gamma} \int_{\Gamma} t_{\Gamma} v d\Gamma \quad \forall v \in V \end{array} \right.$$

- Estimateurs explicites : Utilisation directe de la relation précédente.
- Estimateurs implicites : Utilisation d'approximation de la relation précédente obtenus par résolution de problèmes locaux par éléments ou par patches.

Estimateur d'erreur en résidus explicite

Estimation de la semi-norme H^1 de l'erreur en résidu explicite. (Bernardi, Métivet, Verfürth, 1993)

$${}^R\eta_E = h_E \|r_E\|_{L^2(E)} + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \notin \Gamma_F} l_\Gamma^{\frac{1}{2}} \|t_\Gamma\|_{L^2(\Gamma)} + \sum_{\Gamma \subset \Gamma_F} l_\Gamma^{\frac{1}{2}} \|t_\Gamma\|_{L^2(\Gamma)}$$

Estimation de la norme en énergie de l'erreur en résidu explicite.

$${}^R\eta_E^2 = h_E^2 \|r_E\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \notin \Gamma_F} l_\Gamma \|t_\Gamma\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \subset \Gamma_F} l_\Gamma \|t_\Gamma\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

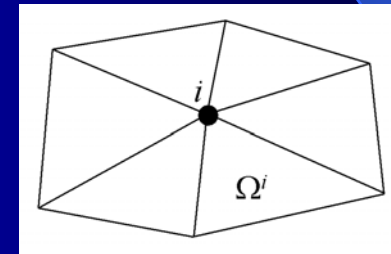
➤ Estimateurs programmés dans *Code_Aster*®

Estimateur d'erreur en résidus implicite (1)

Estimation par patchs d'éléments

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } e^i \text{ nul sur } \Gamma_U^i \text{ tel que} \\ \int_{\Omega^i} \text{Tr}[\varepsilon(e^i) K \varepsilon(v)] d\Omega = \sum_{E \subset \Omega^i} \int_E r_E v dE - \sum_{\Gamma \subset \Omega^i} \int_{\Gamma} t_{\Gamma} v d\Gamma \quad \forall v \text{ nul sur } \Gamma_U^i \end{array} \right.$$

$${}^R \eta_E = \int_{\Omega^i} \text{Tr}[\varepsilon(e^i) K \varepsilon(e^i)] d\Omega$$



- Patch == éléments connectés au nœud i ;
- Recherche d'une approximation éléments finis de e^i ;
- Discrétisation plus riche à cause de la propriété d'orthogonalité ;
- Autant de problème à résoudre que de nœuds mais problèmes simples.

Estimateur d'erreur en résidus implicite (2)

Estimation par éléments

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } e^E \text{ nul sur } \Gamma_U^E \text{ tel que} \\ \int_E \text{Tr}[\varepsilon(e^E) K \varepsilon(v)] d\Omega = \sum_E \int_E r_E v dE - \sum_{\Gamma} \int_{\Gamma} R v d\Gamma \quad \forall v \text{ nul sur } \Gamma_U^E \end{array} \right.$$

$${}^R \eta_E = \int_E \text{Tr}[\varepsilon(e^E) K \varepsilon(e^E)] dE$$

- R densité d'efforts surfaciques ;
- Recherche d'une approximation éléments finis de e^i ;
- Difficulté dans le choix de R ;
- Méthode difficile à utiliser.

Les quantités d'intérêt

- Quantités ayant un sens physique.
- Caractérisées par des fonctionnelles linéaires ou non.

Moyenne sur les déplacements

$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} v_x d\Omega$$

Moyenne sur les contraintes

$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \sigma_{xx} d\Omega$$

Estimateurs d'erreur en quantité d'intérêt

Estimation de la quantité

$$\varepsilon^Q = Q(u) - Q(u^h)$$

➤ Approche générale :

- Considérer un problème de minimisation.
- Trouver une relation entre l'erreur en quantité d'intérêt et le résidu.

