

Estima de error residual explícita para cantidades de interés utilizando funciones burbuja

Richard Rosales^{1,2}

¹ Departamento de Cálculo, Facultad de Ingeniería, Universidad de Los Andes
La Hechicera, 5101 Mérida, República Bolivariana de Venezuela
rrra@ula.ve

Pedro Díez²

² Laboratori de Càlcul Numèric, Departament de Matemàtica Aplicada III,
Universitat Politècnica de Catalunya, Mòdul C2, Jordi Girona 1-3, E-08034 Barcelona, España
pedro.diez@upc.edu

Resumen

En este trabajo se introduce un nuevo estimador de error residual explícito a posteriori para problemas elípticos orientado a cantidades de interés. Se propone utilizar funciones burbuja sobre elementos y sobre aristas. Se parte de la solución de elementos finitos del problema primal y de la de un problema adjunto (o dual), asociado a una cantidad de interés definida por el usuario. Por ejemplo, la variación de temperatura o el desplazamiento de un punto del dominio.

La estima se calcula en dos fases. Primero se aproxima el error en el interior de los elementos utilizando una función burbuja. La aproximación del error interior sobre todo el dominio será dada como una combinación lineal de estas funciones. En segundo lugar, se introduce otra familia de funciones burbuja, asociada a las aristas de la malla (lados de los elementos) y se complementa la primera fase de la estima añadiendo la contribución al error que proviene de las aristas.

A diferencia de los estimadores del error explícitos habituales, el que se propone aquí no depende de constantes desconocidas. Esto es posible debido a que a pesar del carácter explícito del estimador, se está aproximando la función de error asociada a uno de los problemas (el directo o el adjunto) en un espacio de interpolación muy sencillo (el que definen las funciones burbuja). El cálculo explícito del residuo corresponde sólo al otro de los dos problemas.

Palabras clave: *estima de error a posteriori, adaptividad orientada al resultado, estimadores explícitos, funciones burbuja.*

EXPLICIT RESIDUAL TYPE ERROR ESTIMATES FOR QUANTITIES OF INTEREST USING BUBBLE FUNCTIONS

Summary

A new goal-oriented residual a posteriori error estimator is introduced for elliptic problems. The proposed estimate is based on using bubble functions over both elements and edges. The error representation of the quantity of interest prescribed by the user is performed using an adjoint problem. These quantities of interest are either averaged values of the solution (mean temperature) or point values as, for instance, the displacement of a given point.

The estimation procedure is organized in two phases. First, the error is approximated in the interior of the elements projecting it into a given bubble function. The first contribution to the overall error (interior estimate) is just the sum of all these projections. Second, a new family of bubble functions is considered, each associated with one edge of the finite element mesh. The remaining part of the error is projected into this new family of functions. This second error contribution (edge estimate) is added to the previous one to obtain the complete estimate.

The present estimator is independent of the typical unknown constants appearing in explicit residual type estimates. Despite of its explicit character, the present estimator gets rid of these constants by properly combining the residuals in the adjoint and direct problems, although both are explicitly computed.

Keywords: *a posteriori error estimates, goal-oriented adaptivity, explicit estimates, bubble functions.*

INTRODUCCIÓN

En la literatura se describen numerosos estimadores de error para elementos finitos, véase por ejemplo [1,2] y las referencias que citan. Los estimadores existentes se clasifican de varias maneras. Se clasifican en a priori o a posteriori según si requieren disponer de la solución numérica o no. Los estimadores a priori predicen la convergencia de la solución numérica al enriquecer la discretización, es decir al refinar la malla o aumentar el grado de interpolación. Nos centraremos aquí en estimadores a posteriori que proporcionan una evaluación concreta del error cometido en la solución numérica.

Teniendo en cuenta el error a estimar se clasifican en globales u orientados a un objetivo. Los globales evalúan normas energéticas del error y los orientados al objetivo evalúan cantidades de interés que fija el usuario. Los estimadores básicos son de tipo global, es decir aproximan la norma de la energía del error. Para representar el error en cantidades de interés cualesquiera a partir de la norma energética, se utilizan argumentos de dualidad que requieren introducir un problema auxiliar (problema adjunto o dual).

Entre los estimadores del error a posteriori globales se distinguen dos grandes familias: residuales y de suavizado (recovery). Los primeros resuelven de manera aproximada la ecuación residual del error, los segundos obtienen una solución mejorada mediante un método de postproceso.

Dentro de los residuales se distinguen los explícitos [4,5] que sólo requieren calcular integrales ponderadas de los residuos y los implícitos [7] que requieren resolver un problema local en el que el residuo juega un papel de término fuente. Entre los primeros se clasifican también los estimadores basados en la técnica de *Dual Weighted Residual* (DWR) [6] para los que se requiere contar con una aproximación mejorada de la solución del problema adjunto. Entre los implícitos se encuentran los que toman a los elementos como soporte de los problemas locales del error (element residual methods[7] y aquellos que utilizan otros subdominios, generalmente patches de elementos (subdomain residual methods [4]).

Los estimadores de suavizado pueden basarse en postprocesar el campo de flujos (o tensiones) [8,9,10] o bien el campo de variables primales (temperaturas, desplazamientos...) [11,12,13].

En este trabajo se seguirán algunas de las ideas presentadas en [12] y [14]. En [12] utilizan una forma de representar el error en cantidades de interés a partir del residuo aplicado a un error obtenido por postproceso. En [14] se estima el error teniendo en cuenta la contribución del error tanto sobre el interior de los elementos como sobre las aristas. Teniendo en cuenta lo anterior, se presenta una estima de error *a posteriori*, que en la práctica se puede considerar explícita, orientada a cantidades de interés. Para ello se utilizarán funciones burbuja sobre elementos y sobre aristas.

La estima presentada es cuasi-explícita y, aún así, independiente de constantes arbitrarias. Se calcula en dos fases, la primera evalúa el error asociado al interior de los elementos y la segunda a las aristas.

El apartado 2 presenta el planteamiento del problema, las ecuaciones básicas y la cantidad de interés escogida, incluyendo el problema adjunto y la representación del error. En la presentación se toma como problema modelo la ecuación de Poisson. En el apartado 3 se presenta la estima de error en cantidades de interés a partir de funciones burbuja. El apartado 4 discute la elección de la función burbuja interior y la burbuja sobre arista que se utilizan en este trabajo. El apartado 5 muestra los resultados numéricos obtenidos con la estrategia introducida en problemas que se han utilizado como referencia por diversos autores [15,16] y en un problema mecánico, presentando también procesos adaptativos guiados por el estimador propuesto según criterios dados en [17]. Finalmente, el apartado 6 contiene las conclusiones del trabajo.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En esta sección se presenta el problema de valores en la frontera a resolver y las ecuaciones básicas.

