Estimation de l'écart dû à la discrétisation par éléments finis

Lionel GENDRE – Eric FLORENTIN – François LOUF

Edité le 11/01/2013

La discrétisation par éléments finis contribue à l'écart entre les résultats des simulations et la réalité. Cette ressource propose une définition de « l'écart dû à la discrétisation » et présente quelques concepts, outils et méthodes permettant de maîtriser cet écart avec un degré de certitude raisonnable, en estimant sa valeur et en la rendant aussi faible que l'on veut.

1 - Introduction : les écarts dus à la discrétisation

La discrétisation, c'est-à-dire la transformation d'une théorie continue (se traduisant par des problèmes mathématiques insolubles) en une théorie « discrète » (se traduisant par des systèmes d'équations que l'on sait résoudre) est l'une des sources des écarts que l'on observe entre les résultats des simulations par éléments finis et la réalité. En effet, les résultats obtenus par éléments finis comportent toujours des particularités manifestement peu réalistes, et notamment (figure 1) :

- Des déformées anguleuses au niveau des nœuds (et, plus généralement, aux frontières entre les éléments) ;
- Des champs de contrainte discontinus d'un élément à l'autre, ne vérifiant pas les conditions aux limites, et ayant une allure restrictive au sein de chaque élément (sur la figure 1, les contraintes et les déformations sont constantes par élément).

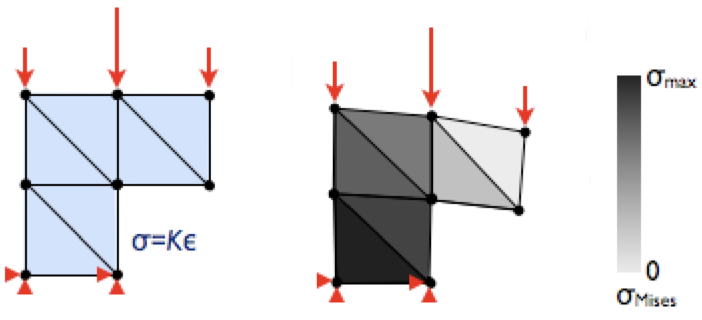


Figure 1 : Quelques manifestations des écarts causés par la discrétisation : déformée anguleuse et contraintes discontinues d'un élément à l'autre.

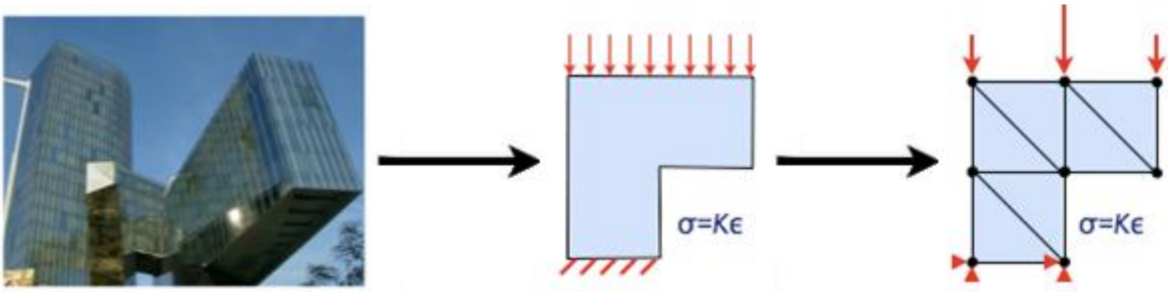
Dans la ressource « *Quelques types d'éléments finis* », nous montrons que ces particularités résultent directement des lois de la théorie discrétisée et, par conséquent, du maillage. Ici, nous nous intéressons à l'influence de la discrétisation sur les écarts entre les résultats des simulations et la réalité : après avoir proposé une définition de « l'écart dû à la discrétisation », nous allons voir que cet écart peut être estimé par le calcul, et rendu aussi faible que l'on veut à condition d'adapter le maillage, ce qui permet à l'utilisateur de le maîtriser.