➤ Approche linéaire :

- Considérer $Q(\cdot)$ linéaire, $a(\cdot, \cdot)$ bilinéaire.
- Trouver un relation entre l'erreur en quantité d'intérêt et le résidu.

Fonction d'influence et problème dual (1)

Problème fictif

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V \text{ tel que} \\ \mathcal{A}(u; v) = \mathcal{L}(v) & \forall v \in V \end{cases}$$

$\mathcal{A}(\cdot; \cdot)$ forme semi-linéaire et $\mathcal{L}(\cdot)$ forme linéaire.

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V \text{ tel que} \\ Q(u) = \inf_{z \in S} Q(z) \\ \text{où} \\ S = \{z \in V; \mathcal{A}(z; v) = \mathcal{L}(v), \forall v \in V\} \end{cases}$$

**Problème de minimisation
(Becker, Rannacher, 2001)**

**Problème primal pour u et
problème dual pour ω**

$$\begin{cases} \mathcal{A}(u; \tilde{v}) = \mathcal{L}(\tilde{v}) & \forall \tilde{v} \in V \\ \mathcal{A}'(u; v, \omega) = Q'(u; v) & \forall v \in V \end{cases}$$

Fonction d'influence et problème dual (2)

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V_0 \text{ tel que} \\ \mathcal{A}_0(u_0; \tilde{v}) = \mathcal{L}(\tilde{v}) \quad \forall v \in V_0 \end{cases}$$

Problème simplifié utilisant une autre forme semi-linéaire

Problème de minimisation

Trouver $u_0 \in V_0$ tel que

$$Q(u_0) = \inf_{z \in S_0} Q(z)$$

où

$$S_0 = \{z \in V_0; \mathcal{A}_0(z; \tilde{v}) = \mathcal{L}(\tilde{v}), \forall \tilde{v} \in V_0\}$$

$$\begin{cases} \mathcal{A}_0(u_0; \tilde{v}) = \mathcal{L}(\tilde{v}) \quad \forall \tilde{v} \in V_0 \\ \mathcal{A}'_0(u_0; v, \omega_0) = Q'(u_0; v) \quad \forall v \in V_0 \end{cases}$$

Problème primal pour u_0 et problème dual pour ω_0

Fonction d'influence et problème dual (3)

Erreur primale

$$e_0 = u - u_0$$

Erreur duale

$$\varepsilon_0 = \omega - \omega_0$$

$$\begin{cases} \mathcal{R}(u_0; \tilde{v}) = \mathcal{L}(\tilde{v}) - \mathcal{A}_0(u_0; \tilde{v}) & \forall \tilde{v} \in V_0 \\ \bar{\mathcal{R}}(u_0; \omega_0, v) = Q'(u_0; v) - \mathcal{A}'(u_0; v, \omega_0) & \forall v \in V_0 \end{cases}$$

Résidus d'équilibre

$$\varepsilon^Q = Q(u) - Q(u_0) = \mathcal{R}(u_0; \omega) + \Delta \mathcal{A} + \Delta Q$$

(Oden, Prudhomme)

Application au problème d'élasticité linéaire

Forme bilinéaire

$$\mathcal{A}(u; v) = a(u, v) \longrightarrow \mathcal{A}'(u; v, \omega) = a(v, \omega) \longrightarrow \Delta \mathcal{A} = 0$$

Forme linéaire

$$Q'(u; v) = Q(v) \longrightarrow \Delta Q = 0$$

Problèmes primal et dual

$$\begin{cases} a(u, v) = l(v) & \forall v \in V \\ a(v, \omega) = Q(v) & \forall v \in V \end{cases}$$

$$\varepsilon^Q = Q(u) - Q(u_0) = Q(e) = R_h^u(\omega)$$

$$Q(e) = a(e, \varepsilon)$$

Approche linéaire

Relation entre la
quantité d'intérêt et
le résidu

$$Q(u - u^h) = Q(e) = \omega(R_h^u)$$

$$Q(e) = R_h^u(\omega)$$

$$a(u, v) = l(v)$$

$$u = e + u^h$$

$$a(e, v) = R_h^u(v)$$

$$Q(e) = a(e, \omega)$$

$$Q(e) = a(e, \varepsilon) = \frac{1}{4} \|s e + s^{-1} \varepsilon\|_e^2 - \frac{1}{4} \|s e - s^{-1} \varepsilon\|_e^2$$