Problema modelo

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, con $d = 2$ ó $d = 3$, un dominio abierto y acotado con frontera suave a trozos $\partial\Omega = \bar{\Gamma}_N \cup \bar{\Gamma}_D$, con $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$. Γ_N es la parte de la frontera donde se imponen condiciones del tipo Neumann y Γ_D la parte donde se imponen condiciones del tipo Dirichlet. El modelo matemático que rige el problema viene dado por la ecuación de equilibrio y condiciones de contorno:

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{en } \Omega \\ \partial u / \partial \mathbf{n} = u_N & \text{en } \Gamma_N \\ u = \bar{u} & \text{en } \Gamma_D, \end{cases} \quad (1)$$

donde Δ es el operador Laplaciano espacial, u representa la temperatura, f es el término fuente, u_N es el flujo de calor prescrito sobre la porción de contorno Γ_N con normal unitaria exterior \mathbf{n} y \bar{u} la temperatura prescrita sobre Γ_D .

En los ejemplos se presenta también un problema mecánico, pero para describir la formulación se optó por esta versión escalar del problema.

Forma variacional del problema y residuo primal

El espacio de funciones V , donde se encuentra la solución del problema (1), se define como

$$V := \{u \in \mathcal{H}^1(\Omega) : u = \bar{u} \text{ en } \Gamma_D\},$$

y el espacio de variaciones, V_0 , se define como

$$V_0 := \{u \in \mathcal{H}^1(\Omega) : u = 0 \text{ en } \Gamma_D\}.$$

Para calcular una solución aproximada del problema (1) usando el método de los elementos finitos (MEF) establecemos su formulación variacional, que consiste en:

encontrar $u \in V$ tal que

$$a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in V, \quad (2)$$

donde la forma bilineal $a(\cdot, \cdot)$ y el funcional lineal $L(\cdot)$ quedan definidos por

$$a(u, v) := \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega, \quad L(v) := \int_{\Omega} f v \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} u_N v \, ds.$$

La solución de elementos finitos u_H de (2) pertenece al espacio funcional discreto $V_H \subset V$, inducido por la discretización del dominio Ω en elementos Ω_k , $k = 1, \dots, n_{el}$, tales que

$$\bar{\Omega} = \bigcup_k \bar{\Omega}_k, \quad \Omega_k \cap \Omega_j = \emptyset \text{ para } k \neq j$$

y verificando

$$a(u_H, v) = L(v), \quad \forall v \in V_{H_0} \subset V_0, \quad (3)$$

con V_{H_0} la contraparte discreta del espacio V_0 .

El error numérico asociado a u_H se denota por $e := u - u_H$, pertenece al espacio V_0 y satisface la ecuación del error

$$a(e, v) = L(v) - a(u_H, v) =: R^P(v), \quad \forall v \in V_0, \quad (4)$$

donde $R^P(\cdot)$ define el *residuo débil* o *residuo primal* asociado a u_H .

Cantidad de interés y problema dual

Dado un funcional lineal $J(\cdot)$, se quiere controlar el error en la evaluación de $J(u)$. La precisión de $J(u_H)$ se puede estimar en términos del error $J(e) = J(u) - J(u_H)$. Aunque idealmente se debería calcular e utilizando (4) y luego evaluar $J(e)$, el problema (4), aún en su versión discreta resulta demasiado costoso. Otra alternativa consiste en encontrar $J(e)$ con el residuo $R^P(\cdot)$ sin tener que calcular el error e , es decir, obtener $z \in V$ tal que $J(e) = R^P(z)$. De esta forma, se introduce el problema *dual o adjunto*, como un problema auxiliar para estimar el error en la cantidad de interés:

encontrar $z \in V_0$ tal que

$$a(v, z) = J(v), \quad \forall v \in V_0. \quad (5)$$

Como se puede ver en [13], z indica cómo el residuo afecta la cantidad $J(e)$. Por otra parte, si z pudiese ser determinado exactamente, se podría calcular $J(u)$ directamente a partir de los datos, ya que usando (2) y (5) se tiene

$$J(u) = a(u, z) = L(z).$$

Pero el problema dual (5) presenta las mismas dificultades de resolución que el problema primal (2) y para calcular $J(u)$ se requiere obtener z con la misma precisión que u . Por lo tanto, es necesario introducir la solución de elementos finitos $z_H \in V_H$ que satisface:

$$a(v, z_H) = J(v), \quad \forall v \in V_{H_0}. \quad (6)$$

El error asociado a z_H se denota por $\varepsilon = z - z_H$ y es la solución de la ecuación del error

$$a(v, \varepsilon) = J(v) - a(v, z_H) =: R^D(v), \quad \forall v \in V_0, \quad (7)$$

donde $R^D(\cdot)$ es llamado *residuo débil* o *residuo dual* asociado a z_H .

En [15] y [16] se analizan cantidades de interés representadas por funcionales lineales. En este trabajo se restringirá la atención a funcionales lineales de la forma

$$J(u) = (j, u),$$

donde (\cdot, \cdot) representa el producto interno usual en $L_2(\Omega)$ y la función $j \in L_2(\Omega)$ es la representación de Riesz de $J(\cdot)$. Luego, la forma fuerte del problema dual (5) es:

encontrar $z \in V_H$ tal que

$$\begin{cases} -\Delta z = j & \text{en } \Omega \\ \partial z / \partial \mathbf{n} = 0 & \text{en } \Gamma_N \\ z = 0 & \text{en } \Gamma_D \end{cases} \quad (8)$$

Una de las cantidades de interés utilizadas en este trabajo, es el valor de la solución en un punto \mathbf{x}_0 , dado. En este caso se tiene que

$$j = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \text{ y } J(u) = u(\mathbf{x}_0).$$

Pero es sabido (ver [16]) que el funcional lineal J definido así, produce singularidades en el problema dual. Para sortear esta dificultad se utiliza

$$j(\mathbf{x}) = W_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0),$$

donde las funciones W_ϵ forman una familia de funciones infinitas veces diferenciables, caracterizadas por el parámetro ϵ y se obtiene el funcional

$$J(u) = \int_{\Omega} u(\mathbf{x})W_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) d\Omega.$$

