Détection des singularités et calcul d'une carte de taille d'éléments

Résumé :

On propose ici une méthode qui vise à améliorer le traitement des singularités dans les stratégies d'adaptation de maillage avec le logiciel HOMARD (dans le cas du raffinement) ou avec le logiciel GMSH (cas du remaillage). Ce mécanisme permet, d'une part de détecter les éléments finis connectés à des zones singulières et d'autre part d'obtenir, pour une erreur globale donnée, la taille des éléments finis du nouveau maillage en cas de remaillage.
Cette fonctionnalité est accessible dans la commande CALC_ERREUR par les options de calcul SING_ELEM (champ constant par élément) ou SING_ELNO (champ aux nœuds par élément). Cette option est valable uniquement en mécanique. Il faut avoir calculé préalablement un estimateur d'erreur en mécanique et l'énergie de déformation sur chaque élément. En toute rigueur, cette méthode n'est valable qu'en élasticité.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Table des matières

1 Introduction....3
2 Détection des singularités....4
2.1 Principe de la méthode....4
2.2 Détection des nœuds singuliers....4
2.3 Evaluation de l'ordre de la singularité....5
2.3.1 Cas de la dimension 2....6
2.3.2 Cas de la dimension 3....6
2.4 Extension aux zones de concentration de contraintes....7
3 Construction d'un maillage optimal....8
3.1 Généralités....8
3.2 Définition de l'optimalité....8
3.3 Détermination d'un maillage optimal....8
3.4 Estimateurs d'erreur « classiques »....9
3.4.1 Cas de la solution régulière....9
3.4.2 Cas des zones singulières....11
3.5 Estimateurs d'erreur en quantités d'intérêt....12
3.5.1 Cas de la solution régulière....12
3.5.2 Cas des zones singulières....13
4 Utilisation dans Code_Aster....14
4.1 Les commandes....14
4.2 Périmètre d'utilisation....15
5 Bibliographie....16
6 Description des versions du document....16

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Introduction

L'objectif de l'option proposée ici est d'améliorer le traitement des singularités dans les stratégies d'adaptation de maillage proposées dans le Code_Aster . En effet, la présence de singularités (présentes en pratique dans tout calcul de structures réelles par éléments finis) implique deux sortes de difficultés que l'on qualifiera ici de « théoriques » et de « pratiques ».

Les difficultés « théoriques » viennent du fait que la contribution à l'erreur en énergie des éléments touchant une singularité est de la forme $C h^{\alpha}$ (C une constante, h la taille de l'élément et α l'ordre de la singularité) tandis que la contribution des éléments hors singularité est de la forme $C h^{q}$ (q dépendant uniquement du degré d'interpolation des fonctions de forme de l'élément). L'adaptation du maillage doit prendre en compte cette différence pour être le plus efficace possible. Par exemple, pour diviser la contribution de l'erreur par 4, il faudra prendre des éléments 16 fois plus petits dans le cas d'une fissure ($\alpha=1/2$) et des éléments 2 fois plus petits dans le cas hors fissure avec des éléments quadratiques ($p=2$).

Les difficultés « pratiques » viennent du fait que, dans des zones de singularités, les contributions à l'erreur en énergie sont importantes. Si l'on vise à obtenir une erreur en énergie faible, il faut donc raffiner très fortement ces zones. Or, on peut s'interroger sur l'influence de ces erreurs en énergie sur des quantités physiques qui intéressent l'ingénieur (déplacement en tel point, contrainte maximum dans telle zone sensible, etc…). Autrement dit, ce n'est pas parce que les zones de singularités provoquent des erreurs importantes sur l'énergie qu'elles ont une grande influence sur le calcul en dehors de ces zones. **En pratique, les estimateurs d'erreur désignent rapidement les seules zones de singularités comme étant à raffiner : les zones de singularités masquent les autres erreurs, par exemple une zone à fort gradient que l'on souhaiterait raffiner.**

Le Laboratoire de Mécanique et CAO de Saint-Quentin a mis au point une méthode permettant, d'une part, de détecter les singularités, et d'autre part, de déterminer, pour une erreur globale donnée, la taille des éléments finis du nouveau maillage en cas de remaillage.

L'utilisation de ces deux informations peut être envisagée sous deux angles :

- Les éléments finis considérés comme « singuliers » par la méthode peuvent être exclus du processus de découpage,
- la nouvelle taille des éléments finis est donnée à un remailleur pour que celui-ci construise le nouveau maillage en respectant au mieux cette nouvelle carte de taille. Actuellement, le logiciel HOMARD découpe une fois l'élément (par exemple en 2D, un triangle est divisé en 4 mais pas plus). Pour continuer le découpage, il faut faire appel de nouveau à HOMARD. Une évolution est donc à prévoir pour qu'on puisse diviser plusieurs fois un élément et ainsi respecter au mieux la carte de taille du nouveau maillage. Il est toutefois possible d'utiliser le mailleur libre GMSH qui prend directement une carte de taille en entrée.

