论文

有限元计算的面向目标误差估计

林治家, 由小川, 庄茁*

清华大学航天航空学院, 北京 100084

* 联系人, E-mail: zhuangz@tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2010-10-12; 接受日期: 2010-12-24

国家自然科学基金重点基金资助项目(批准号: 10876100)

摘要 V&V(Verification and Validation), 即模型验证与确认, 是一种量化复杂数值模拟结果置信度的系统方法. 大规模的数值模拟往往不能确保高置信度, 数值模拟结果的置信度需要一种严格量化的方法. 对于有限元模拟问题, 获得近似解后, 如果直接对这个解进行误差分析, 可以得到一个整体的误差估计. 而对于以有限元模拟为辅助手段的设计改进而言, 通常都有特别关心的专门设计量, 所有的模拟实验过程都是为检验这个量而服务的. 面向目标的误差估计方法就是专门针对如何准确和经济地估算特定值误差的一种方法. 本文通过线性化简后, 把这种估计方法针对有限元模拟成功实现, 为在实际工程应用中数值实现这种最接近于解决实际问题的方法作了准备.

关键词 有限元, 验证与确认, 面向目标, 误差估计

PACS: 21.10.Jx, 46.90.+s, 46.15.-x

随着计算机技术的迅猛发展, 数值模拟在现代产品设计流程中扮演了越来越重要的角色. 特别是大规模并行计算的发展正促使现代工程领域的研制方式发生一场深刻变革, 即从以试验为主转向以数值模拟为主. 然而, 目前国内外绝大多数产品设计仍然主要依赖于试验(一般是全系统和子系统试验), 数值模拟结果通常并不能直接作为设计依据, 因为在获得试验结果以前分析人员并不能确切地知道其置信度. 显然, 如果能在试验之前就可信地量化数值模拟结果的置信度, 那么数值模拟的价值无疑将大大提升. 需要指出的是, 大规模的数值模拟以及模型修正技术并不能确保高置信度, 数值模拟结果的置信度仍然需要被严格量化.

而 V&V 正是针对无全系统实验结果时的数值模

拟置信度进行严格量化的研究, 它的目标就是实现实验前就量化数值模拟结果的置信度. 模型验证与确认(Verification and Validation, 简称 V&V)^[1,2]是严格量化复杂数值模拟结果置信度的系统方法, 其中, 模型验证(Verification)评估数学模型与计算机程序之间的一致性(数学问题), 模型确认(Validation)评估数学模型与真实系统之间的一致性(物理问题), 前者是后者的基础^[3,4]. 数值模拟结果的置信度量化的方式: 一种是在试验后直接与试验结果进行比较, 另一种是在试验前利用各种误差和不确定性信息进行推断. 后者常被称为预测置信度评估, 它包含两层含义: 一是在设计空间中若干点上已有试验结果, 需要推断其他设计点上预测的置信度; 二是在全系统以下层次(主要是单元、部组件层次)已有试验结果, 需

引用格式: 林治家, 由小川, 庄茁. 有限元计算的面向目标误差估计. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2011, 41: 286–291

Lin Z J, You X C, Zhuang Z. Goal-oriented error estimation for linear finite element method (in Chinese). Sci Sin Phys Mech Astron, 2011, 41: 286–291, doi: 10.1360/132010-977

要推断全系统预测的置信度.

在评估中, 计算验证主要证明数学模型的离散解有足够的精度. 目前的计算验证应用最广泛的一种方法是基于后处理的误差估计, 它利用后处理过程中的应力磨平计算得到的光滑应力场进行误差计算. 基于后处理的误差估计虽然形式简单、计算量小、便于应用, 但是该方法数学基础不足, 不能保证渐进精确, 对于很多问题精度也不高, 而且是一种整体估计, 不能解决针对专门设计量估计的问题.

本文主要研究模型验证中计算验证的一种新形式——面向目标的误差估计^[5-8]. 通常对于一个设计而言, 都有一个专门的设计量, 所有的设计都是为这个量而服务的. 如果能针对这个量进行误差估计, 无疑更有实际意义. 这正是面向目标的误差估计的思路, 它是专门针对如何准确和经济地估算特定值误差的一种方法. 本文以下介绍这种方法的数学原理, 讨论并在线性简化下^[8-10]完成其数值实现的方法, 并通过典型算例对其估计精度进行了比较.