Utilisation de l'estimateur d'erreur en résidus explicite (1)

- Besoin d'estimer la norme en énergie de la somme ou la différence de deux termes.
- Estimation directe de la norme en énergie de l'erreur à partir de la norme des seconds membres.

$$\cancel{a(e, v) = R_h^u(v)}$$

$$\|e\|_e^2$$

$$a(se + s^{-1}\varepsilon, v) = (sR_h^u + s^{-1}R_h^\omega)(v)$$

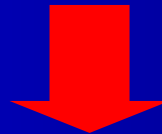
$$\|se + s^{-1}\varepsilon\|_e^2$$

$$a(se - s^{-1}\varepsilon, v) = (sR_h^u - s^{-1}R_h^\omega)(v)$$

$$\|se - s^{-1}\varepsilon\|_e^2$$

Utilisation de l'estimateur d'erreur en résidus explicite (2)

~~$$\eta_E^2 = h_E^2 \|r_E\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \in \Gamma_F} l_\Gamma \|t_\Gamma\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \in \Gamma_F} l_\Gamma \|t_\Gamma\|_{L^2(\Gamma)}^2$$~~

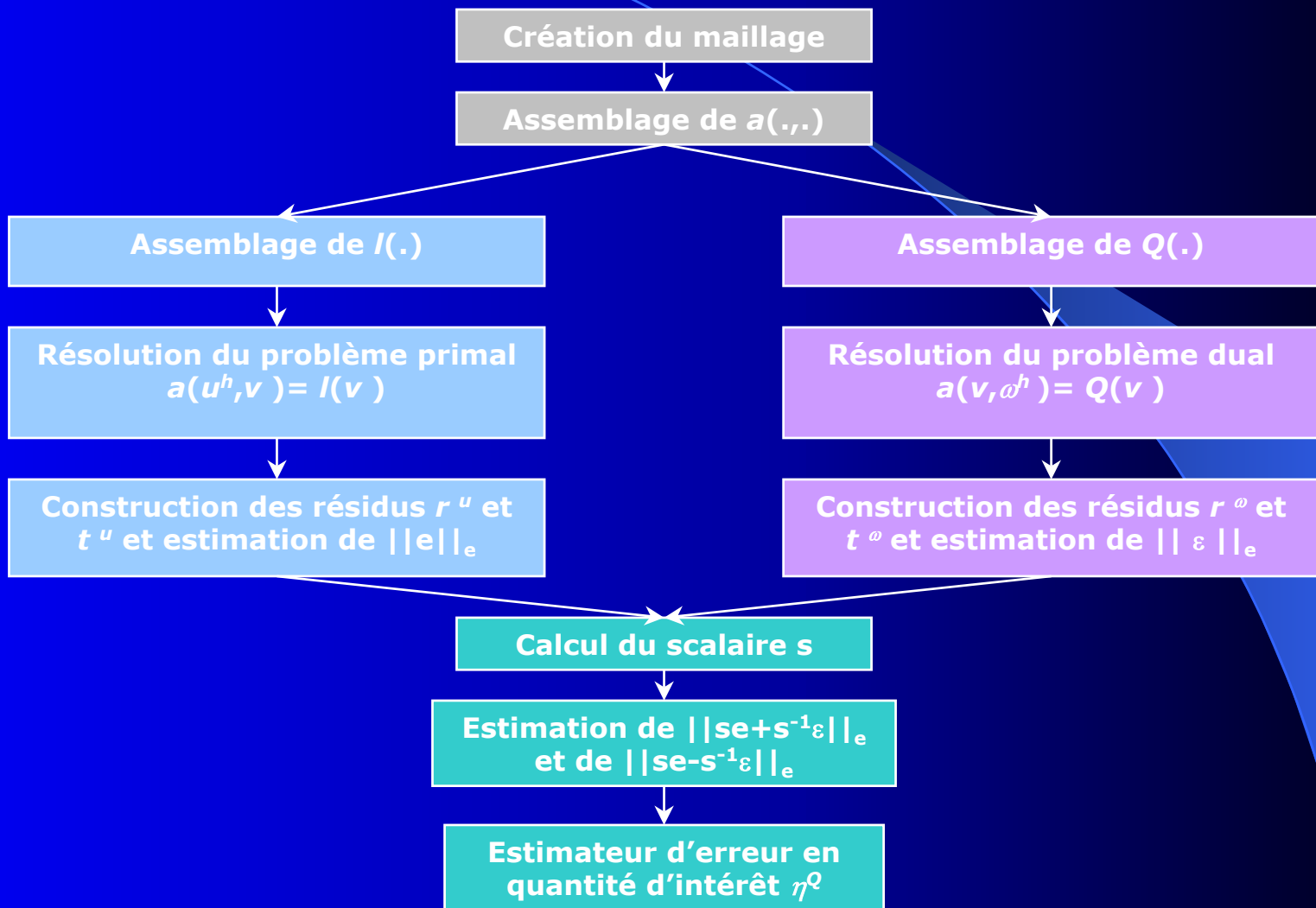


$$\eta_E^{+2} = h_E^2 \|s r_E^u + s^{-1} r_E^\omega\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \in \Gamma_F} l_\Gamma \|s t_\Gamma^u + s^{-1} t_\Gamma^\omega\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \in \Gamma_F} l_\Gamma \|s t_\Gamma^u + s^{-1} t_\Gamma^\omega\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

$$\eta_E^{-2} = h_E^2 \|s r_E^u - s^{-1} r_E^\omega\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \in \Gamma_F} l_\Gamma \|s t_\Gamma^u - s^{-1} t_\Gamma^\omega\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \in \Gamma_F} l_\Gamma \|s t_\Gamma^u - s^{-1} t_\Gamma^\omega\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