Remarque :

> *Ce document reprend pour l'ensemble la note issue d'un CRECO entre le LMCAO et le département AMA dont la référence est citée en bibliographie ([bib1]).*

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Détection des singularités

2.1 Principe de la méthode

Lorsque la solution exacte du problème étudié présente des singularités, l'ordre de convergence de la solution éléments finis est modifié et donc aussi celui de l'estimateur d'erreur. Considérons, par exemple, un problème d'élasticité plane discrétisé avec des éléments triangulaires de degré p.
Si la solution exacte U_{ex} est régulière, on sait que ([bib2], [bib3]) :

$$\|u-u_h\|_\Omega=\|e\|_\Omega\leq C\,h^p \qquad \text{éq 2.1-1}$$

Où $\|e\|_\Omega\leq C\,h^p$ est la contribution à l'erreur en énergie, soit :

$$\|e\|_\Omega\leq\frac{1}{2}\int_\Omega \varepsilon\left(e_h\right)\ K\ \varepsilon\left(e_h\right)d\,\Omega \qquad \text{éq 2.1-2}$$

Par contre, si la solution exacte présente une singularité, par exemple si, localement au voisinage d'un point M_0, le champ de déplacement est de la forme (avec r et θ coordonnées polaires au voisinage du point M_0) :

$$U_{ex}=r^\alpha V\left(\theta\right)+W\quad avec\quad 0<\alpha<1 \qquad \text{éq 2.1-3}$$

Alors, on montre que [Strang & Fix, 1976] :

$$\|e_h\|_\Omega\leq C\,h^\alpha \qquad \text{éq 2.1-4}$$

Il en résulte que le taux de convergence de l'erreur globale en énergie devient indépendant du degré p des éléments finis utilisés et il en est de même de celui de la mesure de l'erreur (par exemple, si $p=1\text{ ou }2$ alors $\alpha=1/2$ pour une fissure).

Afin d'obtenir une bonne prédiction des maillages optimisés, les constatations précédentes nous conduisent à utiliser un taux de convergence q_E par élément tel que l'estimateur d'erreur ε_E vérifie :

$$\varepsilon_E=O\left(h^{q_E}\right) \qquad \text{éq 2.1-5}$$

Une façon simple de définir ces coefficients locaux consiste à prendre :

- $q_E=\alpha$ si l'élément E est connecté à une singularité d'ordre α ;
- $q_E=q$ pour tous les autres éléments finis où q ne dépend que du type d'éléments finis utilisés.

La méthode présentée par la suite comporte donc trois phases :

- détection des zones singulières, en l'occurrence les nœuds singuliers du maillage ;
- évaluation numérique du coefficient q_E pour les éléments connectés aux nœuds considérés comme singuliers (pour les autres éléments, on fixe alors $q_E=q$) ;
- calcul du coefficient de modification de taille r_E.

2.2 Détection des nœuds singuliers

L'idée est d'utiliser les erreurs locales. En effet, les expériences montrent que ces erreurs locales présentent un pic au voisinage d'une singularité. Pour chaque nœud i du maillage, on compare donc

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

l'erreur moyenne $\bar{m}^i$ des éléments connectés au nœud i à l'erreur moyenne $\bar{M}$ sur l'ensemble de la structure. Le nœud i est considéré comme singulier si :

$$\bar{m}^i \geq \beta \bar{M} \qquad \text{éq 2.2.1-1}$$

avec

$$\bar{m}^i = \sqrt{\frac{\sum_{\text{E connecté à i}} \varepsilon_E^2}{\sum_{\text{E connecté à i}} mes(E)}} \text{ et } \bar{M} = \sqrt{\frac{\sum_{\text{E}\in\text{ structure}} \varepsilon_E^2}{\sum_{\text{E}\in\text{structure}} mes(E)}} \qquad \text{éq 2.2.1-2}$$

où β est un coefficient plus grand que 1 et $mes(E)$ la surface en 2D ou le volume en 3D de l'élément E. Les expériences numériques ont montré que les nœuds singuliers sont bien détectés en fixant $\beta = 2$ en dimension 2, $\beta = 3$ en dimension 3 pour des éléments finis linéaires et $\beta = 2$ en dimension 3 pour des éléments finis quadratiques.

Remarque 1 :

D'un point de vue numérique, la détection des nœuds singuliers diffère entre les cas 2D et 3D. Les conditions données par la suite pour cette détection ne sont pas basées sur une théorie particulière mais plutôt sur l'expérience acquise dans ce domaine par le Laboratoire de Mécanique et CAO de Saint-Quentin.

