# 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**

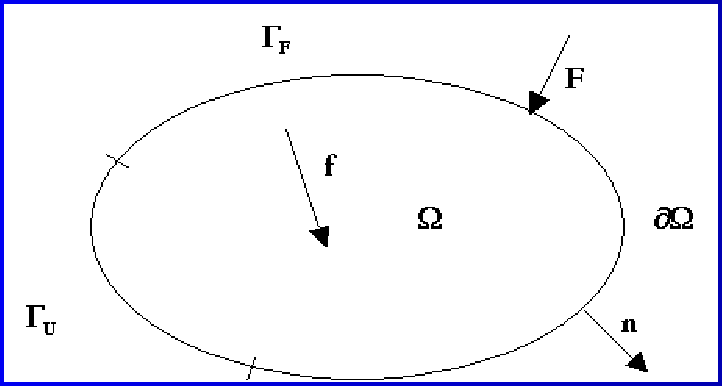
**[2] LTI, Université de Picardie**

# 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

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

## Formulation variationnelle du problème

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

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

## Problème discrétisé

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



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

# Estimateurs d'erreur « classiques »

**Estimation globale de l'erreur (normes L², normes en énergie, etc.) ➔ trois démarches :**

- **<u>Estimateurs d'erreur en relation de comportement</u> (Ladevèze, 1975)**
  - **Construction d'un couple admissible déplacement-contrainte ;**
  - **Erreur en relation de comportement :** $_{RdC} = \hat{\sigma} - K\,\varepsilon(\hat{u})$
- **<u>Estimateurs d'erreur en résidus d'équilibre</u> (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.** $e = u - u^h$
- **<u>Estimateurs d'erreur en contrainte lissée</u> (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 :** $^2 = \int_\Omega (\tilde{\sigma}_h - \sigma_h)^T K^{-1} (\tilde{\sigma}_h - \sigma_h)\, d\Omega$

# Les résidus d'équilibre

**Résidu global = Source d'erreur**

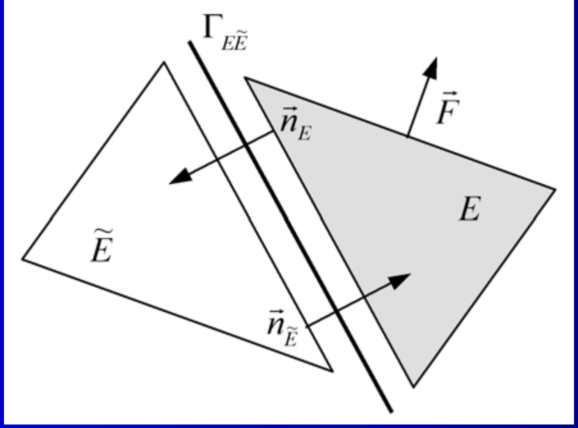
$$R_h^u(v) = l(v) - a\left(u^h, v\right)$$

**Mesure la non-vérification des équations d'équilibre.**

**Résidu intérieur**

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

**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.

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

- <u>Estimateurs explicites</u> : Utilisation directe de la relation précédente.
- <u>Estimateurs implicites</u> : Utilisation d'approximation de la relation précédente obtenus par résolution de problèmes locaux par éléments ou par patchs.

# Estimateur d'erreur en résidus explicite

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

$$ {}^R\eta_E = h_E \left\| r_E \right\|_{L^2(E)} + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \not\subset \Gamma_F} l_\Gamma^{\frac{1}{2}} \left\| t_\Gamma \right\|_{L^2(\Gamma)} + \sum_{\Gamma \subset \Gamma_F} l_\Gamma^{\frac{1}{2}} \left\| t_\Gamma \right\|_{L^2(\Gamma)} $$

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

$$ {}^R\eta_E^2 = h_E^2 \left\| r_E \right\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \not\subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| t_\Gamma \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| t_\Gamma \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 $$