La cantidad $J(u)$ ($\approx u(\mathbf{x}_0)$) es el promedio de u sobre una pequeña vecindad de \mathbf{x}_0 . En este trabajo, las funciones W_ϵ , son escogidas como

$$W_\epsilon(\mathbf{x}) := \begin{cases} Ce^{-\epsilon^2/(\epsilon^2 - \|\mathbf{x}\|^2)} & \text{if } \|\mathbf{x}\| < \epsilon \\ 0 & \text{if } \|\mathbf{x}\| \geq \epsilon, \end{cases} \quad (9)$$

con $\mathbf{x}_0 \in \Omega$ y $\epsilon > 0$ dados y la constante C es tal que

$$\int_{\Omega} W_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) d\Omega = 1.$$

Representación del error

Para estimar el error en la cantidad de interés, $J(e)$, a partir de estimas globales o energéticas, es conveniente utilizar el problema adjunto (5) para determinar diferentes representaciones de este error. Tomando $v = e$ en (5), se sigue que $J(e) = a(e, z)$ ($= R^P(z)$), y luego de tener en cuenta la propiedad de ortogonalidad de Galerkin ($R^P(z_H) = 0$) queda

$$J(e) = R^P(\epsilon). \quad (10)$$

Usando de nuevo la propiedad de ortogonalidad de Galerkin ($a(e, v_H) = 0 \quad \forall v_H \in V_{H_0}$) se llega a

$$J(e) = R^D(e). \quad (11)$$

Este resultado se puede encontrar en [13] o [12] enunciado de la siguiente forma:

Teorema 1 Sean u_H, z_H aproximaciones en V_H de los problemas primal (2) y dual (5). Entonces, el error en la cantidad de interés $J(e)$, asociado a estas soluciones se puede representar en las formas dadas en (10) y (11).

ESTIMA CON FUNCIÓN BURBUJA

En este trabajo se propone estimar el error en la evaluación de una cantidad de interés, $J(e)$, utilizando la solución de elementos finitos de un problema primal y uno adjunto. Para ello, se buscará una aproximación del error del problema adjunto, válida desde el punto de vista energético, a través de la suma del *error interior*, ϵ^{int} y del *error sobre aristas*, ϵ^{edg} (ver [14]), es decir

$$\epsilon \approx \epsilon^{int} + \epsilon^{edg}. \quad (12)$$

Luego, teniendo en cuenta la representación energética del error en la cantidad de interés (10), se presenta una estima con funciones burbuja. La estima es del tipo residual dual ponderado como los presentados en [6].

Residuo interior

Para aproximar el error sobre el interior de los elementos, se define una función $\psi(\xi, \eta)$ de soporte compacto sobre el elemento de referencia $\Omega^{(r)} =]-1, 1[\times]-1, 1[$. Esta función burbuja será mapeada como ψ_k sobre cada elemento físico Ω_k del dominio. El error interior se aproximará por medio de una combinación lineal de las burbujas ψ_k , es decir,

$$\varepsilon^{int} := \sum_{k=1}^{n_{el}} c_k \psi_k, \quad (13)$$

para ciertas constantes c_k .

Escogiendo ψ con una suavidad apropiada, ψ_k pertenecerá a V_0 para todo k .

Para determinar las constantes c_k , tomemos $v = \psi_k$ en (7) y se tiene

$$a(\psi_k, \varepsilon) = R^D(\psi_k).$$

Usando (13), la bilinealidad de $a(\cdot, \cdot)$, la ortogonalidad de las ψ_k (son ortogonales puesto que tienen soportes disjuntos) y luego de algunos cálculos se llega a

$$c_k = \frac{R^D(\psi_k)}{a(\psi_k, \psi_k)}. \quad (14)$$

Luego, de (13) y (14) se obtiene la siguiente expresión para el error interior:

$$\varepsilon^{int} = \sum_{k=1}^{n_{el}} \frac{R^D(\psi_k)}{a(\psi_k, \psi_k)} \psi_k.$$

Aplicando el residuo primal \mathcal{R}^P en la expresión anterior obtenemos el *residuo interior*

$$\mathcal{R}^P(\varepsilon^{int}) = \sum_{k=1}^{n_{el}} \frac{R^D(\psi_k) \mathcal{R}^P(\psi_k)}{a(\psi_k, \psi_k)}. \quad (15)$$

Residuo sobre aristas

Dada la aproximación del error interior como se indica en el apartado anterior, se quiere mejorar la estima del error en la cantidad de interés, tomando en cuenta la contribución del error sobre aristas. Con este fin, para cada arista $\gamma_l = \overline{\Omega_k} \cap \overline{\Omega_{k'}}$ ($l = 1, \dots, n_{ed}$) de la malla de elementos finitos, se define una función χ_l , de soporte compacto en el subconjunto $\Lambda_l \subset \overline{\Omega_k} \cup \overline{\Omega_{k'}}$, con $k \neq k'$. Ω_k y $\Omega_{k'}$ son los elementos que comparten la arista γ_l , como se puede observar en la Figura 1.

El error sobre aristas será aproximado a través de una combinación lineal de las funciones burbuja χ_l ,

$$\varepsilon^{edg} := \sum_{l=1}^{n_{ed}} d_l \chi_l \quad (16)$$

con d_l constantes. De (12) se puede escribir

$$\varepsilon^{edg} \approx \varepsilon - \varepsilon^{int}$$

y luego de algunos cálculos se llega a

$$a(v, \varepsilon^{edg}) = R^D(v) - a(v, \varepsilon^{int}).$$

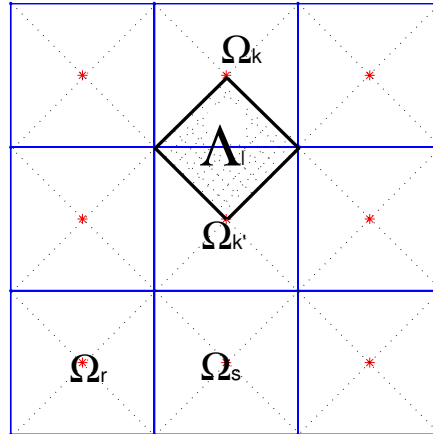


Figura 1. Soporte de funciones burbuja sobre aristas

Tomando $v = \chi_l$, teniendo en cuenta (16) y la linealidad de $a(\cdot, \cdot)$ se obtiene

$$\sum_{\alpha} d_{\alpha} a(\chi_l, \chi_{\alpha}) = R^D(\chi_l) + a(\chi_l, \varepsilon^{int}).$$