En 2D : un nœud i est considéré comme singulier s'il remplit les 3 conditions suivantes :

$$\bar{m}_1^i \geq \beta \bar{M}$$
$$\bar{m}_1^i \geq \bar{m}_2^i \qquad \text{éq 2.2.1-3}$$
$$\bar{m}_1^i \geq 3 \operatorname{Min}\left(\bar{m}_2^i, \bar{m}_3^i\right)$$

Où $\bar{m}_1^i$, $\bar{m}_2^i$ et $\bar{m}_3^i$ sont les moyennes de l'erreur pour les éléments appartenant aux couches 1, 2 et 3, respectivement, par rapport au nœud i considéré.

Les couches sont définies comme suit :

Couche 1 : éléments qui possèdent le nœud i à tester,
Couche 2 : éléments en contact (face, arête ou nœud) avec un élément de la couche 1,
Couche 3 : éléments en contact (face, arête ou nœud) avec un élément de la couche 2.

En 3D : le nœud i est considéré comme singulier s'il remplit la condition $\bar{m}_1^i \geq \beta \bar{M}$ et si l'un des nœuds connectés au nœud i considéré remplit la condition $\bar{m}_i^{\text{Noeud connecté à i}} \geq \beta \bar{M}$. Contrairement au cas 2D, le nœud i est singulier uniquement si l'un de ses voisins l'est aussi (on oublie les nœuds singuliers isolés pour ne garder que les arêtes singulières).

Remarque 2 :

En 2D, seuls les nœuds sommets sont examinés. En 3D, seuls les nœuds sommets situés sur un bord de la structure sont examinés (uniquement pour des raisons de temps calcul ; cette condition pourrait donc être modifiée).

2.3 Evaluation de l'ordre de la singularité

Pour chaque nœud singulier i détecté, l'ordre de la singularité, c'est-à-dire la valeur de q_E qui sera utilisée pour les éléments connectés au nœud i, est déterminé en identifiant la valeur de la densité d'énergie de la solution éléments finis au voisinage du nœud i avec la valeur théorique au voisinage d'un point singulier.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2.3.1 Cas de la dimension 2

Dans ce cas, on calcule l'énergie éléments finis moyenne, dans des disques A de centre i et de rayon r :

$$\bar{e}_h(r)=\frac{1}{2\,mes(A)}\int_A \varepsilon(u_h)\ K\ \varepsilon(u_h)\,dA \qquad \text{éq 2.3.1-1}$$

En identifiant, par une méthode de moindres carrés, cette énergie moyenne avec la valeur théorique au voisinage d'une singularité d'ordre α :

$$e(r)=k\,r^{2(\alpha-1)}+c \qquad \text{éq 2.3.1-2}$$

on obtient numériquement une valeur $\bar{\alpha}$ proche de α .

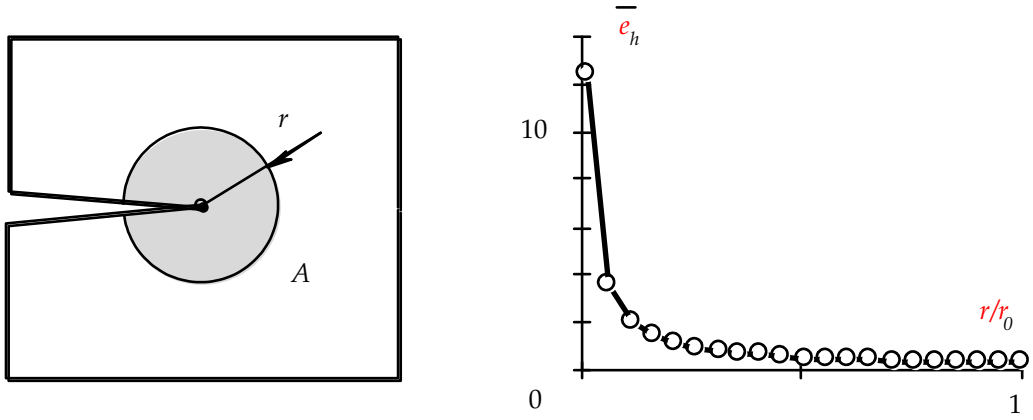


Figure 2.3.1-a : Evaluation numérique de α

En pratique les expériences numériques montrent qu'il suffit d'effectuer l'identification dans une zone correspondant à 3 couches d'éléments autour du point singulier et d'évaluer $\bar{e}^h(r)$ pour 5 à 8 valeurs de r régulièrement réparties dans cette zone (nous avons pris 10 valeurs).

2.3.2 Cas de la dimension 3

En 3D la situation est plus complexe. Les point singuliers ne sont pas, le plus souvent, isolés et il est donc fréquent d'être en présence d'arêtes singulières. Considérons, par exemple, le cas d'un cube encastré sur une face et soumis à des efforts de traction : tous les points des arêtes de la face encastrée sont singuliers [Figure 2.3.2-b].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

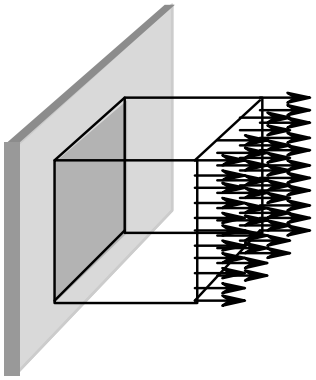


Figure 2.3.2-b : Cube encastré en traction

Dans cette situation, l'évaluation de l'énergie moyenne dans des boules A de rayon croissant et centrées sur un nœud singulier ne permet pas d'identifier q_E. En effet, au fur et à mesure que le rayon augmente l'étendue de la zone singulière contenue dans la boule A augmente et l'on n'obtient pas une décroissance rapide de $\bar{e}_h$ [Figure 2.3.2-c].