2 - Définition : l'écart discret-continu

Pour définir la notion « d'écart dû à la discrétisation », il est commode de revenir à la définition mathématique de la « méthode des éléments finis » appliquée à la mécanique, à savoir une technique de résolution approchée d'un problème de mécanique des milieux continus. Ce point de vue conduit à supposer que le processus de modélisation s'effectue en deux phases (figure 2) :

- La modélisation continue, c'est-à-dire le passage de la réalité à un ensemble de modèles définis dans le cadre de la mécanique des milieux continus ;
- La discrétisation, c'est-à-dire la transformation des lois de la mécanique des milieux continus en lois « discrète » dont la définition précise dépend des fonctions de base, c'est-à-dire du maillage.

Du point de vue de l'utilisateur, il s'agit naturellement d'une vue de l'esprit : en pratique, les utilisateurs modélisent directement le produit, son environnement et le comportement du matériau par éléments finis, sans suivre une telle démarche. Néanmoins, la définition des « modèles continus » est relativement intuitive car les modèles de l'environnement et du comportement du matériau sont généralement spécifiés dans le formalisme de la mécanique des milieux continus ; quant au modèle continu du produit, il peut être simplement défini comme le domaine géométrique occupé par les éléments comme le montre la figure 2 (nous excluons donc les écarts résultant de l'utilisation d'éléments à bords rectilignes ou paraboliques pour modéliser des surfaces courbes).



(a) (b) (c)

Figure 2 : La décomposition du processus de modélisation : on considère que la réalité (a) est modélisée sous la forme d'un problème de mécanique des milieux continus (b), qui est ensuite discrétisé par éléments finis (c).

L'intérêt de ce point de vue est que l'écart dû à la modélisation (nous supposons ici que l'écart provient entièrement de la modélisation, et qu'il n'y a donc pas d'erreurs significatives dans la résolution du problème mathématique qui en résulte) s'écrit alors comme la somme de deux termes. Cela nous permet de préciser la notion « d'écart dû à la discrétisation » : il s'agit de l'écart discret-continu entre le résultat obtenu par éléments finis et la solution du problème de mécanique des milieux continus, ou « résultat continu ».

En pratique, le résultat continu n'est généralement pas calculable sinon, il n'y aurait pas besoin d'introduire la discrétisation ! Il est donc impossible d'annuler l'écart discret-continu ; toutefois, nous allons voir qu'il est possible de le maîtriser, en estimant sa valeur et en modifiant le maillage pour le réduire. L'intérêt de cette opération est que le résultat continu ne comporte, par définition, aucune des anomalies dues à la discrétisation, et il est donc raisonnable de postuler qu'il est toujours plus représentatif de la réalité que le résultat calculé par éléments finis. La maîtrise de l'écart discret-continu contribue ainsi à la maîtrise de l'écart total.

3 - Un résultat fondamental : le théorème de convergence

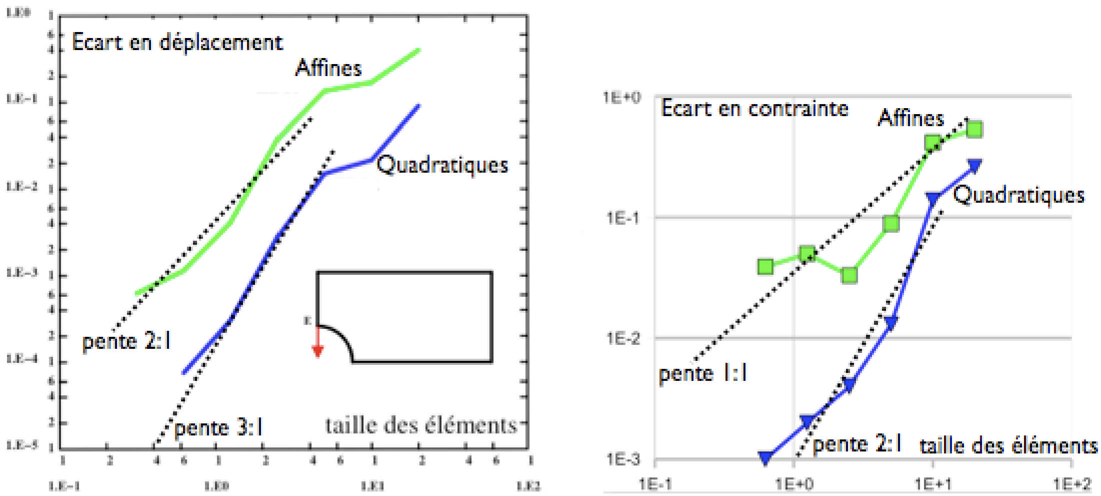
La maîtrise de l'écart discret-continu est fondée sur l'étude mathématique des propriétés de la discrétisation : cette dernière étant une abstraction purement théorique (on passe d'un modèle à un autre modèle), il est possible d'estimer sa contribution à l'écart par le calcul, sans recourir à l'expérimentation.