- **Estimateurs programmés dans *Code_Aster*®**

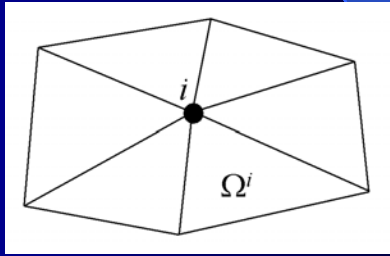

J. DELMAS, P. COOREVITS, P. BADEL, M. GUESSASMA

# Estimateur d'erreur en résidus implicite (1)

## Estimation par patchs d'éléments

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

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




- **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.**



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

# Estimateur d'erreur en résidus implicite (2)

## Estimation par éléments

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

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

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



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

# 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**

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


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

# Estimateurs d’erreur en quantité d’intérêt

**Estimation de la quantité**

$$\varepsilon^{Q} = Q(u) - Q\left(u^{h}\right)$$

- **<u>Approche générale</u> :**
  - **Considérer un problème de minimisation.**
  - **Trouver une relation entre l’erreur en quantité d’intérêt et le résidu.**
- **<u>Approche linéaire</u> :**
  - **Considérer Q(.) linéaire, a(.,.) bilinéaire.**
  - **Trouver un relation entre l’erreur en quantité d’intérêt et le résidu.**



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

# Fonction d'influence et problème dual (1)

**Problème fictif**

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

**A(.;.) forme semi-linéaire et L(.) forme linéaire.**

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

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

**Problème primal pour *u* et problème dual pour $\omega$**

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



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

# Fonction d'influence et problème dual (2)

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

**Problème simplifié utilisant une autre forme semi-linéaire**

**Problème de minimisation**

$$\begin{aligned} &Trouver\ u_0 \in V_0\ tel\ que \\ &Q\left(u_0\right) = \inf_{z \in S_0} Q\left(z\right) \\ &où \\ &S_0 = \left\{ z \in V_0;\ \mathcal{A}_0\left(z;\tilde{v}\right) = \mathcal{L}\left(\tilde{v}\right), \forall\, \tilde{v} \in V_0 \right\} \end{aligned}$$

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

**Problème primal pour $u_0$ et problème dual pour $\omega_0$**



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

# Fonction d'influence et problème dual (3)

**Erreur primale**

$$e_0 = u - u_0$$

**Erreur duale**

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

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

**Résidus d'équilibre**

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

**(Oden, Prudhomme)**



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

# Application au problème d'élasticité linéaire

**Forme bilinéaire**

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

**Forme linéaire**

$Q'(u;v) = Q(v)$ → $\Delta Q = 0$

**Problèmes primal et dual** →

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

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

$$\boxed{Q(e) = a(e,\varepsilon)}$$



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

# Approche linéaire

**Relation entre la quantité d'intérêt et le résidu**

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

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

$$a\left(u,v\right)=l\left(v\right)$$

$$u=e+u^h$$

$$a\left(e,v\right)=R_h^u\left(v\right)$$

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

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



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

# 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.

$$\cancel{a(e,v)=R_h^u(v)} \longrightarrow \|e\|_e^2$$

$$\Downarrow$$

$$a\left(s\,e+s^{-1}\varepsilon,v\right)=\left(s\,R_h^u+s^{-1}R_h^\omega\right)(v) \longrightarrow \left\|s\,e+s^{-1}\varepsilon\right\|_e^2$$

$$a\left(s\,e-s^{-1}\varepsilon,v\right)=\left(s\,R_h^u-s^{-1}R_h^\omega\right)(v) \longrightarrow \left\|s\,e-s^{-1}\varepsilon\right\|_e^2$$


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

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

$$\cancel{\eta_E^2 = h_E^2 \left\| r_E \right\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \not\subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| t_\Gamma \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| t_\Gamma \right\|_{L^2(\Gamma)}^2}$$

$$\eta_E^{+\,2} = h_E^2 \left\| s\, r_E^u + s^{-1} r_E^\omega \right\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \not\subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| s\, t_\Gamma^u + s^{-1} t_\Gamma^\omega \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| s\, t_\Gamma^u + s^{-1} t_\Gamma^\omega \right\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

$$\eta_E^{-\,2} = h_E^2 \left\| s\, r_E^u - s^{-1} r_E^\omega \right\|_{L^2(E)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\Gamma \not\subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| s\, t_\Gamma^u - s^{-1} t_\Gamma^\omega \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \sum_{\Gamma \subset \Gamma_F} l_\Gamma \left\| s\, t_\Gamma^u - s^{-1} t_\Gamma^\omega \right\|_{L^2(\Gamma)}^2$$