Como las funciones χ_l son escogidas ortogonales entre si (las Λ_l son los soportes de χ_l y son disjuntos), se sigue que

$$d_l = \frac{R^D(\chi_l) - a(\chi_l, \varepsilon^{int})}{a(\chi_l, \chi_l)}. \tag{17}$$

Por otro lado, como χ_l tiene soporte compacto sobre Λ_l , se tiene

$$a(\chi_l, \varepsilon^{int}) = c_{k'} a(\chi_l, \psi_{k'}) + c_k a(\chi_l, \psi_k).$$

En consecuencia

$$d_l = \frac{R^D(\chi_l) - c_{k'} a(\chi_l, \psi_{k'}) - c_k a(\chi_l, \psi_k)}{a(\chi_l, \chi_l)}.$$

Por lo tanto, el *residuo sobre aristas*, $\mathcal{R}^P(\varepsilon^{edg})$, queda

$$\mathcal{R}^P(\varepsilon^{edg}) = \sum_{l=1}^{n_{ed}} \frac{R^D(\chi_l) - c_{k'} a(\chi_l, \psi_{k'}) - c_k a(\chi_l, \psi_k)}{a(\chi_l, \chi_l)} \mathcal{R}^P(\chi_l),$$

que podemos escribir como

$$\mathcal{R}^P(\varepsilon^{edg}) = \sum_{l=1}^{n_{ed}} \frac{R^D(\chi_l) - c_k a(\chi_l, \psi_k)}{a(\chi_l, \chi_l)} \mathcal{R}^P(\chi_l), \tag{18}$$

teniendo en cuenta que tendremos tantos sumandos en k como elementos compartan la arista γ_l .

Estimadores propuestos

De (10), (12) y la linealidad de $R^P(\cdot)$, se sigue que el error en la cantidad de interés $J(e)$ representada a través de $R^P(\varepsilon)$ se puede aproximar como la suma de los residuos interior y sobre aristas, es decir

$$J(e) = R^P(\varepsilon) \approx R^P(\varepsilon^{int}) + R^P(\varepsilon^{edg}) =: E_1. \quad (19)$$

Luego, usando la parte derecha de (19), (15) y (18), se obtiene la siguiente estima del error:

$$R^P(\varepsilon) \approx E_1 := \sum_{k=1}^{n_{el}} c_k R^P(\psi_k) + \sum_{l=1}^{n_{ed}} d_l R^P(\chi_l), \quad (20)$$

donde

$$c_k = \frac{R^D(\psi_k)}{a(\psi_k, \psi_k)} \quad \text{y} \quad d_l = \frac{R^D(\chi_l) - c_{k'} a(\chi_l, \psi_{k'}) - c_k a(\chi_l, \psi_k)}{a(\chi_l, \chi_l)}$$

Procediendo de manera análoga a la construcción de la estima E_1 pero aproximando el error del problema primal (2), $e \approx e^{int} + e^{edg}$, como la suma de las contribuciones interiores y sobre aristas, y usando la representación del error (11), se obtiene la estima

$$R^D(e) \approx E_2 := \sum_{k=1}^{n_{el}} \tilde{c}_k R^D(\psi_k) + \sum_{l=1}^{n_{ed}} \tilde{d}_l R^D(\chi_l) \quad (21)$$

donde

$$\tilde{c}_k = \frac{R^P(\psi_k)}{a(\psi_k, \psi_k)} \quad \text{y} \quad \tilde{d}_l = \frac{R^P(\chi_l) - c_{k'} a(\chi_l, \psi_{k'}) - c_k a(\chi_l, \psi_k)}{a(\chi_l, \chi_l)}.$$

Sustituyendo las constantes indicadas y reordenando las expresiones, las estimas se pueden escribir como:

$$E_1 = \sum_{k=1}^{n_{el}} \frac{R^P(\psi_k) R^D(\psi_k)}{a(\psi_k, \psi_k)} + \sum_{l=1}^{n_{ed}} \frac{R^P(\chi_l) R^D(\chi_l)}{a(\chi_l, \chi_l)} - \sum_{l=1}^{n_{ed}} \frac{R^P(\chi_l) a(\chi_l, \psi_k) R^D(\psi_k)}{a(\chi_l, \chi_l) a(\psi_k, \psi_k)}$$

$$E_2 = \sum_{k=1}^{n_{el}} \frac{R^P(\psi_k) R^D(\psi_k)}{a(\psi_k, \psi_k)} + \sum_{l=1}^{n_{ed}} \frac{R^P(\chi_l) R^D(\chi_l)}{a(\chi_l, \chi_l)} - \sum_{l=1}^{n_{ed}} \frac{R^P(\psi_k) a(\psi_k, \chi_l) R^D(\chi_l)}{a(\psi_k, \psi_k) a(\chi_l, \chi_l)}$$

Observación 1 Note que las estimas E_1 y E_2 difieren solo en el último término.

Observación 2 En ambos casos se observa una primera sumatoria correspondiente a la contribución del error interior, una segunda sumatoria correspondiente a la contribución del error sobre aristas y una tercera sumatoria correspondientes a la ortogonalización de ambas contribuciones.

FUNCIÓN BURBUJA

Las funciones burbujas a utilizar en los cálculos con las estimas presentadas son funciones no negativas de soporte compacto. Los dos tipos de funciones burbujas son las burbujas interiores, soportadas sobre un solo elemento y las funciones burbujas sobre aristas, soportadas en uno o en un par de elementos, dependiendo de si la arista es frontera o interior. Como es típico en el cálculo con el método de elementos finitos, se definen las funciones burbujas sobre un elemento de referencia y luego se construye la función burbuja sobre el

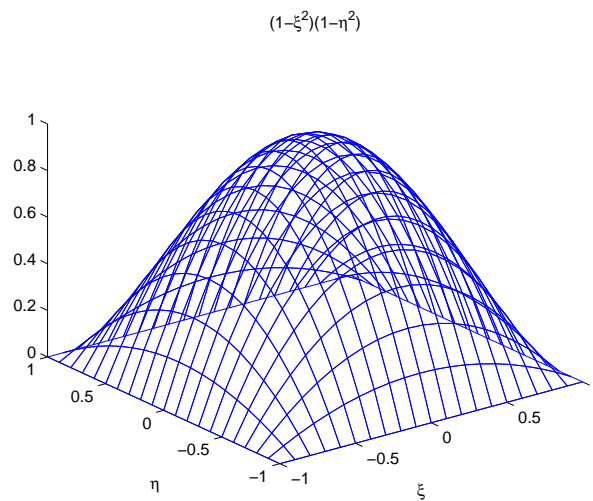


Figura 2. Función burbuja interior en el elemento de referencia

elemento físico usando una aplicación lineal o afín desde el elemento de referencia hacia el elemento físico.