1 理论推导与简化

下面介绍一下面向目标的误差估计的理论基础^[11]. 采用有限元的泛函描述进行推导, 设 B 为内能, F 为外力功, Q 为关心的设计量, 假设在线弹性情况下, 则有

$$B(u, v) = \int_{\Omega} \nabla v : E \nabla u d\Omega, \quad (1)$$

$$F(v) = \int_{\Omega} f \cdot v d\Omega + \int_{\Gamma_N} g \cdot v ds, \quad (2)$$

$$Q(v) = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \sigma_{11}(v) ds, \quad (3)$$

其中(3)中的关心设计量 Q , 为举例说明, 写成某一小区域 ω 中 1 方向正应力的平均值. 在实际应用中, Q 可以是任何关于能量方程解 u 的函数.

则原平衡方程可记作:

$$B(u, v) = F(v). \quad (4)$$

这样原问题实际上就是一个在平衡方程约束下关于 Q 的控制问题, 这样的带约束控制问题可以转化为拉格朗日函数的极值问题求解, 于是建立拉格朗日函数 L 如下:

$$L(u, p) = Q(u) + F(p) - B(u, p), \quad (5)$$

其中 p 为关于 Q 的影响函数, 即拉格朗日算子. 接下

来对拉格朗日函数求导, 有

$$L'((u, p); (v, q)) = Q'(u; v) - B'(u; v, p) + F(q) - B(u, q), \quad (6)$$

从而或得关于这个极值问题的两个方程——原方程(4)及它的偶方程(7):

$$B'(u; v, p) = Q'(u; v). \quad (7)$$

设有限元对这两个问题的近似解分别为 u_0 和 p_0 , 那么记各个误差和残差如下:

$$e_0 = u - u_0, \quad (8)$$

$$\varepsilon_0 = p - p_0, \quad (9)$$

$$R(u_0, q) = F(q) - B(u_0, q), \quad (10)$$

$$\bar{R}(u_0; v, p_0) = Q'(u_0; v) - B'(u_0; v, p_0). \quad (11)$$

则关心的设计量计算误差可通过计算出的 u_0 和 p_0 利用各种残差的形式表示出来:

$$Q(u) - Q(u_0) = R(u_0; p_0) + L(u, p) - L(u_0, p_0). \quad (12)$$

通过利用泰勒展开进行拉格朗日函数差部分的化简, 忽略高阶小量, 并利用原方程和偶方程残差间的关系, 得到近似式:

$$Q(u) - Q(u_0) \approx R(u_0; p_0) + R(u_0; \varepsilon_0). \quad (13)$$

这样, 第一项可以直接计算获得, 作为仿真误差的估计, 而第二项可以通过下式计算误差估计的范围:

$$R(u_0, \varepsilon_0) = B(u, \varepsilon_0) - B(u_0, \varepsilon_0) \approx B(e_0, \varepsilon_0), \quad (14)$$

$$\begin{aligned} B(e_0, \varepsilon_0) &= B(se_0, s^{-1}\varepsilon_0) \\ &= \frac{1}{4} \|se_0 + s^{-1}\varepsilon_0\|^2 - \frac{1}{4} \|se_0 - s^{-1}\varepsilon_0\|^2. \end{aligned} \quad (15)$$

由于 $\|se_0 + s^{-1}\varepsilon_0\|^2$ 存在极大极小值, 因此整个的范围可以估计.

对于线弹性问题, B 和 Q 均为线性, 其导数表达可以化简, 原问题和它的偶问题可以进行解偶:

$$B(u, q) = F(q), \quad (16)$$

$$B(p, v) = Q(v). \quad (17)$$

这样可以分别计算 u_0 和 p_0 , 比较简便. 另一方面, 设计量的误差形式也可以利用线性假设化简:

$$Q(u) - Q(u_0) \approx R(u_0; p_0) + R(u_0; \varepsilon_0) = R(u_0; p). \quad (18)$$

在有限元计算精度能得到一定保证的情况下, p 与 p_0 的误差在允许范围内, 则可将 p 代换为 p_0 , 进行初步的误差估计. 初步的线性面向目标误差估计分为三个步骤: 首先通过对于原问题的第一次有限元计算, 获得仿真的位移场结果 u_0 ; 第二步, 将关心的

设计量写成积分形式, 然后代入偶问题的弱形式, 计算 p_0 , 最后, 利用两次计算分别得到的 u_0 和 p_0 求解 R 的分布, 从而近似地获得关心的设计量的误差大小和单元间分布情况.