$$\boxed{\eta_E^Q = \frac{1}{4} \eta_E^{+\,2} - \frac{1}{4} \eta_E^{-\,2}}$$



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

# Synthèse de la méthode

**Création du maillage**

↓

**Assemblage de *a*(.,.)**

| | |
|---|---|
| **Assemblage de *l*(.)** | **Assemblage de *Q*(.)** |
| ↓ | ↓ |
| **Résolution du problème primal** $a(u^h, v) = l(v)$ | **Résolution du problème dual** $a(v, \omega^h) = Q(v)$ |
| ↓ | ↓ |
| **Construction des résidus** $r^u$ **et** $t^u$ **et estimation de** $\|\|e\|\|_e$ | **Construction des résidus** $r^\omega$ **et** $t^\omega$ **et estimation de** $\|\| \varepsilon \|\|_e$ |

**Calcul du scalaire s**

↓

**Estimation de** $||se+s^{-1}\varepsilon||_e$ **et de** $||se-s^{-1}\varepsilon||_e$

↓

**Estimateur d'erreur en quantité d'intérêt** $\eta^Q$



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

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

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

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

- **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.**


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

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

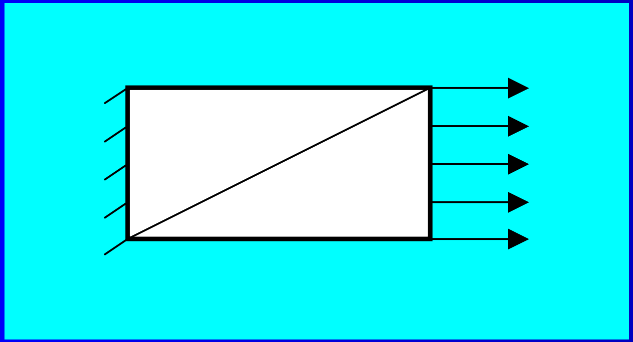
$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|}\int_{\omega} \sigma_{xx}\, d\Omega$$

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

$$\int_{\omega} A:K:B(v)\, d\Omega = \sum_{E}\sum_{g} A_{ij} K_{ijkl} B_{kl}\, \omega_g$$

- **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 :**
  - o Point de départ : Contraintes aux nœuds par éléments fournies par *Code_Aster* ;
  - o Calcul des fonctions de forme et dérivées des fonctions de forme ;
  - o Calcul des intégrations numériques pour chacun des termes ;
  - o Calcul de l'estimateur global.
- **Principe :**
  - o Le problème dual est artificiellement le problème primal ;
  - o L'erreur en quantité d'intérêt doit être égale à la norme en énergie de l'erreur.