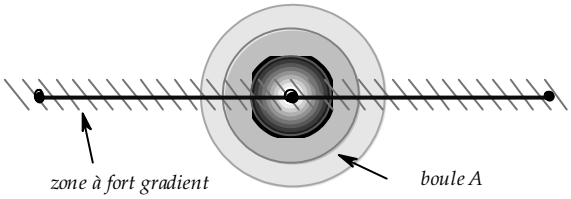


Figure 2.3.2-c : Energie dans des boules concentriques

Lorsque les points singuliers ne sont pas isolés, il faut identifier le coefficient q_E en calculant la densité d'énergie dans des cylindres coaxiaux construits sur les arêtes dont les extrémités ont été considérées comme singulières [Figure 2.3.2-d] et cf. remarque du [§ 2.2].

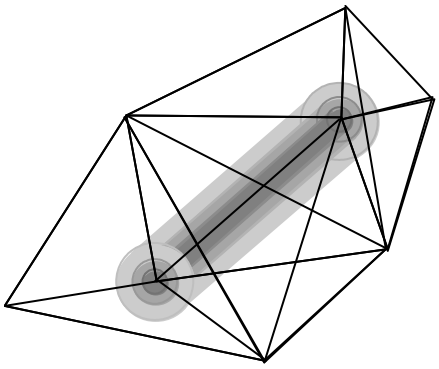


Figure 2.3.2-d : Energie dans des cylindres coaxiaux

2.4 Extension aux zones de concentration de contraintes

En pratique, nous avons constaté que la méthode précédente, mise au point sur des cas présentant des singularités permet aussi de prendre en compte correctement les zones à forts gradients de contraintes même si mathématiquement ces zones ne correspondent pas à des singularités.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3 Construction d'un maillage optimal

3.1 Généralités

L'objectif d'une procédure d'adaptation est de garantir à l'utilisateur un niveau de précision sur l'erreur globale tout en minimisant les coûts de calcul. Pour évaluer les erreurs de discrétisation, on utilise une mesure globale relative de l'erreur ε et les contributions locales associées ε_E avec :

$$\varepsilon^2 = \sum_E \varepsilon_E^2 \qquad \text{éq 3.1-1}$$

L'idée est d'utiliser les résultats de cette première analyse éléments finis et les estimateurs d'erreurs pour déterminer un maillage optimal T^* c'est-à-dire un maillage qui permette de respecter la précision désirée tout en minimisant les coûts de calcul. On construit ensuite le maillage T^* à l'aide d'un mailleur automatique et l'on effectue une seconde analyse éléments finis.

3.2 Définition de l'optimalité

Pour une erreur globale donnée ε_0, un maillage T^* est optimal relativement à une mesure d'erreur ε si :

$$\begin{array}{ll} \varepsilon^* = \varepsilon_0 & \text{précision demandée} \\ N^* & \text{nombre d'éléments de } T^* \text{ est minimum} \end{array} \qquad \text{éq 3.2-1}$$

Ce critère d'optimisation conduit naturellement à minimiser les coûts de calcul.

3.3 Détermination d'un maillage optimal

Pour déterminer les caractéristiques du maillage optimal T^*, la méthode consiste à calculer sur chaque élément E du maillage T un coefficient de modification de tailles :

$$r_E = \frac{h_E^*}{h_E} \qquad \text{éq 3.3-1}$$

Où h_E est la taille actuelle de l'élément E et h_E^* la taille (inconnue) qu'il faut imposer aux éléments de T^* dans la zone de E pour assurer l'optimalité [Figure 3.3-a]. Un choix possible pour définir la taille d'un élément h_E est de prendre la taille du plus grand coté de cet élément. La détermination du maillage optimal est ainsi ramenée à la détermination, sur le maillage initial T, d'une carte de coefficients de modification de taille.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

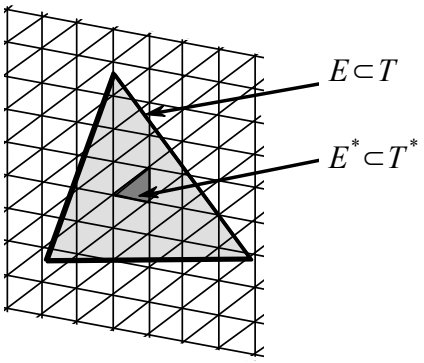


Figure 3.3-a : Définition des tailles

Le calcul des coefficients r_E est basé sur le taux de convergence de l'erreur :

$$\varepsilon = O\left(h^q\right) \qquad \text{éq 3.3-2}$$

où q dépend du type d'élément fini utilisé mais aussi de la régularité de la solution exacte du problème traité. Pour les estimateurs d'erreur « classiques », on suppose que le taux de convergence de l'estimateur d'erreur est égal à l'ordre de convergence de la solution éléments finis. Pour les estimateurs en quantité d'intérêt, ce taux de convergence est égal au double de l'ordre de convergence de la solution éléments finis ([bib4]).