La función burbuja interior sobre un elemento de referencia cuadrilátero que hemos usado en nuestros ejemplos se define por

$$\psi(\xi, \eta) = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)$$

y se puede observar en la Figura 2. Por otro lado, para definir la función burbuja sobre arista se ha realizado un lazo sobre los elementos. Si una arista γ forma parte de dos elementos Ω_k y $\Omega_{k'}$, la mitad de la función definida sobre Ω_k se define cuando el lazo pase por ese elemento y la función burbuja quedará totalmente definida cuando el lazo pase por el elemento $\Omega_{k'}$. El lazo sobre cada elemento realiza los cálculos correspondientes a las cuatro funciones burbujas sobre aristas correspondientes a las cuatro aristas que lo forman. La función burbuja de referencia se define por

$$\chi(\xi, \eta) = (\xi^2 - \eta^2)(\xi^2 - (\eta + 2)^2)$$

para la primera arista del elemento Ω_k , mientras que para las otras tres aristas del elemento, las funciones se definen como rotaciones de la primera, en sentido antihorario, como se puede observar en la Figura 3.

RESULTADOS NUMÉRICOS

En los primeros tres problemas presentados a continuación, se trabajará sobre el dominio

$$\Omega =]0, 1[\times]0, 1[\subset \mathbb{R}^2.$$

Se utilizarán elementos cuadriláteros con funciones de forma bilineales (elementos Q1Q1). En cada caso se especificará las condiciones de contorno prescritas. La cantidad de interés está representada por $J(\cdot)$ y en cada ejemplo se indicará como ha sido escogida. E_k representa la estima del error que puede tomar los valores $E_1 \approx R^P(\varepsilon)$ ó $E_2 \approx R^D(e)$. Como la

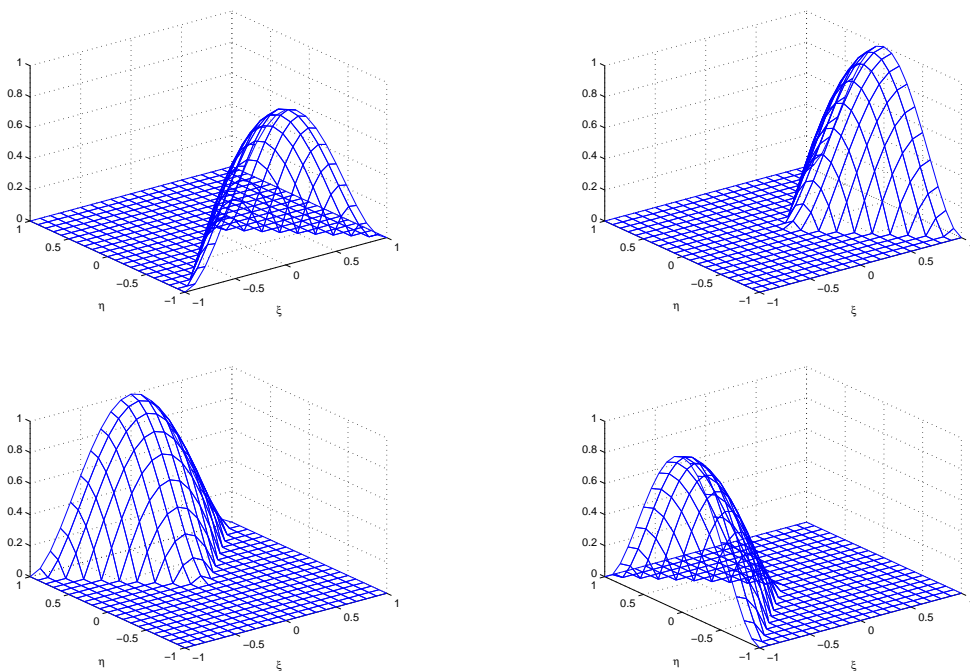


Figura 3. Funciones burbujas sobre aristas en el elemento de referencia

estima E_k aproxima el error en la cantidad de interés, $E_k \approx J(e) = J(u) - J(u_H)$, el error relativo de la aproximación se define por

$$e_{rel} := \left| \frac{E_k}{J(u)} \right|,$$

cuando la solución exacta es conocida, y por

$$e_{rel} := \left| \frac{E_k}{J(u^{ref})} \right|,$$

cuando u no es conocida, siendo u^{ref} una solución de referencia.

El índice de efectividad, representado por Θ_k , está definido por

$$\Theta_k = \frac{E_k}{J(e)},$$

cuando la solución es conocida analíticamente y en caso contrario

$$\Theta_k = \frac{E_k}{J(e^{ref})},$$

donde $J(e^{ref}) = J(u^{ref}) - J(u_H)$.

Ejemplo 1: Cantidad de interés: Valor medio de la solución

Se resuelve el problema (1), con $f = -2$. El contorno Dirichlet es

$$\Gamma_D = \Gamma_{D_1} \cup \Gamma_{D_2} = \{(x, y) \in \bar{\Omega} : x = 0\} \cup \{(x, y) \in \bar{\Omega} : x = 1\},$$