Ici, la propriété qui nous intéresse tout particulièrement est le théorème de convergence ; en gros, ce théorème dit que lorsque la taille des éléments tend vers zéro, le résultat éléments finis converge vers le résultat continu, quelle que soient sa nature physique et sa localisation. En d'autres termes, il est possible d'amener l'écart discret-continu à un niveau aussi faible que voulu, à condition de raffiner suffisamment le maillage. Il s'agit d'une propriété extrêmement importante en pratique : c'est grâce à elle que l'on peut maîtriser l'écart dû à la discrétisation en toutes circonstances !

Plus précisément, le théorème de convergence indique à quelle vitesse l'écart diminue lorsque l'on raffine le maillage. Si l'on appelle h la taille des éléments et p leur ordre, alors on peut montrer que lorsque h tend vers zéro :

- L'écart entre les déplacements éléments finis et continus diminue asymptotiquement comme $hp+1$, c'est-à-dire $h2$ pour les éléments affines et $h3$ pour les éléments quadratiques (figure 4a) ;
- L'écart entre les contraintes ou déformations éléments finis et continues diminue asymptotiquement comme hp, c'est-à-dire h pour les éléments affines et $h2$ pour les éléments quadratiques (figure 4b).

Les graphiques de la figure 3 ont été obtenus en réalisant une série de simulations sur des maillages de plus en plus fins ; les courbes représentent l'évolution de l'écart en fonction de la taille des éléments, affines ($p=1$, en vert) ou quadratiques ($p=2$, en bleu). La tendance prédite par le théorème est quant à elle tracée en traits pointillés noirs ; l'échelle étant logarithmique, les fonctions puissance sont représentées par des droites. (Pour aller plus loin voir la ressource « *Raffinements du maillage et convergence* »).



(a) *(b)*

Figure 3 : Illustration des théorèmes de convergence : (a) pour les déplacements, (b) pour les contraintes. Images de Laurent Champaney.

On constate que le théorème s'applique mal aux valeurs élevées de h (qui correspondent à des maillages relativement grossiers) et que la convergence est particulièrement irrégulière dans le cas des contraintes obtenues par des éléments affines (nous savons en effet que ces éléments conduisent à des champs de contrainte constants par morceaux, qui sont donc de mauvaise qualité dans les zones à forts gradients). Cela s'explique simplement par le fait que ces relations sont asymptotiques : elles ne donnent que des tendances valables lorsque h devient suffisamment petit compte tenu des gradients des contraintes, et ne sont donc pertinentes que si le maillage est déjà bien adapté aux champs qu'il doit représenter.

En outre, tout ceci n'est valable qu'en l'absence de singularités, qui peuvent notamment apparaître en présence d'un angle rentrant (comme sur la figure 1) ou d'un effort concentré (voir ressource « *Attention aux singularités !* »). En présence d'une singularité, les contraintes obtenues par éléments finis augmentent indéfiniment lorsque la taille des éléments tend vers zéro, ce qui est logique puisque les contraintes continues ne sont pas bornées au voisinage du point singulier. Par conséquent, les relations asymptotiques ne sont naturellement plus valables.

Nous allons maintenant montrer comment ce théorème permet d'estimer l'écart discret-continu, puis comment il peut guider les raffinements du maillage afin de réduire cet écart.