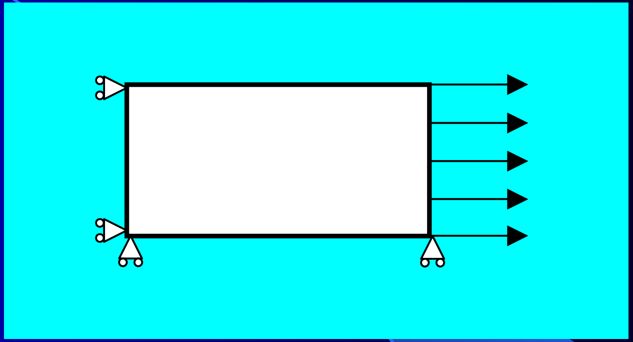


J. DELMAS, P. COOREVITS, P. BADEL, M. GUESSASMA

# 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.**

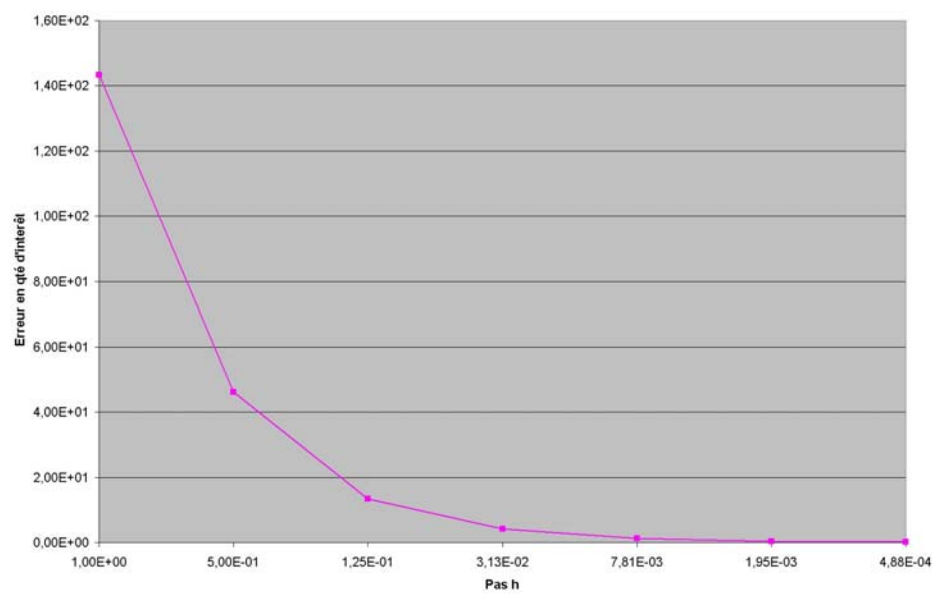


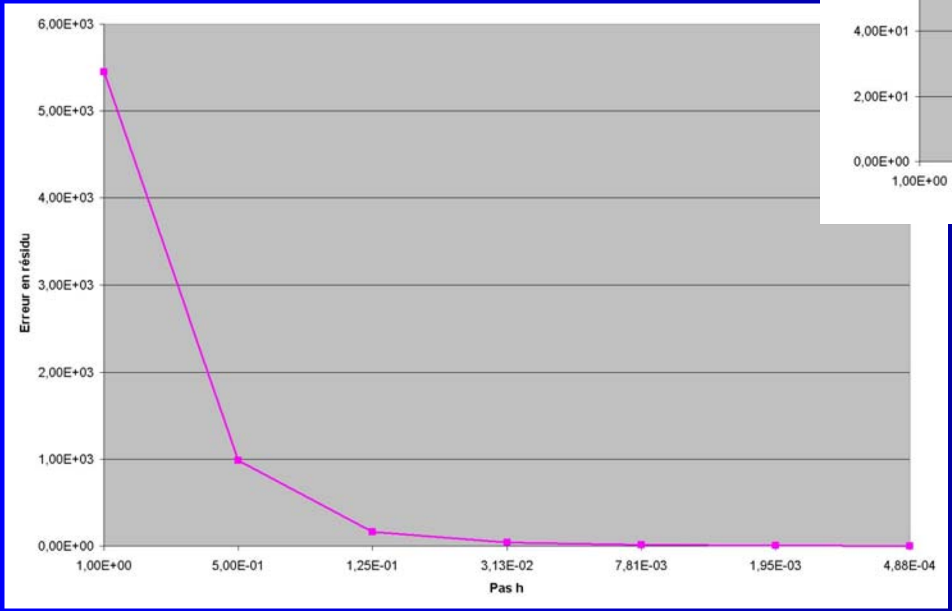
**A venir : Comparaison avec une solution analytique :**

- **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)

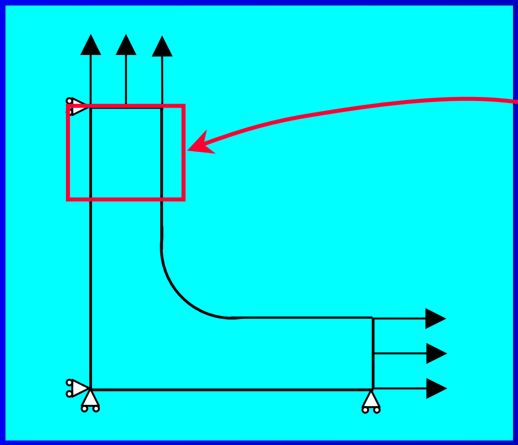
- Erreur en résidu en fonction du pas h du maillage
- Erreur en quantité d'intérêt déplacement selon y en fonction du pas du maillage.