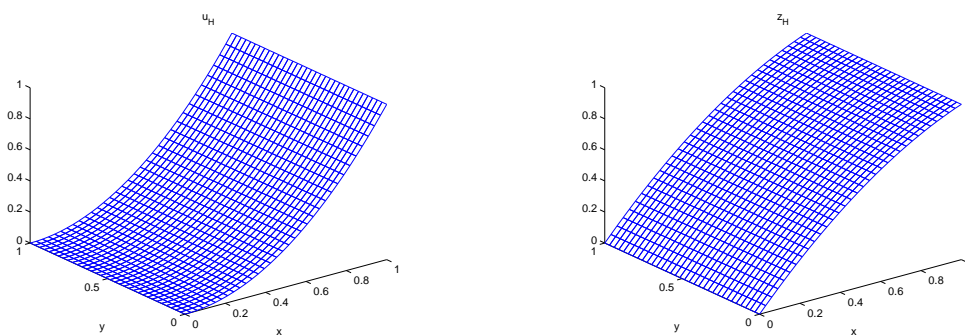


Figura 4. Ejemplo 1: Soluciones de elementos finitos, izq: primal der: dual

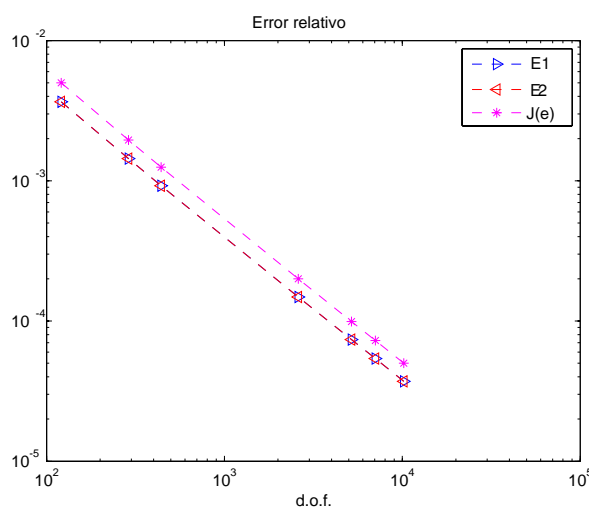


Figura 5. Ejemplo 1: Error relativo de las estimas y de la solución analítica usando mallas uniformes

con $\bar{u} = 0$ en Γ_{D_1} y $\bar{u} = 1$ en Γ_{D_2} . En el resto del contorno se imponen condiciones naturales (Figura 4).

En el problema dual (8) se escoge $j = 1$ con condiciones de contorno similares a las prescritas en el problema primal. Aquí, $\bar{z} = 0$ en Γ_{D_1} y $\bar{z} = 1$ en Γ_{D_2} . Con esta elección, como Ω tiene área unitaria, $|\Omega| = 1$, se tiene que

$$J(u) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u(\mathbf{x})d\Omega.$$

Luego, se estimará el error en el valor medio de u .

Utilizando mallas uniformes se obtuvo el error relativo mostrado en la Figura 5, donde se puede observar que las estimas E_1 y E_2 tienen el mismo orden de convergencia que el valor teórico del error $J(e)$. En este caso, los valores de E_1 y E_2 coinciden exactamente, debido a que los problemas primal y dual son iguales salvo el término fuente.

El índice de efectividad global de las estimas E_1 y E_2 es de aproximadamente 0.74 y se comportan como cota inferior del error, como se puede observar en la Figura 6.

En la Tabla I se presentan de izquierda a derecha los resultados obtenidos correspondientes a: malla, donde la 0 representa la inicial, n_{el} , el número de elementos de la malla,

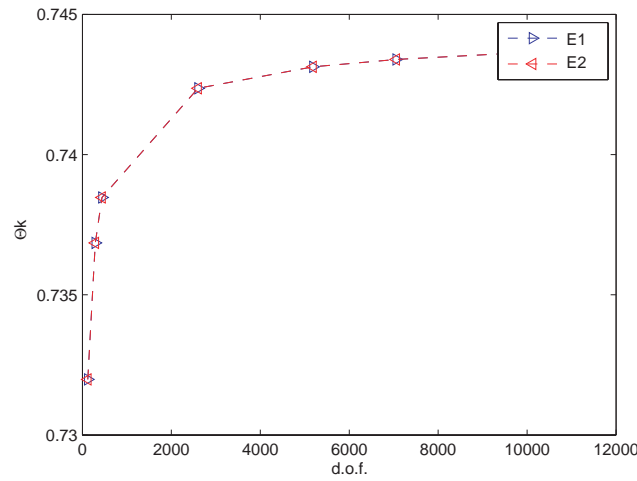


Figura 6. Ejemplo 1: Índice de efectividad usando mallas uniformes

mallá	n_{el}	$J(e)$	$E_1 (= E_2)$	e_{rel}	$\Theta_1 (= \Theta_2)$
0	100	-0.166×10^{-2}	-0.122×10^{-2}	0.36 %	0.731
1	256	-0.651×10^{-3}	-0.479×10^{-3}	0.14 %	0.736
2	400	-0.416×10^{-3}	-0.307×10^{-3}	0.09 %	0.738
6	10000	-1.666×10^{-5}	-1.123×10^{-5}	0.003 %	0.743

Tabla I. Ejemplo 1: Malla, número de elementos, error analítico en la cantidad de interés, estima, error relativo de la estima e índice de efectividad sobre varias *mallas uniformes*

$J(e)$, el error teórico en la cantidad de interés, E_1 y E_2 , las estimas presentadas, e_{rel} el error relativo a $J(u)$, Θ_k , $k = 1, 2$, el índice de efectividad global de las estimas.

Ejemplo 2: Cantidad de interés: Valor puntual de la solución

Se resuelve el problema (1), con f escogido de modo que la solución exacta del problema es

$$u(x, y) = 5x^2(1-x)^2(e^{10x^2} - 1)y^2(1-y)^2(e^{10y^2} - 1).$$

El contorno Dirichlet es

$$\Gamma_D = \{(x, y) \in \bar{\Omega} : 0 < x < 1, y = 0\}.$$

con $\bar{u} = 0$ en Γ_D . En el resto del contorno se imponen condiciones naturales.

En el problema dual (8) se escoge $j = W_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, con $\mathbf{x}_0 = (0.6, 0.4)$, $\epsilon = 10^{-2}$ y $W_\epsilon(\cdot)$ dada en (9). Las condiciones de contorno se toman similares a las prescritas en el problema primal. Aquí, $\bar{z} = 0$ en Γ_D . Con esta elección se tiene que la cantidad de interés está definida como el valor ponderado de la solución en un ϵ -entorno del punto x_0 ,