4 - L'étude de la convergence d'un résultat

La convergence des solutions éléments finis vers la solution continue permet d'observer simplement l'influence de la discrétisation sur un résultat, et de vérifier que celle-ci n'est pas trop importante. Il faut pour cela effectuer plusieurs simulations avec des maillages de plus en plus fins, et noter les résultats successifs. On dit que le résultat a convergé lorsqu'il n'évolue pratiquement plus (figure 4).

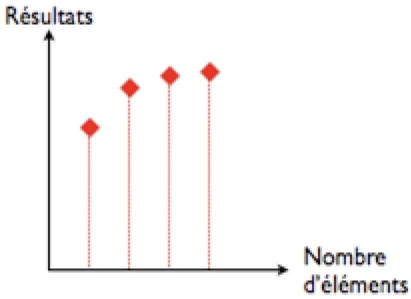


Figure 4 : Une étude de convergence : on raffine le maillage jusqu'à ce que le résultat n'évolue pratiquement plus.

Cette technique est très utilisée dans les bureaux d'études, du moins sur un plan qualitatif : on estime généralement que le maillage est « bon » lorsqu'un raffinement important (par exemple, diviser par 2 la taille des éléments) entraîne une variation faible du résultat (par exemple, inférieure à 5%). Néanmoins, il faut prendre garde à ne pas en tirer de conclusions trop hâtives : ce n'est pas parce qu'un résultat semble stabilisé à 5% près qu'il est forcément à moins de 5% de la valeur continue !

L'estimation quantitative de l'écart discret-continu à partir d'une étude de convergence est beaucoup moins répandue, du moins en mécanique des solides déformables. Elle est néanmoins possible : on peut par exemple tracer l'évolution du résultat en fonction de la taille des éléments h afin de tenter d'extrapoler son évolution à l'aide du théorème de convergence. Il faut alors examiner l'évolution des résultats au cours des raffinements successifs :

1. Si les résultats semblent converger de façon régulière et monotone, alors les hypothèses du théorème de convergence s'appliquent vraisemblablement. Pour estimer l'écart, on peut donc extrapoler l'évolution du résultat lorsque h tend vers zéro à l'aide des relations asymptotiques, par exemple en modélisant cette évolution sous la forme suivante :

   $$R = R_0 + Ah^B$$

   et en identifiant les coefficients B, A et R_0 à partir des points de la courbe de convergence, par exemple par les moindres carrés (l'exposant B ne sera pas forcément égal à l'ordre de convergence prédit par la théorie, qui reste basée sur une idéalisation de la discrétisation). Selon ce modèle, R converge vers R_0 lorsque h tend vers zéro ; si le modèle correspond bien aux résultats, on peut donc estimer l'écart par la valeur R-R_0 (figure 5).

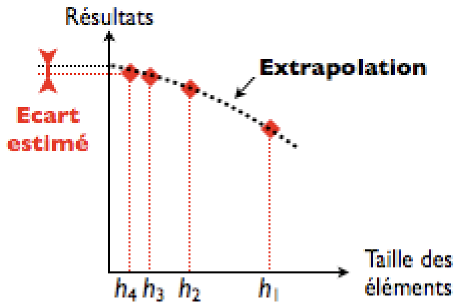


Figure 5 : L'estimation d'un écart par extrapolation : on recherche la valeur limite du résultat lorsque la taille des éléments tend vers zéro, en s'appuyant sur les formules de convergence.

Une telle estimation n'est naturellement réalisable que si l'on a obtenu un nombre suffisant de résultats semblant converger régulièrement (au moins trois ou quatre).

2. Si les résultats évoluent de façon irrégulière, cela signifie qu'ils dépendent fortement des aléas de la taille et de la position des éléments. Par conséquent, certains de ces résultats sont peu pertinents et on ne peut manifestement pas leur appliquer les relations asymptotiques comme indiqué ci-dessus : il faut améliorer les maillages concernés (en diminuant la taille des éléments, en augmentant l'ordre, en contrôlant mieux les distorsions des éléments...) avant de pouvoir estimer un écart. Cela se produit fréquemment lorsque l'on recherche une contrainte (ou une déformation) dans une zone de concentration maillée avec des éléments affines, comme sur la courbe verte de la figure 3b.
3. Enfin, si une contrainte ou une déformation semble augmenter indéfiniment, cela peut indiquer la présence d'une singularité dans la zone où est calculée cette contrainte. L'étude de la convergence est alors inutile car la valeur continue est elle-même non pertinente : si l'on recherche une contrainte au voisinage d'un point singulier, il faut d'abord éliminer la singularité avant de s'intéresser à l'écart discret-continu.