Par la suite, pour calculer le coefficient de modification de taille r_E, on distingue le cas de la solution régulière (q ne dépend que de p, degré d'interpolation des fonctions de forme de l'élément) du cas de la solution singulière (q ne dépend que de α, ordre de la singularité du champ de déplacement).

3.4 Estimateurs d'erreur « classiques »

On désigne par estimateurs d'erreur « classiques » les estimateurs qui fournissent une norme (norme-L^2, norme-H^1, norme en énergie) de la l'erreur en solution.

3.4.1 Cas de la solution régulière

Dans un premier temps, nous supposons que la solution exacte est suffisamment régulière pour que la valeur de q ne dépende que du type d'éléments finis utilisés et soit égale au degré d'interpolation utilisé p (p vaut 1 pour des éléments finis linéaires et 2 pour des éléments finis quadratiques). Dans ce cas, pour prédire les tailles optimales, on écrit que le rapport des tailles est lié au rapport des contributions à l'erreur par :

$$\frac{\varepsilon_E^*}{\varepsilon_E} = \left[\frac{h_E^*}{h_E}\right] = r_E^p \qquad \text{éq 3.4.1-1}$$

où ε_E^* représente la contribution des éléments de T^* situés dans la zone E, c'est-à-dire :

$$\varepsilon_E^* = \left[\sum_{E^* \subset E} \varepsilon_{E^*}^2\right]^{1/2} \qquad \text{éq 3.4.1-2}$$

ε_E^* est l'erreur de l'élément E^* calculée sur le maillage T.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Le carré de l'erreur sur le maillage T^* peut donc être évalué par :

$$\sum_E \left(\varepsilon_E^*\right)^2 = \sum_E r_E^{2p}\,\varepsilon_E^2 \qquad \text{éq 3.4.1-3}$$

et le nombre d'éléments de T^* par :

$$N^* = \sum_E \frac{1}{r_E^d} \qquad \text{éq 3.4.1-4}$$

Où d est la dimension de l'espace (en pratique, $d=2$ ou 3).

En effet, $r_E = \frac{h_E^*}{h_E} = \left(\frac{V}{N_E{}^*}\right)^{1/d}\left(\frac{N}{V}\right)^{1/d}$ avec N le nombre d'élément de T dans E (donc 1), N_E^* le nombre d'élément de T^* dans la zone de E . On a donc $N_E^* = \frac{1}{r_E^d}$, soit $N^* = \sum_E N_E^* = \sum_E \frac{1}{r_E^d}$ le nombre total d'éléments de T^* .

Le problème à résoudre est donc :

$$\text{Minimiser}\quad N^* = \sum_E \frac{1}{r_E^d} \quad \text{avec} \quad \sum_E r_E^{2p}\,\varepsilon_E^2 = \varepsilon_0^2 \qquad \text{éq 3.4.1-5}$$

Il s'agit d'un problème d'optimisation avec une contrainte sur les variables d'optimisation.
En introduisant un multiplicateur de Lagrange, noté A , le problème [éq 3.4.1-5] revient à rendre extremum le Lagrangien :

$$L\left(\left\{r_E\right\}_{E\in T}\ ;\ A\right) = \sum_E \frac{1}{r_E^d} + A\left(\sum_E r_E^{2p}\,\varepsilon_E^2 - \varepsilon_0^2\right) \qquad \text{éq 3.4.1-6}$$

Les conditions d'extrémalité donnent :

$$\frac{\partial L}{\partial r_E} = \frac{-d}{r_E^{d+1}} + 2\,A\,p\,\varepsilon_E^2\,r_E^{2p-1} = 0 \quad \forall E\in T \qquad \text{éq 3.4.1-7}$$

D'où :

$$r_E = \left[\frac{d}{2\,A\,p\,\varepsilon_E^2}\right]^{1/(2p+d)} \qquad \text{éq 3.4.1-8}$$

En reportant dans la seconde équation de [éq 3.4.1-5], on en déduit A :

$$A = \frac{d}{2\,p}\left[\frac{\sum_E \varepsilon_E^{2d/(2p+d)}}{\varepsilon_0^2}\right]^{(2p+d)/2p} \qquad \text{éq 3.4.1-9}$$