$$\eta_E^0 = \frac{1}{4} \eta_E^{+2} - \frac{1}{4} \eta_E^{-2}$$

Synthèse de la méthode



Mise en œuvre dans *Code_Aster* Quantité d'intérêt « déplacements »

$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} v_x d\Omega$$

$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} v_x d\Omega = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} f \cdot v d\Omega \quad \text{avec } f = (1, 0, 0)$$

- Utiliser la quantité d'intérêt « déplacement » revient à imposer comme chargement du problème dual un effort volumique (ou surfacique) unité dans la direction souhaitée ;
- Utilisation des chargements efforts volumiques, surfaciques.

Mise en œuvre dans *Code_Aster* Quantité d'intérêt « contraintes »

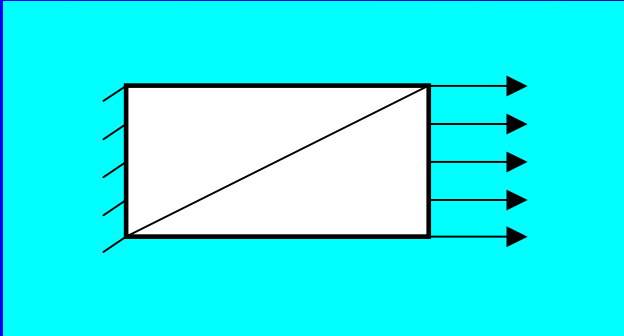
$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \sigma_{xx} d\Omega$$

$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \sigma_{xx} d\Omega = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} A : \sigma(v) d\Omega = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} A : K : \varepsilon(v) d\Omega$$

$$\int_{\omega} A : K : B(v) d\Omega = \sum_E \sum_g A_{ij} K_{ijkl} B_{kl} \omega_g$$

- Utiliser la quantité d'intérêt « contraintes » nécessite la connaissance de :
 - Matrice A, choix de la composante du tenseur des contraintes ;
 - Opérateur K, loi de comportement ;
 - Matrice B, matrice des dérivées des fonctions de forme.
- Possibilité d'utiliser le chargement déformation initiale dans *Code_Aster*.