Une telle étude peut être réalisée avec n'importe quel logiciel (l'étude de la convergence a longtemps été la seule méthode disponible pour estimer les écarts dus à la discrétisation) et présente de plus un intérêt pédagogique certain pour montrer que ces écarts doivent être pris en compte, puisque l'on observe « en direct » l'évolution du résultat au fil des raffinements du maillage. Néanmoins, l'étude de la convergence ne permet pas de savoir si certaines régions du maillage ont besoin d'être raffinées plus que d'autres ; pour ceci, il faut savoir dans quelles proportions chaque région contribue à l'écart observé afin d'adapter le maillage en conséquence.

5 - Les cartes d'erreur et le remaillage adaptatif

C'est pour obtenir ce type d'informations que la seconde approche a été introduite. Cette approche repose sur des outils nommés estimateurs d'erreur, intégrés à la plupart des logiciels de simulation modernes, capables de donner la répartition spatiale de l'écart discret-continu. Le logiciel peut ensuite utiliser cette information pour raffiner automatiquement le maillage de sorte à amener l'écart en-dessous d'une certaine valeur : c'est ce que l'on appelle le remaillage adaptatif. Très pratiques, ces fonctionnalités n'en possèdent pas moins des limites, qui sont parfois mal comprises.

5.1 - Un estimateur d'erreur courant

L'estimation automatique de l'écart discret-continu a fait l'objet de très nombreux travaux de recherche. Nous présentons ici une technique particulière, retenue dans la plupart des logiciels du commerce en raison de sa simplicité : l'estimateur Zhu-Zienkiewicz de première génération ou estimateur ZZ1. Cette technique repose sur deux idées principales.

La première idée est d'estimer l'écart de façon empirique mais peu coûteuse en s'appuyant sur la principale « anomalie » résultant de la discrétisation, à savoir les sauts de contrainte entre les éléments. Pour cela, le logiciel effectue un post-traitement similaire à celui de la visualisation du champ de contraintes : il ramène les contraintes aux nœuds pour reconstruire un champ continu à l'aide des fonctions de base (en calculant cette fois-ci les contraintes nodales par un lissage des moindres carrés, ce qui est plus coûteux mais plus précis qu'un simple calcul de moyennes). Le logiciel mesure ensuite l'écart entre le champ lissé et le champ brut (figure 6).

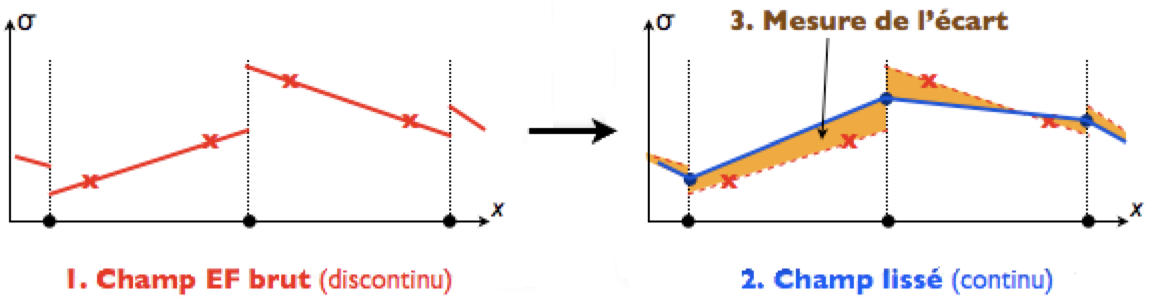


Figure 6 : Le procédé utilisé pour estimer l'écart discret-continu dans chaque élément : le lissage des contraintes.