On remplace l'expression de A ainsi obtenu dans l'équation [éq 3.4.1-8] pour obtenir r_E :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$r_E = \frac{\varepsilon_0^{1/p}}{\varepsilon_E^{2l/(2p+d)} \left[\sum_E \varepsilon_E^{2dl/(2p+d)} \right]^{1/2p}} \qquad \text{éq 3.4.1-10}$$

3.4.2 Cas des zones singulières

Pour prédire les tailles optimales, on utilise un taux de convergence q_E défini par élément :

$$\frac{\varepsilon_E^*}{\varepsilon_E} = \left[\frac{h_E^*}{h_E} \right]^{q_E} = r_E^{q_E} \qquad \text{éq 3.4.2-1}$$

où ε_E^* représente la contribution des éléments de T^* situés dans la zone E, c'est-à-dire :

$$\varepsilon_E^* = \left[\sum_{E^* \subset E} \varepsilon_{E^*}^2 \right]^{1/2} \qquad \text{éq 3.4.2-2}$$

Le carré de l'erreur sur le maillage T^* peut donc être évalué par :

$$\sum_E \left(\varepsilon_E^* \right)^2 = \sum_E r_E^{2q_E} \varepsilon_E^2 \qquad \text{éq 3.4.2-3}$$

et le nombre d'éléments de T^* est toujours évalué par :

$$N^* = \sum_E \frac{1}{r_E^d} \qquad \text{éq 3.4.2-4}$$

Le nouveau problème à résoudre est donc :

$$\text{Minimiser} \quad N* = \sum_E \frac{1}{r_E^d} \quad \text{avec} \quad \sum_E r_E^{2q_E} \varepsilon_E^2 = \varepsilon_0^2 \qquad \text{éq 3.4.2-5}$$

qui est un problème d'optimisation avec une contrainte sur les variables d'optimisation.
En introduisant un multiplicateur de Lagrange, noté A, le problème revient à rendre extremum le Lagrangien :

$$L\left(\left(r_E \right)_{E \in T} \; ; \; A \right) = \sum_E \frac{1}{r_E^d} + A \left(\sum_E r_E^{2q_E} \varepsilon_E^2 - \varepsilon_0^2 \right) \qquad \text{éq 3.4.2-6}$$

Les conditions d'extrémalité donnent :

$$\frac{\partial L}{\partial r_E} = -\frac{d}{r_E^{d+1}} + 2A q_E \varepsilon_E^2 r_E^{2q_E - 1} = 0 \quad \forall E \in T \qquad \text{éq 3.4.2-7}$$

D'où :

$$r_E = \left[\frac{d}{2Aq_E} \varepsilon_E^2 \right]^{1/(2q_E + d)} \qquad \text{éq 3.4.2-8}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

En reportant dans la seconde équation de [éq 3.4.2-5], on obtient une équation non linéaire en A (car q_E dépend des éléments) :

$$\sum_E \left[\left[\frac{d}{2Aq_E} \right]^{2q_E/(2q_E+d)} \varepsilon_E^{2d/(2q_E+d)} \right] - \varepsilon_0^2 = 0 \qquad \text{éq 3.4.2-9}$$

Elle est résolue par la méthode de Newton (le multiplicateur de Lagrange est initialisé en prenant le multiplicateur de Lagrange de la solution régulière c'est-à-dire l'expression [éq 3.4.2-9] avec $q_E = p$). Une fois A calculé, on en déduit r_E par l'équation [éq 3.4.2-8].

3.5 Estimateurs d'erreur en quantités d'intérêt

On désigne par estimateurs d'erreur en quantités d'intérêt les estimateurs qui fournissent une erreur sur une quantité physique précise (quantité d'intérêt) sur une zone choisie.

3.5.1 Cas de la solution régulière

Dans le cas des estimateurs en quantité d'intérêt, la valeur de q vaut $2p$ [bib4] (p vaut 1 pour des éléments finis linéaires et 2 pour des éléments finis quadratiques). Pour prédire les tailles optimales, on écrit que le rapport des tailles est lié au rapport des contributions à l'erreur par :

$$\frac{\varepsilon_E^*}{\varepsilon_E} = \left[\frac{h_E^*}{h_E} \right]^{2p} = r_E^{2p} \qquad \text{éq 3.5.1-1}$$

où ε_E^* représente la contribution des éléments de T^* situés dans la zone E , c'est-à-dire :

$$\varepsilon_E^* = \sum_{E^* \subset E} \varepsilon_{E^*} \qquad \text{éq 3.5.1-2}$$

ε_E^* est l'erreur de l'élément E^* calculée sur le maillage T.

L'erreur sur le maillage T^* peut donc être évalué par :

$$\sum_E \varepsilon_E * = \sum_E r_E^{2p} \varepsilon_E \qquad \text{éq 3.5.1-3}$$

et le nombre d'éléments de T^* par :

$$N^* = \sum_E \frac{1}{r_E^d} \qquad \text{éq 3.5.1-4}$$

Où d est la dimension de l'espace (en pratique, $d = 2$ ou 3).