2 数值算例

2.1 梁单元误差分布检验

本节主要计算了梁单元和实体单元两种类型的算例, 分别验证了误差的分布和估计的精度.

第一个算例是检验这个方法的分布性质. 问题如图 1 所示, 为一根悬臂梁, 其截面为矩形, 在梁的中点受一个向下的集中力. 关心的设计量假定是悬臂梁自由端的挠度, 模型采用两个 B31 梁单元建立, 通过 ABAQUS 计算得到 u_0 和 p_0 的分布结果如图 2 和 3 所示.

图 1 梁单元误差分布检验算例

Figure 1 Beam element example of error estimation.

图 2 B31 单元模拟悬臂梁的 u_0 分布

Figure 2 Distribution of u_0 with B31 element in ABAQUS.

图 3 B31 单元模拟悬臂梁的 p_0 分布

Figure 3 Distribution of p_0 with B31 element in ABAQUS.

可见 u_0 和 p_0 在两个单元上均有分布, 但是由于右侧的单元 2 并未受力, 因此相当于并没有参与模拟

悬臂梁自由端的挠度问题, 所以对于设计量误差的单元分布而言, 2 单元应该不起作用. 经过计算, R 的分布结果为 $r = 1.0 \times 10^{-8} \times [9.468, -0.000]$, 符合理论推测. 同时, 该悬臂梁挠度的理论解为 4.7619×10^{-6} m, 有限元模拟的结果是 4.66443×10^{-6} m, 误差是 9.747×10^{-8} m, 约为 2.05%. 而通过面向目标的误差估计方法估算的误差为 9.468×10^{-8} m, 约为 1.99%, 两者差别很小, 在容许范围内.

2.2 实体单元误差分布检验

第二个算例是采用实体单元计算的一个悬臂梁问题, 用以检验线性面向目标误差估计算法的精度. 该问题如图 4 所示, 同样是一根左端固支的悬臂梁, 长度为 150 mm, 截面为 2.5 mm×5 mm 的矩形, 在自由端处受向下的集中力 5 N, 无体力, 材料为线弹性, 模量 70×10^9 MPa. 关心的设计量同样是梁自由端的挠度. 模型采用完全积分的实体单元, 分别计算并比较了 C3D8 一次单元和 C3D20 二次单元的结果. 该问题的理论解为 3.09×10^{-3} m.

图 4 实体单元误差估计精度检验算例

Figure 4 Beam element example of error estimation.

首先采用 C3D8 单元进行分析, 由于 C3D8 完全积分单元存在剪切自锁, 不能很好地描述梁的弯曲形态, 如图 5 所示. 同时采用 C3D20 单元进行分析, 由于 C3D20 单元是二次单元, 可以比较好的重现悬臂梁的弯曲形态, 因此得出的结果也比较准确. 这部分的主要模拟和估计结果如下:

(i) 有限元(ABAQUS, C3D8, 6 个单元), 计算自由端挠度结果: 2.38×10^{-4} m, 误差: 2.85×10^{-3} m (92.23%).

1) 采用 C3D8 单元计算 p_0 , 如图 6 所示. 计算估

图 5 C3D8, 6 单元计算 u_0 分布

Figure 5 Distribution of u_0 with 6 C3D8 elements.

图 6 C3D8, 6 单元计算 p_0 分布Figure 6 Distribution of p_0 with 6 C3D8 elements.

计误差: 7.9255×10^{-7} m. 由于剪切自锁, 采用一阶完全积分单元计算梁弯曲是非常不准确的, 因此 u_0 和 p_0 都受到这种计算误差影响, 致使误差分析结果偏离严重.

2) 采用 C3D20 单元计算 p_0 , 如图 7 所示. 计算估计误差: 2.80×10^{-3} m (98.2%). 由于 p_0 计算更准确则误差估计更准确, 因此尝试通过 C3D20 单元得到的较准确 p_0 结果去估算 u_0 的误差, 以获得更精确的结果, 如图 8 所示.