La deuxième idée est que, contrairement à une étude de convergence où l'on ne s'intéresse qu'à un résultat particulier, l'objectif est ici de cartographier l'ensemble des écarts dus à la discrétisation afin de déterminer si le maillage est bien adapté aux champs qu'il doit représenter. Pour cela, le logiciel effectue l'opération décrite ci-dessus dans chacun des éléments du maillage, et met l'écart (en orange sur la figure 6) sous la forme d'une quantité homogène à une énergie de déformation. Il normalise ensuite cette énergie en la divisant par l'énergie de déformation totale du modèle (de sorte à obtenir un pourcentage), et représente l'ensemble des énergies normalisées élémentaires sur une carte. On obtient ainsi une mesure, élément par élément, de l'adéquation du maillage aux champs qu'il doit porter (figure 7).

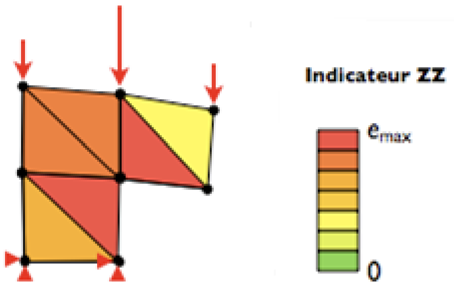


Figure 7 : Une carte des écarts. Chaque couleur représente une mesure globale des écarts dus à la discrétisation au sein d'un élément.

Il est capital de garder à l'esprit que cet outil ne sert pas à estimer l'écart discret-continu sur une contrainte, ni sur tout autre résultat, et les valeurs apparaissant sur les cartes ne doivent jamais être interprétées en tant que telles. En clair, ce n'est pas parce que la carte indique une valeur de 1% dans un élément que les contraintes calculées dans cet élément présenteront un écart de 1% avec la valeur continue : une étude sur l'estimateur de Catia a montré que l'écart sur une contrainte peut être supérieur de plusieurs ordres de grandeur aux indications de la carte. Il y a au moins trois raisons à cela :

1. La normalisation, en divisant chaque écart élémentaire par l'énergie de déformation totale du modèle, conduit logiquement à des valeurs beaucoup plus faibles qu'un écart relatif sur une quantité localisée.

2. L'estimation de l'écart n'est pertinente que si le champ lissé est suffisamment proche du champ continu. Or, le champ lissé s'appuie sur les fonctions de base du maillage ; sa qualité est donc fortement tributaire de la qualité de ce maillage. Par conséquent, les valeurs calculées par cet estimateur ne reflètent réellement l'écart discret-continu que si le maillage est déjà d'une finesse raisonnable.
3. Enfin, cette estimation ne mesure que la qualité locale, élément par élément, du maillage. Or, contrairement à une idée très répandue, cela ne suffit pas à garantir la qualité d'un résultat, même localisé : nous savons en effet que la discrétisation d'un milieu continu surestime artificiellement sa rigidité, et les éléments trop gros ou trop distordus se comportent donc comme des « inclusions » plus rigides qui entraînent des redistributions de contraintes dans une zone plus ou moins grande (les spécialistes parlent d'erreur de pollution).

Cet estimateur ne peut donc pas remplacer une étude de convergence. Il est en revanche très utile pour guider le raffinement du maillage, comme nous allons le voir. Notons que les outils permettant de construire des indicateurs fiables font l'objet d'importantes activités de recherche et sont maintenant matures mais restent pour l'instant implémentés dans les codes recherche.

5.2 - Le remaillage adaptatif

Une fois la carte des écarts calculée, de nombreux logiciels sont capables de modifier automatiquement le maillage de sorte à amener l'estimation de l'écart en-dessous d'un certain seuil ; cette opération s'appelle le remaillage adaptatif. Il en existe plusieurs variantes ; nous ne traitons ici que de la plus courante, nommée adaptativité « en h » car elle consiste à diminuer la taille des éléments, habituellement notée h. Certains logiciels, au lieu de diminuer la taille des éléments, augmentent plutôt leur ordre en modifiant leurs fonctions de base ; on parle alors d'adaptivité « en p ».