**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



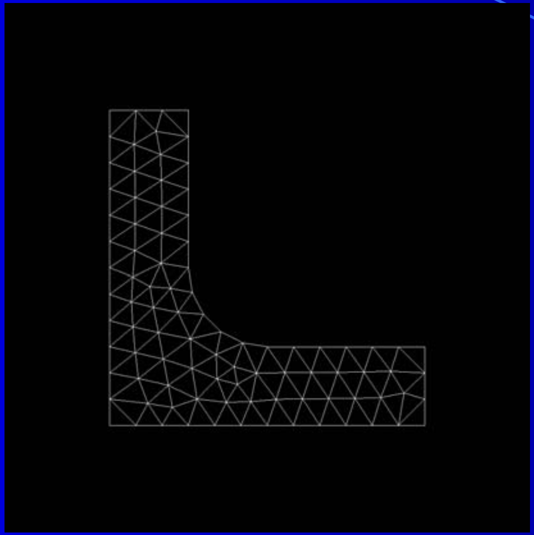
**Domaine de définition de la quantité d'intérêt.**

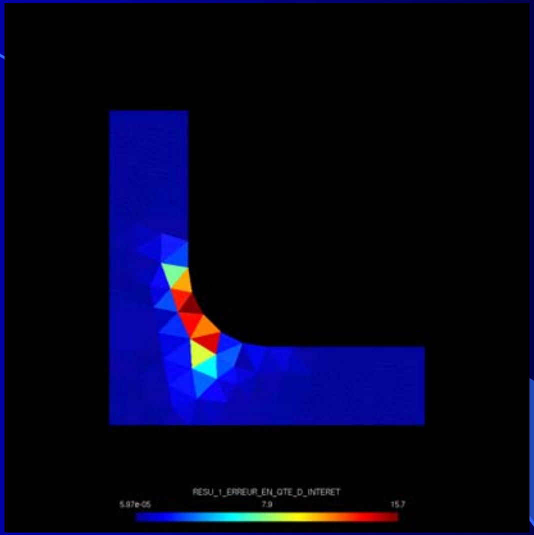
**Deux quantités d'intérêt :**

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

# Quantité d'intérêt déplacement

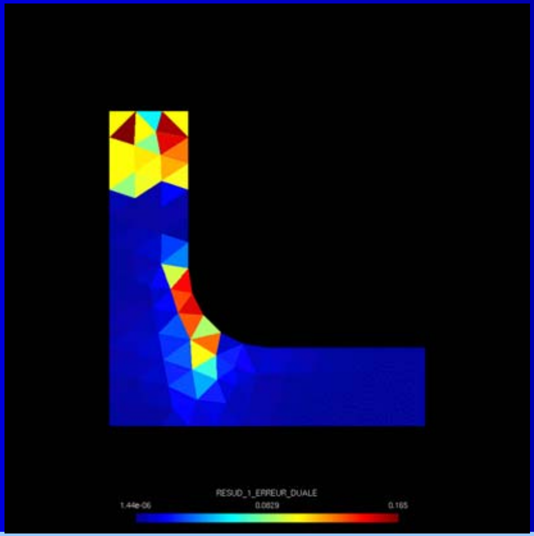
**Maillage**

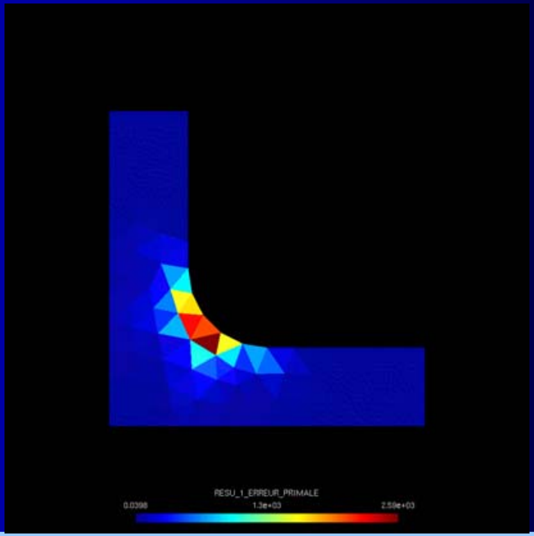





**Erreur en quantité d'intérêt**

**Problème dual : erreur en résidu**

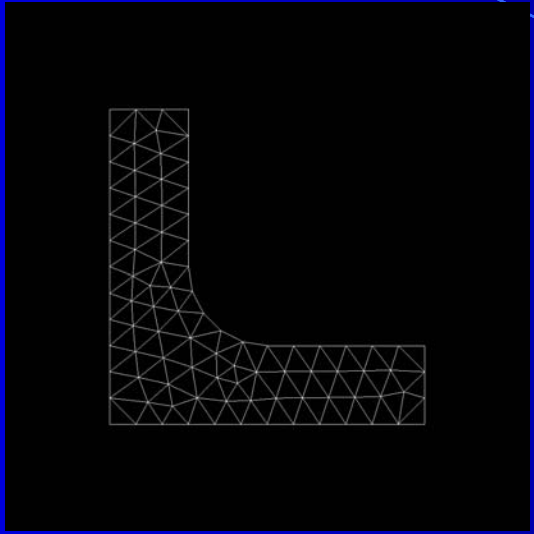


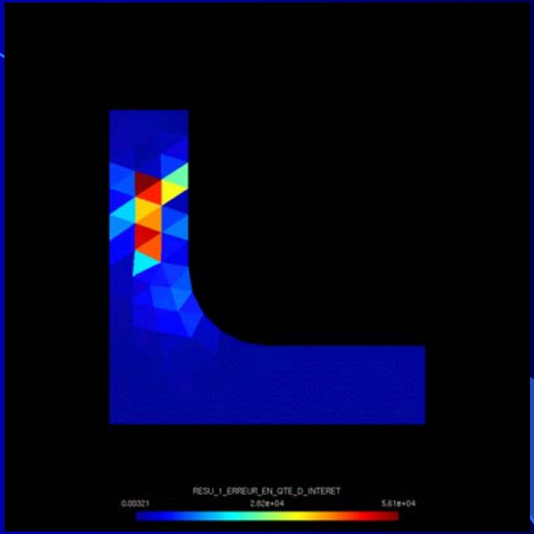