Tests de validation informatique



- Calcul « à la main » de chaque terme de l'erreur sur un exemple simple (2 ou 3 éléments) ;
- Comparaison de l'erreur à une valeur connue.

➤ Principe :

- Point de départ : Contraintes aux nœuds par éléments fournies par *Code_Aster* ;
- Calcul des fonctions de forme et dérivées des fonctions de forme ;
- Calcul des intégrations numériques pour chacun des termes ;
- Calcul de l'estimateur global.

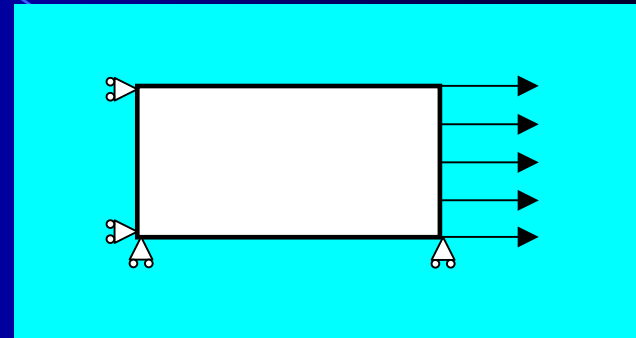
➤ Principe :

- Le problème dual est artificiellement le problème primal ;
- L'erreur en quantité d'intérêt doit être égale à la norme en énergie de l'erreur.

Tests de validation mécanique (1)

Validation de l'estimateur en résidu, cas de la traction pure :

- Le tenseur des contraintes est constant ;
- L'erreur est nulle.

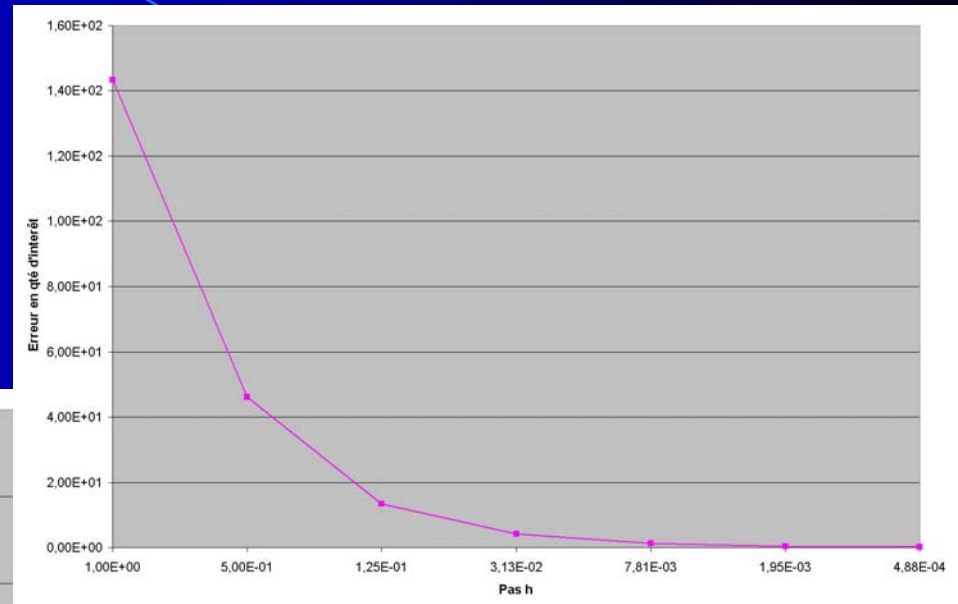
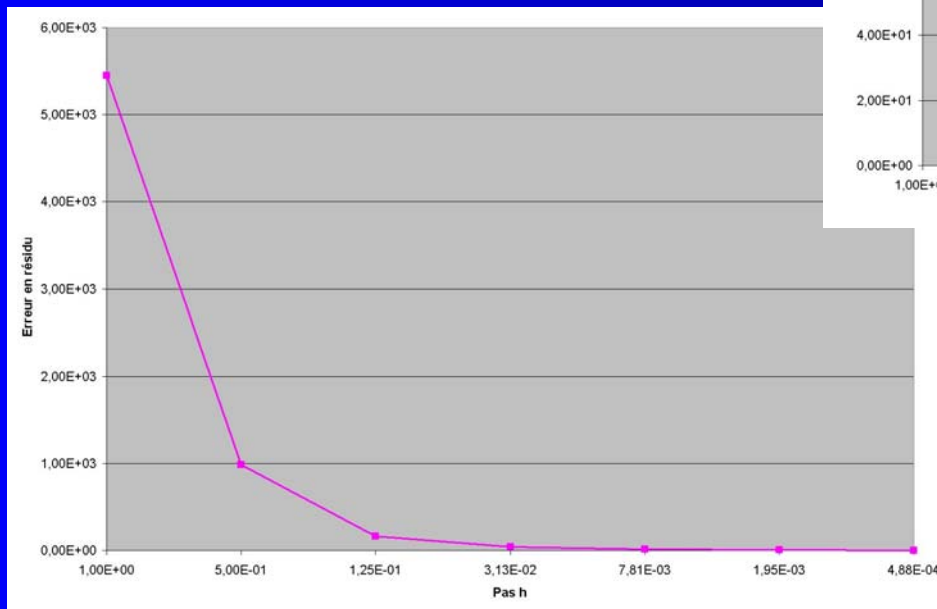