$$J(u) = \int_{\Omega} u(x)W_\epsilon(x - x_0)d\Omega$$

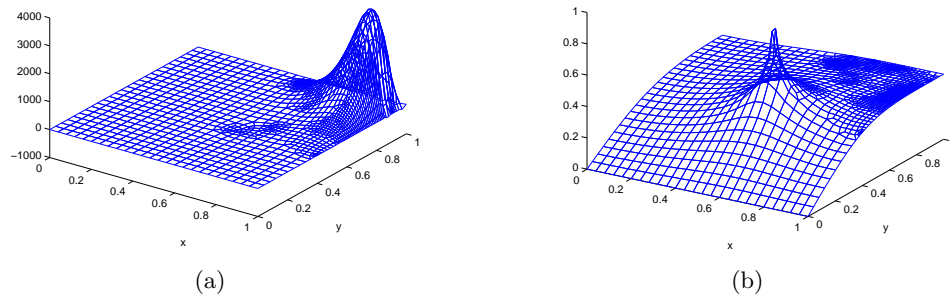


Figura 7. Ejemplo 2: Soluciones de elementos finitos, izq: primal der: dual

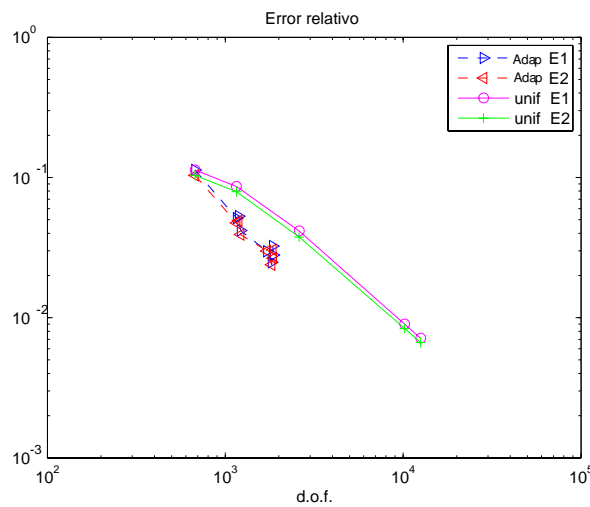


Figura 8. Ejemplo 2: Error relativo de las estimas sobre mallas adaptadas(Adap) y uniformes (unif)

Se quiere estimar el error de aproximación en la evaluación de la solución en x_0 , a través de $u(\mathbf{x}_0) \approx J(u)$, con una tolerancia del 3 por ciento como en [16].

La solución del problema primal es suave aunque exhibe gradientes muy pronunciados cerca del contorno como se puede observar en la Figura 7a. La solución dual se puede observar en la Figura 7b. Usando los estimadores aquí presentados para generar mallas adaptadas, se pudo acelerar la convergencia del error relativo hacia la tolerancia dada, como se puede observar en la Figura 8, donde se comparan los errores relativos de las estimas sobre mallas adaptadas (Adap E1 y Adap E2) con los correspondientes a mallas uniformes (unif E1 y unif E2).

Los índices de efectividad global de las estimas se pueden ver en la Figura 9.

En la Tabla II se pueden observar los resultados obtenidos sobre diferentes mallas adaptadas. En esta tabla, $J(e)$ representa el error teórico, E_1 y E_2 las estimas calculadas, e_{rel} el error relativo de la estima y Θ_1 y Θ_2 los índices de efectividad globales. Con ambas estimas se logró alcanzar la tolerancia establecida del 3%. Algunas mallas adaptadas obtenidas se pueden ver en la Figura 10.

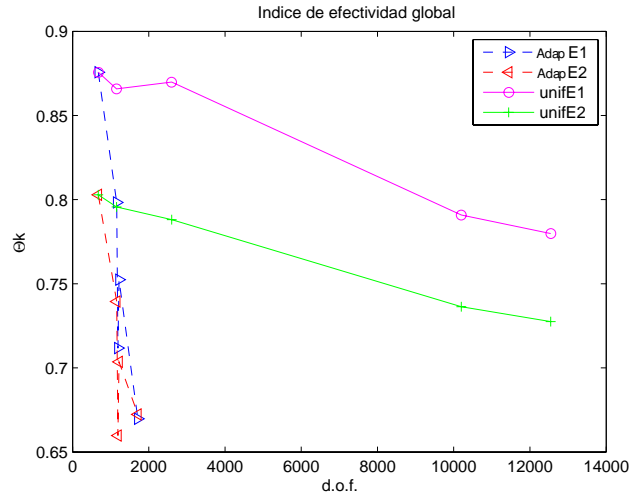


Figura 9. Ejemplo 2: Índice de efectividad sobre mallas adaptadas (Adap) y uniformes (unif)

mall	n_{el}	$J(e)$	E_1	e_{rel}	Θ_1
0	625	$-0.301 \times 10^{+0}$	$-0.264 \times 10^{+0}$	11.2%	0.87
1	1091	$-0.150 \times 10^{+0}$	$-0.119 \times 10^{+0}$	5.1%	0.79
2	1120	$-0.173 \times 10^{+0}$	$-0.123 \times 10^{+0}$	5.2%	0.71
6	1770	-0.938×10^{-1}	-0.654×10^{-1}	2.7%	0.69
			E_2		Θ_2
0	625	$-0.301 \times 10^{+0}$	$-0.242 \times 10^{+0}$	10.3%	0.80
1	1091	$-0.150 \times 10^{+0}$	$-0.110 \times 10^{+0}$	4.7%	0.73
2	1120	$-0.173 \times 10^{+0}$	$-0.114 \times 10^{+0}$	4.9%	0.65
6	1770	-0.938×10^{-1}	-0.621×10^{-1}	2.6%	0.66

Tabla II. Ejemplo 2: Malla, número de elementos, error en la cantidad de interés, estima, error relativo e índice de efectividad usando *mallas adaptadas*

Ejemplo 3: Cantidad de interés: Valor ponderado de la solución entorno de un punto

Se resuelve el problema (1), con f escogido de modo que la solución exacta del problema es

$$u(x, y) = x(0.6 + e^{-10.5(1-(x-0.5)^2/0.25^2-(y-0.5)^2/0.25^2)}).$$

Todo el contorno del dominio es tomado del tipo Dirichlet.