**Problème primal : erreur en résidu**

# Quantité d'intérêt contrainte

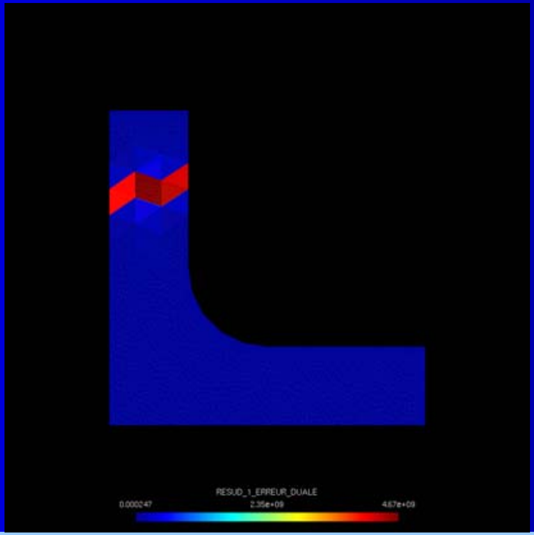
Maillage

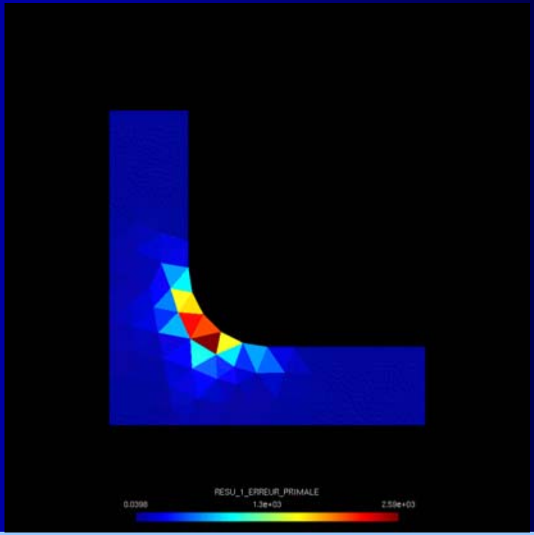





Erreur en quantité d'intérêt

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 :** $K = \frac{2}{r_m^2}\int_\Gamma (U_+ - U_-) v \sqrt{r}\, dr$

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



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

# 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 ;



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