Pour effectuer un remaillage adaptatif, il faut commencer par réaliser une simulation sur un premier maillage et générer une carte des écarts. Il faut ensuite spécifier le seuil à atteindre ; ce seuil porte sur l'estimateur ZZ1 défini ci-dessus (ce n'est donc pas un écart relatif sur un résultat !) et peut, selon les logiciels, s'appliquer à tout le maillage ou uniquement à certaines zones. Le logiciel répète alors de façon itérative les cinq étapes suivantes (figure 8) :

1. A l'aide des formules asymptotiques du paragraphe 3, le logiciel tente de deviner une répartition de la taille des éléments qui permettra d'amener l'écart au-dessous du seuil spécifié ;
2. Le logiciel génère automatiquement un nouveau maillage à partir de ces indications ;
3. Le logiciel lance une simulation sur ce nouveau maillage pour calculer le champ de contraintes ;
4. Le logiciel calcule la nouvelle carte des écarts à l'aide de l'estimateur ZZ1 ;
5. Le logiciel compare les écarts à l'objectif et s'arrête si celui-ci est rempli, ou reprend à l'étape 1 dans le cas contraire.

Le processus se répète ainsi tant que l'objectif n'est pas satisfait ou que le nombre maximal d'itérations spécifié par l'utilisateur n'est pas atteint.

En pratique, sous réserve de disposer d'un maillage initial de qualité suffisante, ce processus conduit généralement en quelques itérations à des maillages bien adaptés aux gradients des contraintes, offrant un bon rapport qualité/coût. La figure 8 représente quelques exemples de maillages obtenus à l'issue d'un tel processus.