Le problème à résoudre est donc :

$$\text{Minimiser} \quad N^* = \sum_E \frac{1}{r_E^d} \quad \text{avec} \quad \sum_E r_E^{2p} \varepsilon_E = \varepsilon_0 \qquad \text{éq 3.5.1-5}$$

Là encore, il s'agit d'un problème d'optimisation avec une contrainte sur les variables d'optimisation.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

En introduisant un multiplicateur de Lagrange, noté A, le problème [éq 3.5.1-5] revient à rendre extremum le Lagrangien :

$$L\left(\left\{ r_E \right\}_{E\in T};\mathrm{A}\right)=\sum_E \frac{1}{r_E^d}+A\left(\sum_E r_E^{2p}\,\varepsilon_E-\varepsilon_0\right) \qquad \text{éq 3.5.1-6}$$

Les conditions d'extrémalité donnent :

$$\frac{\partial L}{\partial r_E}=-\frac{d}{r_E^{d+1}}+2\,A\,p\,\varepsilon_E r_E^{2p-1}=0 \quad \forall E\in T \qquad \text{éq 3.5.1-7}$$

D'où :

$$r_E=\left[\frac{d}{2\,A\,p\,\varepsilon_E}\right]^{1/(2p+d)} \qquad \text{éq 3.5.1-8}$$

En reportant dans la seconde équation de [éq 3.5.1-5], on en déduit A :

$$A=\frac{d}{2p}\left[\frac{\sum_E \varepsilon_E^{d/(2p+d)}}{\varepsilon_0}\right]^{(2p+d)/2p} \qquad \text{éq 3.5.1-9}$$

On remplace l'expression de A ainsi obtenu dans l'équation [éq 3.5.1-8] pour obtenir r_E :

$$r_E=\frac{\varepsilon_0^{1/2p}}{\varepsilon_E^{1/(2p+d)}\left[\sum_E \varepsilon_E^{d/(2p+d)}\right]^{1/2p}} \qquad \text{éq 3.5.1-10}$$

3.5.2 Cas des zones singulières

Pour prédire les tailles optimales, on impose maintenant :

$$\frac{\varepsilon_E^*}{\varepsilon_E}=\left[\frac{h_E^*}{h_E}\right]^{2q_E}=r_E^{2q_E} \qquad \text{éq 3.5.2-1}$$

où ε_E^* représente la contribution des éléments de T^* situés dans la zone E, c'est-à-dire :

$$\varepsilon_E^*=\sum_{E^*\subset E}\varepsilon_{E^*} \qquad \text{éq 3.5.2-2}$$

Le carré de l'erreur sur le maillage T^* peut donc être évalué par :

$$\sum_E \varepsilon_E^*=\sum_E r_E^{2q_E}\varepsilon_E \qquad \text{éq 3.5.2-3}$$

et le nombre d'éléments de T^* est toujours évalué par :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$N^*=\sum_E \frac{1}{r_E^d} \qquad \text{éq 3.5.2-4}$$

Le nouveau problème à résoudre est donc :

$$\text{Minimiser} \quad N^*=\sum_E \frac{1}{r_E^d} \quad \text{avec} \quad \sum_E r_E^{2q_E}\varepsilon_E=\varepsilon_0 \qquad \text{éq 3.5.2-5}$$

qui est un problème d'optimisation avec une contrainte sur les variables d'optimisation.
En introduisant un multiplicateur de Lagrange, noté A, le problème revient à rendre extremum le Lagrangien :

$$L\left(\left\{r_E\right\}_{E\in T} \;;\; A\right)=\sum_E \frac{1}{r_E^d}+A\left(\sum_E r_E^{2q_E}\varepsilon_E-\varepsilon_0\right) \qquad \text{éq 3.5.2-6}$$

Les conditions d'extrémalité donnent :

$$\frac{\partial L}{\partial r_E}=-\frac{d}{r_E^{d+1}}+2Aq_E\varepsilon_E r_E^{2q_E-1}=0 \quad \forall E\in T \qquad \text{éq 3.5.2-7}$$

D'où :

$$r_E=\left[\frac{d}{2Aq_E}\varepsilon_E\right]^{1/(2q_E+d)} \qquad \text{éq 3.5.2-8}$$

En reportant dans la seconde équation de [éq 3.5.2-5], on obtient une équation non linéaire en A :

$$\sum_E\left[\left[\frac{d}{2Aq_E}\right]^{2q_E/(2q_E+d)}\varepsilon_E^{d/(2q_E+d)}\right]-\varepsilon_0=0 \qquad \text{éq 3.5.2-9}$$

Elle est résolue par la méthode de Newton (le multiplicateur de Lagrange est initialisé en prenant le multiplicateur de Lagrange de la solution régulière c'est-à-dire l'expression [éq 3.5.2-9] avec $q_E=p$). Une fois A calculé, on en déduit r_E par l'équation [éq 3.5.2-8].