A venir : Comparaison avec une solution analytique :

- Permet de savoir si l'estimateur sur-estime ou sous-estime l'erreur ;
- Calcul d'un indice d'effectivité (rapport entre erreur vraie et erreur calculée).

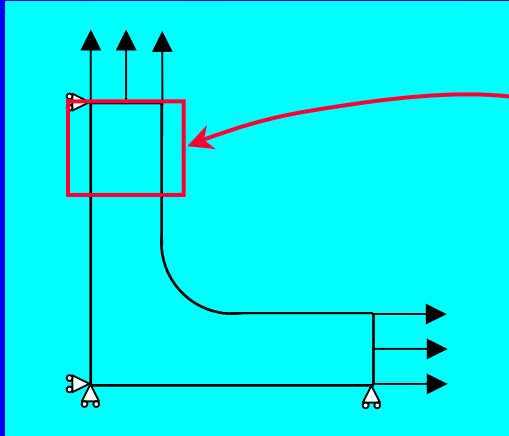
Tests de validation mécanique (2)

- Erreur en résidu en fonction du pas h du maillage
- Erreur en quantité d'intérêt déplacement selon y en fonction du pas du maillage.



Dans les deux cas l'erreur diminue en fonction du pas du maillage → valable comme critère de remaillage.

Un exemple : bi-traction sur une éprouvette



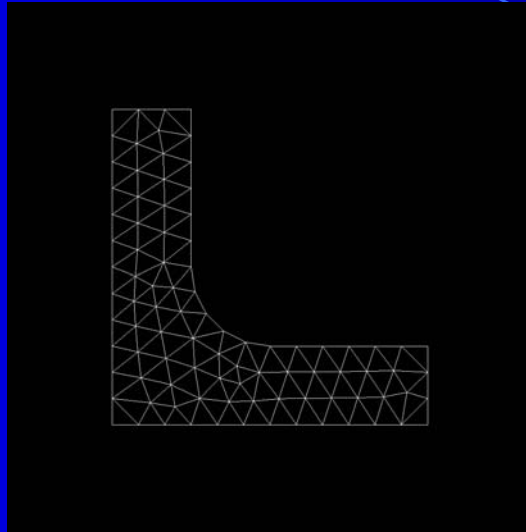
Domaine de définition de la quantité d'intérêt.