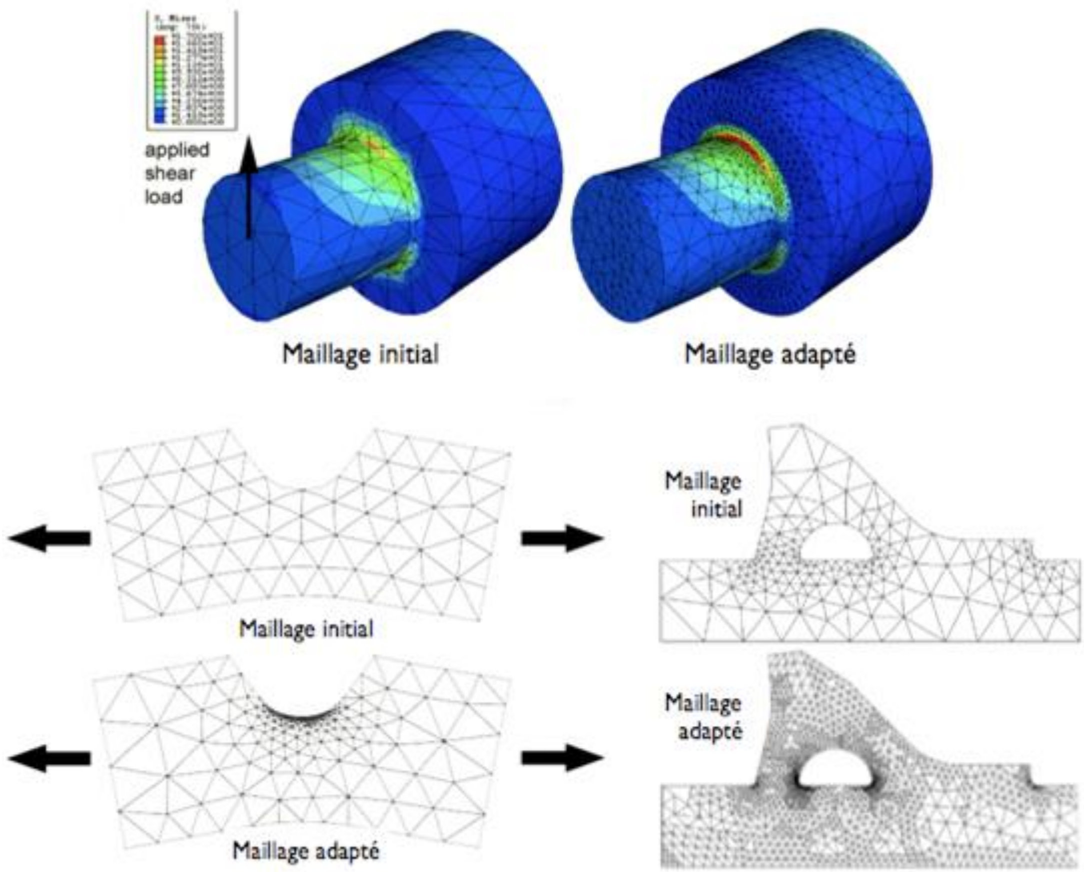


Figure 8 : Quelques exemples de maillages adaptés.
Images de Simulia [1] et de Grégory Legrain.

Bien que très pratiques pour quiconque a compris leurs limites, les algorithmes adaptatifs sont régulièrement utilisés de façon peu pertinente. Voici quelques erreurs d'utilisation ou « fausses bonnes idées » courantes :

1. Spécifier un écart admissible très faible dans la région où est localisé le résultat que l'on cherche, et très élevé voire inexistant ailleurs : cela n'est généralement pas une bonne idée car l'écart en question est une valeur de l'estimateur ZZ1, c'est-à-dire une mesure de l'adéquation du maillage aux champs qu'il est censé représenter. Or, l'erreur de pollution fait que pour obtenir un résultat précis dans une zone, il ne suffit pas que le maillage soit « bon » dans cette zone.
2. Réaliser un premier maillage extrêmement grossier et de mauvaise qualité en comptant sur l'algorithme pour identifier tous les raffinements à apporter : cela conduit au mieux à de nombreuses itérations et au pire à un mauvais maillage final car, comme nous l'avons vu, la qualité de l'estimation ZZ1 est tributaire de la qualité du maillage initial.
3. Utiliser ces algorithmes « en aveugle » en présence de singularités : ils tendent alors à raffiner le voisinage des points singuliers sans jamais réussir à converger puisque les contraintes obtenues augmentent indéfiniment, et cela alourdit inutilement le coût de la simulation sans améliorer la pertinence des résultats.

Ces algorithmes (et l'estimation ZZ1 qui les sous-tend) ne remplacent donc ni les études de convergence, ni les règles empiriques de réalisation des maillages. Bien au contraire, ce n'est qu'en utilisant ces trois outils de façon complémentaire que l'on peut espérer maîtriser, avec un degré de certitude raisonnable, l'écart discret-continu sur le résultat d'une simulation : aucune de ces techniques n'offrant de garantie absolue, l'esprit critique du concepteur demeure indispensable.

6. Bilan

Dans cette ressource, nous avons mis en évidence les points fondamentaux suivants :

1. La discrétisation contribue aux écarts entre résultats des simulations et réalité : cela se manifeste notamment par des sauts de contrainte d'un élément à l'autre.
2. Cette contribution peut être mesurée en estimant l'écart discret-continu, c'est-à-dire l'écart entre le résultat calculé par éléments finis et le résultat que l'on aurait obtenu sans discrétisation, si toutefois on savait le calculer.
3. Cette contribution peut être réduite autant que voulu : en effet, la solution calculée par éléments finis converge vers la solution continue lorsque l'on raffine le maillage.
4. L'étude de la convergence consiste à vérifier que le résultat cherché converge bien vers une valeur limite lorsque l'on raffine le maillage ; si cette convergence est suffisamment régulière, il est possible d'utiliser cette valeur limite pour estimer l'écart.
5. Certains logiciels peuvent construire des cartes d'erreur représentant la répartition spatiale des sauts de contrainte, puis corriger automatiquement le maillage afin de réduire ces écarts : c'est le remaillage adaptatif.
6. Utilisées conjointement, ces techniques permettent de maîtriser l'écart dû à la discrétisation. Elles n'offrent toutefois pas une garantie absolue, et ne fonctionnent qu'à deux conditions : le maillage initial doit être déjà bien adapté aux champs qu'il doit représenter, et le modèle ne doit comporter aucune singularité.

Référence :

[1]: http://www.3ds.com/products-services/simulia/