图 7 C3D20, 6 单元计算 p_0 分布Figure 7 Distribution of p_0 with 6 C3D20 elements. 图 8 u_0 采用 C3D8, p_0 采用 C3D20 下的误差分布Figure 8 Distribution of error by goal-oriented error estimation calculation. u_0 : 6 C3D8 elements; p_0 : 6 C3D20 elements.

(ii) 有限元(ABAQUS, C3D20, 6 个单元). 计算自由端挠度: 3.072×10^{-3} m, 误差: 2.13×10^{-5} m (0.45%). 如图 9 所示.

采用 C3D20 单元计算出的 p_0 (见图 7)对 6 个 C3D20 单元的仿真结果进行面向目标的误差估计, 结果和单元分布如图 10 所示. 计算估计误差: 2.20×10^{-5} m (0.525%).

图 9 C3D20, 6 单元计算 u_0 分布Figure 9 Distribution of u_0 with 6 C3D20 elements. 图 10 u_0 采用 C3D20, p_0 采用 C3D20 下的误差分布Figure 10 Distribution of error by goal-oriented error estimation calculation. u_0 : 6 C3D20 elements; p_0 : 6 C3D20 elements.

(iii) 有限元(ABAQUS, C3D8, 24 个单元). 计算自由端挠度结果: 7.67×10^{-4} m, 误差: 2.32×10^{-3} m (75.18%). 虽然单元网格加密了一倍, 但是采用一阶单元计算梁弯曲仍然是不准确的, 因此这样的网格计算出的 u_0 , p_0 都受到这种计算误差影响, 结果偏离严重, 如图 11 所示.

图 11 C3D8, 24 单元计算 u_0 分布Figure 11 Distribution of u_0 with 24 C3D8 elements.

1) 采用 C3D8 单元计算 p_0 , 计算估计误差: 1.64×10^{-5} m, 如图 12 所示.

2) 采用 C3D20 单元计算 p_0 , 计算估计误差: 2.40×10^{-3} m (77.78%), 如图 13 和 14 所示.

(iv) 有限元(ABAQUS, C3D20, 24 个单元), 计

图 12 C3D8, 24 单元计算 p_0 分布

Figure 12 Distribution of p_0 with 24 C3D8 elements.

图 13 C3D20, 24 单元计算 p_0 分布

Figure 13 Distribution of p_0 with 24 C3D20 elements.

图 14 u_0 采用 C3D8, p_0 采用 C3D20 下的误差分布

Figure 14 Distribution of error by goal-oriented error estimation calculation. u_0 : 24 C3D8 elements; p_0 : 24 C3D20 elements.

算自由端挠度结果: 3.088×10^{-3} m, 误差: 2×10^{-5} m (0.648%), 如图 15 所示。

采用 C3D20 单元计算得到的 p_0 (分布见图 13)代入面向目标的误差估计计算梁自由端挠度的仿真误差, 结果和单元分布如下。计算估计误差: 1.88×10^{-6} m (0.609%), 如图 16 所示。

对整个算例分析部分进行一个小结, 各种情况下的比较结果如表 1 所示。

表 1 线性面向目标误差估计精度检验小结

Table 1 Summary of linear FEM goal-oriented error estimation examples

u_0 网格类型	C3D8, 6 单元	C3D8, 6 单元	C3D20, 6 单元	C3D8, 24 单元	C3D8, 24 单元	C3D20, 24 单元
(p_0 网格类型)	(C3D8, 6 单元)	(C3D20, 6 单元)	(C3D20, 6 单元)	(C3D8, 24 单元)	(C3D20, 24 单元)	(C3D20, 24 单元)
有限元误差	2.85×10^{-3}	2.85×10^{-3}	2.13×10^{-5}	2.32×10^{-3}	2.32×10^{-3}	2.00×10^{-6}
估计误差	1.59×10^{-6}	2.80×10^{-3}	2.20×10^{-5}	1.64×10^{-6}	2.40×10^{-3}	1.88×10^{-6}
比值	5.56×10^{-4}	0.982	1.03	7.05×10^{-4}	1.03	0.938

图 15 C3D20, 24 单元计算 u_0 分布

Figure 15 Distribution of u_0 with 24 C3D20 elements.