4 Utilisation dans *Code_Aster*

4.1 Les commandes

L'ordre de la singularité et la carte de modification de taille sont calculés par la commande CALC_ERREUR en activant les options 'SING_ELEM' (champ constant par élément) ou 'SING_ELNO' (champ aux nœuds par élément).

L'option 'SING_ELEM' calcule, sur chaque élément, deux composantes :

- 'DEGRE' : l'ordre de la singularité c'est-à-dire la valeur du coefficient q_E (qui vaut p si l'élément n'est pas connecté à un nœud singulier et qui vaut α sinon) ;
- 'RAPPORT' : le rapport entre la taille actuelle h_E et la nouvelle taille h_E^* de l'élément fini ($h_E/h_E^*=1/r_E$) ;
- 'TAILLE' : la nouvelle taille h_E^* de l'élément fini ($h_E^*=r_E h_E$).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Le calcul de cette option nécessite, au préalable, le calcul d'un estimateur d'erreur (c'est la composante absolue qui est utilisée et c'est codé en dur dans *Code_Aster*) et de l'énergie de déformation totale. Dans le cas où l'une de ces options n'est pas calculée, un message d'alarme est émis et l'option 'SING_ELEM' n'est pas calculée.

L'utilisateur peut renseigner le mot-clé facultatif 'TYPE_ESTI' en indiquant une des options suivante :

- 'ERME_ELEM' pour l'estimateur basé sur les résidus ;
- 'ERZ(1 ou 2)_ELEM_SIGM' pour l'estimateur basé sur les contraintes lissées (Zhu-Zienkiewicz version 1 ou 2) ;
- 'QIRE_ELEM' pour l'estimateur en quantité d'intérêt basé sur les résidus ;
- 'QIZ(1 ou 2)_ELEM_SIGM' pour l'estimateur en quantité d'intérêt basé sur les contraintes lissées (Zhu-Zienkiewicz version 1 ou 2).

Si ce mot clé n'est pas renseigné alors l'estimateur basé sur les résidus 'ERME_ELEM' est choisi par défaut (message d'alarme émis). Si les deux estimateurs de Zhu-Zienkiewicz sont présents, on choisit 'ERZ1_ELEM'.

Pour l'énergie de déformation totale, on utilise :

- Avec STAT_NON_LINE : 'ETOT_ELEM' qui est l'énergie de déformation totale sur un élément fini (valable pour un comportement élastique et pour un comportement élastoplastique 'VMIS_ISOT_XXX').
- Avec MECA_STATIQUE : 'EPOT_ELEM' qui est l'énergie potentielle de déformation élastique sur un élément fini et intégrée à partir des déplacements et de la température (valable uniquement pour un comportement élastique).

L'utilisateur doit également renseigner le mot-clé 'PREC_ERR' qui permet de calculer la précision ε_0 de l'équation [éq 2.2-1] de la façon suivante : $\varepsilon_0 = \text{PREC_ERR} * Erreur_{totale}$. La valeur de 'PREC_ERR' est comprise strictement entre 0 et 1 (un message fatal est émis si cette condition n'est pas vérifiée).

Pour l'option 'SING_ELNO', il s'agit d'une recopie des valeurs de 'SING_ELEM' aux nœuds de l'élément. Le calcul préalable de 'SING_ELEM' est donc nécessaire. Si 'SING_ELEM' est absent, un message d'alarme est émis et l'option 'SING_ELNO' n'est pas calculée.

4.2 Périmètre d'utilisation

Le périmètre d'utilisation est le même (mais plus réduit) que celui de l'estimateur d'erreur choisi à savoir :

- Pour l'estimateur en résidu : éléments finis des milieux continus en 2D (triangles et quadrangles) ou 3D (uniquement les tétraèdres) pour un comportement élastoplastique,
- Pour l'estimateur de Zhu-Zienkiewicz : éléments finis des milieux continus en 2D (triangles et quadrangles) pour un comportement élastique.

En toute rigueur (cf. [§2]), le calcul de l'ordre de la singularité est obtenu à partir de l'énergie théorique en pointe de fissure [éq 2.3.1-2], équation valable uniquement en élasticité. L'utilisation de cette option en élastoplasticité est donc à manipuler avec prudence.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

5 Bibliographie

[1] COOREVITS P. : Mécanisme de détection des singularités. Première partie. Note du Laboratoire de Mécanique et CAO (Saint-Quentin).

[2] CIARLET P.-G. : The finite element method for elliptic problems, North-Holland, 1978.

[3] STRANG & FIX : An analysis of the finite element method, Prentice hall, 1976.

[4] Estimateurs d'erreur en quantités d'intérêt. [R4.10.06]

6 Description des versions du document

Indice doc	Version Aster	Auteur(s) ou contributeur(s), organisme	Description des modifications
A	8.4	V.Cano EDF/R&D/AMA	Texte initial
B	9.4	J.Delmas EDF/R&D/AMA	Refonte du document + ajout des estimateurs d'erreur en quantités d'intérêt

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)