Deux quantités d'intérêt :

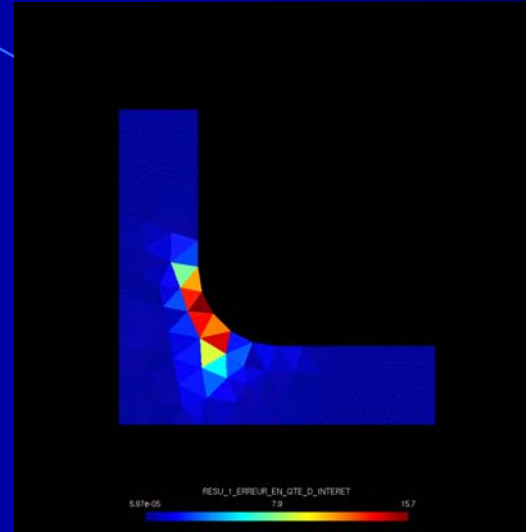
- Moyenne du déplacement selon la direction y ;
- Moyenne de la contrainte selon la composante yy .

Quantité d'intérêt déplacement

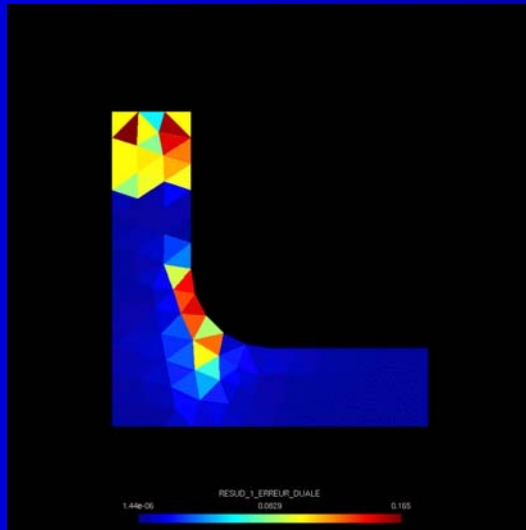
Maillage



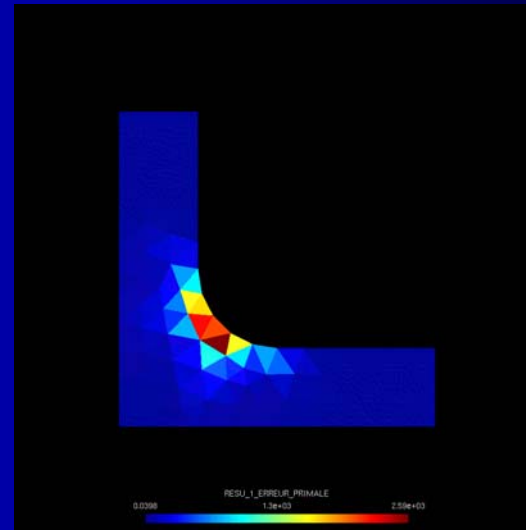
Erreur en quantité d'intérêt



Problème dual : erreur en résidu

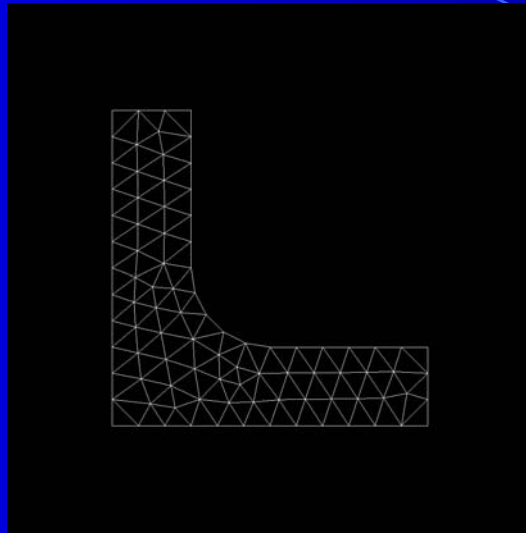


Problème primal : erreur en résidu

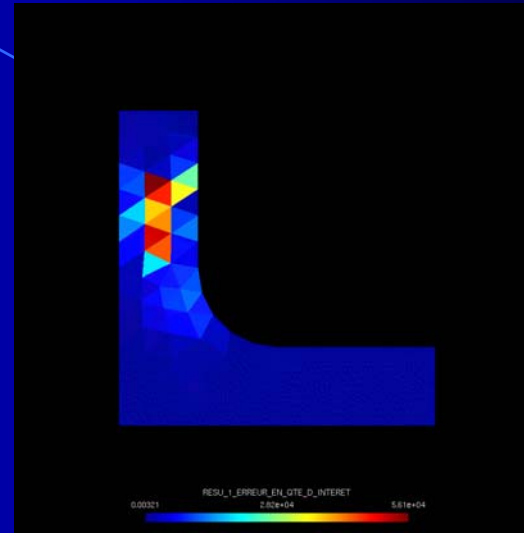


Quantité d'intérêt contrainte

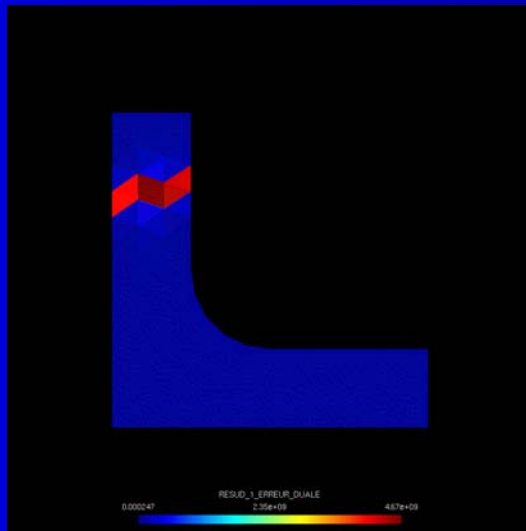
Maillage



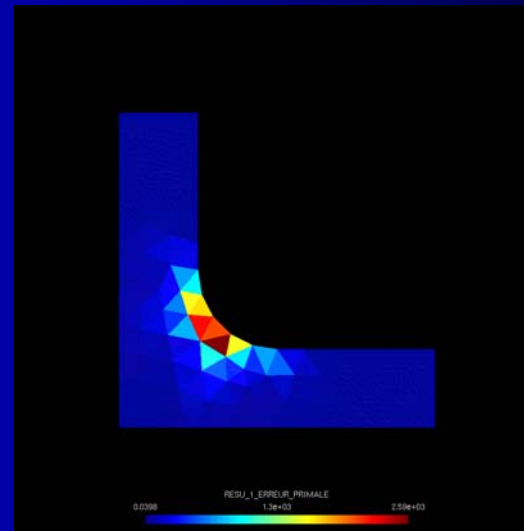
Erreur en quantité d'intérêt



Problème dual : erreur en résidu



Problème primal : erreur en résidu



Perspective : une nouvelle quantité d'intérêt

➤ Mécanique de la rupture :

- Autour d'une fissure : zone singulière ;
- Dans cette zone, singularité du champ de contrainte en $r^{-1/2}$;
- Intensité de la singularité caractérisé par K_I, K_{II}, K_{III} , les facteurs d'intensité de contraintes.

➤ Une expression de K donné par : $K = \frac{2}{r_m^2} \int_{\Gamma} (U_+ - U_-) v \sqrt{r} dr$

$$Q(v) = K(v) = \frac{2}{r_m^2} \left(\int_{\Gamma^+} \underbrace{(U^+ \sqrt{r})}_{F^+} v d\Gamma - \int_{\Gamma^-} \underbrace{(U^- \sqrt{r})}_{F^-} v d\Gamma \right)$$

Perspectives générales

- **Calcul de taux d'efficacité ;**
- **Comportement en présence de singularités ;**
- **Développement de nouvelles quantités d'intérêt et en particulier des quantités non linéaires (contrainte de Von Mises, taux de restitution de l'énergie G) ;**
- **Développement et implémentation d'un estimateur en résidu implicite ;**
- **Bornes pour l'estimateur en quantité d'intérêt ;**