图 16 u_0 采用 C3D20, p_0 采用 C3D20 下的误差分布

Figure 16 Distribution of error by goal-oriented error estimation calculation. u_0 : 24 C3D20 elements; p_0 : 24 C3D20 elements.

3 结论

通过以上比较结果可见, 除了 u_0 , p_0 均使用一阶单元的情况误差估计相差较大外, 无论误差本身的大小, 计算误差限与实际有限元误差相近。 u_0 , p_0 均完全无法保证精度时的误差估计量失真属正常情况。计算误差分布在梁受力端和固支端有集中, 符合基本原理的推论。由于实际上在目前实现的线性面向目标误差估计中, 相当于省掉了公式(13)中的第二项, 因此对于估计精度而言还是有一定影响的, 而且无法进行误差估计的范围计算。但是即使如此, 对于线性的悬臂梁问题, 线性面向目标误差估计还是给出了比较合理的结果。

对于这种有限元的面向目标估计方法, 目前仅

限于在小规模简单问题中实现, 进一步的计算分析, 如非线性和动态计算研究将对其最终走向工程应用产生重大影响. 非线性问题和动态计算都将改变估

计计算中能量积分的形式^[12,13], 对于偶问题的解耦计算带来困难, 如何实现针对此类问题的非解耦面向目标误差估计计算仍有待于进一步的研究.

参考文献

- 1 Oberkampf W L, Trucano T G. Verification and validation benchmarks. *Nucl Eng Des*, 2008, 238: 716–743
- 2 Schwer L. Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics. New York: American Society of Mechanical Engineers, 2006
- 3 Oberkampf W L, Sindar M N, Conlisk A T. Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations. AIAA Paper, 1998, AIAA-G-077-1998
- 4 Alvin K F, Oberkampf W L, Diegert K V, et al. Uncertainty quantification in computational structural dynamics: A new paradigm for model validation. In: IMAC-Proceedings Of The 16th International Modal Analysis Conference, Vols 1 and 2, 3243, 1998. 1191–1198
- 5 Oden J T, Prudhomme S, Bauman P. On the extension of goal-oriented error estimation and hierarchical modeling to discrete lattice models. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2005, 194: 3668–3688
- 6 Ainsworth M, Oden J T. A posteriori error estimation in finite element. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1997, 142: 1–88
- 7 Prudhomme S, Oden J T. Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method. *Comput Math Appl*, 2001, 41: 735–756
- 8 Gratsch T, Bathe K J. A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis. *Comput Struct*, 2005, 83: 235–265
- 9 Prudhomme S, Oden J T. On goal-oriented error estimation for elliptic problems: Application to the control of pointwise errors. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1999, 176: 313–331
- 10 Ruter M, Stein E. Goal-oriented a posteriori error estimates in linear elastic fracture mechanics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2006, 195: 251–278
- 11 Oden J T, Prudhomme S. Estimation of modeling error in computational mechanics. *J Comput Phys*, 2002, 182: 496–515
- 12 Chamoin L, Ladevèze P. Strict and practical bounds through a non-intrusive and goal-oriented error estimation method for linear viscoelasticity problems. *Finite Elem Anal Des*, 2009, 45: 251–262
- 13 Fuentes D, Littlefield D, Oden J T, et al. Extensions of goal-oriented error estimation methods to simulations of highly-nonlinear response of shock-loaded elastomer-reinforced structures. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2006, 195: 4659–4680

Goal-oriented error estimation for linear finite element method

LIN ZhiJia, YOU XiaoChuan & ZHUANG Zhuo*

School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China

V&V (verification and validation) are the primary means to access the accuracy and reliability of simulations. A large computer simulation is useful only when reliability of its result is strictly quantitative. For FEM simulation, the result contains all kinds of information. But the designers only care about some special purpose. The aim of the simulation is to check whether a design is fit the purpose. The goal-oriented error estimation approach uses classical duality techniques involving the solution of an adjoint problem to calculate the error of that purpose. In this work, we set up a program for goal-oriented error estimation on linear FEM simulation. It's a start of practical use for numerical simulation error estimation of engineering applications.

FEM, verification and validation, goal-oriented, error estimation

PACS: 21.10.Jx, 46.90.+s, 46.15.-x

doi: 10.1360/132010-977