En el problema dual (8) se escoge $j = W_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, con $\mathbf{x}_0 = (0.5, 0.5)$, $\epsilon = 0.3$ y $W_\epsilon(\cdot)$ dada en (9). Las condiciones de contorno se toman similares a las prescritas en el problema primal. La cantidad de interés está definida como el valor ponderado de la solución en un ϵ -entorno del punto x_0 ,

$$J(u) = \int_{\Omega} u(x) W_\epsilon(x - x_0) d\Omega$$

La solución de elementos finitos del problema primal y del problema dual se puede observar en la Figura 11a, y Figura 11b, respectivamente. Usando el programa de mallado

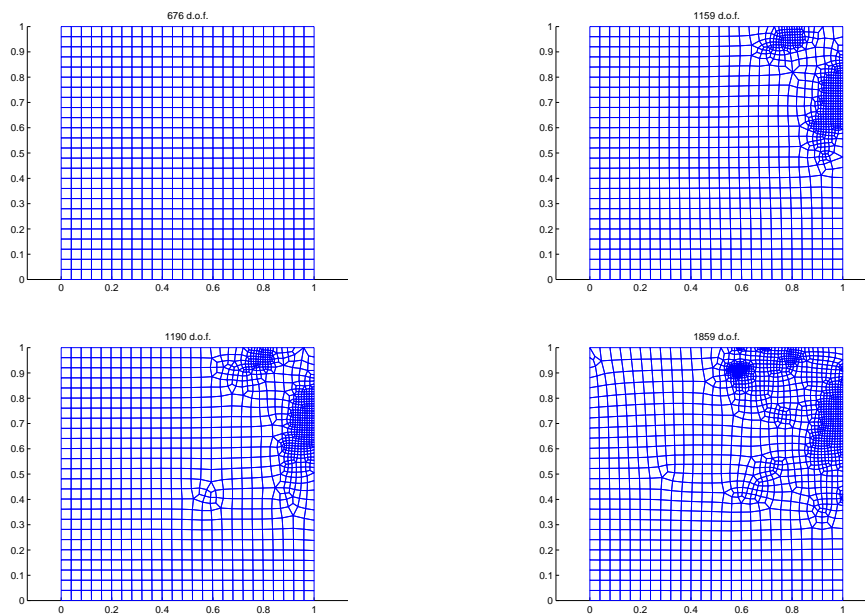


Figura 10. Ejemplo 2: Mallas adaptadas

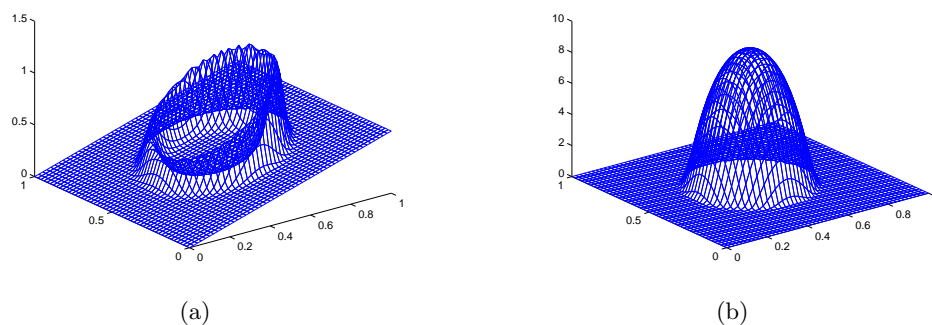


Figura 11. Ejemplo 3: Soluciones de elementos finitos, izq: primal der: dual

ez4u y el criterio de remallado *h*-adaptativo presentado en [17], se obtuvieron diferentes mallas sobre las cuales se realizó la estima del error en la cantidad de interés definida.

En la Figura 12 se puede observar el error relativo de las estimas E_1 y E_2 sobre mallas adaptadas (Adap E1 y Adap E2) y sobre mallas uniformes (unif E1 y unif E2). Se puede observar que se logra acelerar la convergencia del error relativo y que la tolerancia escogida en el criterio de remallado de $tol = 10^{-3}$ es alcanzada en muy pocas iteraciones, lo cual hace que las herramientas utilizadas sean buenas candidatas a ser usadas en problemas dinámicos.

Para generar las mallas uniformes, se tomaron tamaños de elementos decrecientes, uniformes sobre todo el dominio. Se calcularon las estimas sobre estas mallas, observandose que para alcanzar la tolerancia dada es necesario tomar un número mayor de elementos que los usados con mallas adaptadas. Los índices de efectividad global Θ_1 y Θ_2 , obtenidos para las dos estimas presentadas, utilizando mallas adaptadas (Adap E1 y Adap E2) y

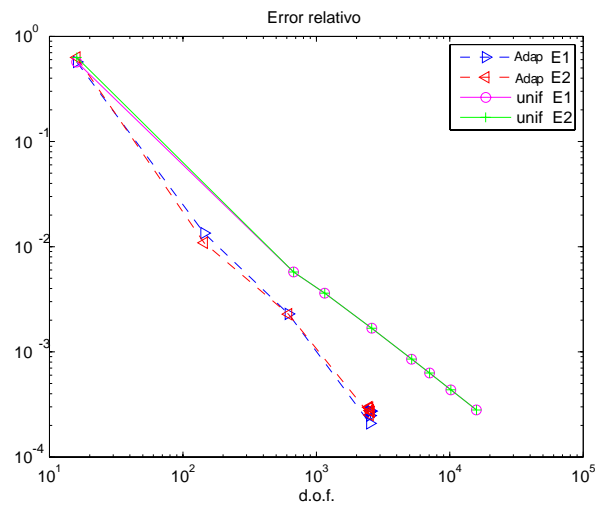


Figura 12. Ejemplo 3: Error relativo sobre mallas adaptadas (Adap) y uniformes (unif)

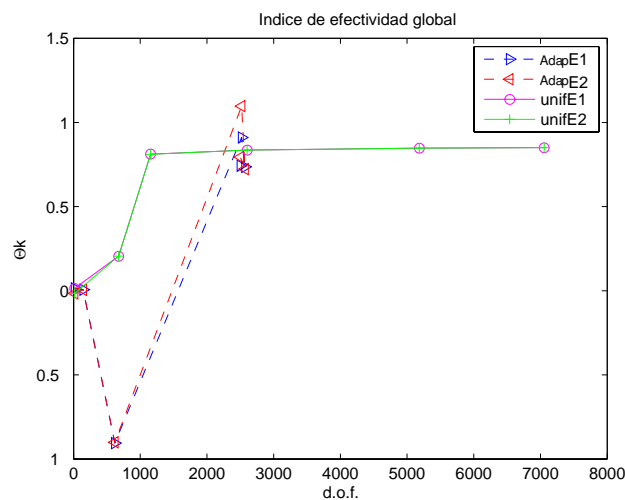


Figura 13. Ejemplo 3: Índice de efectividad sobre mallas adaptadas (Adap) y uniformes (unif)

mallas uniformes (unif E1 y Unif E2) se muestran en la Figura 13. En este caso se puede observar que el índice de efectividad encontrado usando mallas uniformes es monótono y se comporta como cota inferior. Usando mallas adaptadas se mantienen alrededor de 0.8. Los valores numéricos encontrados en este problema se presentan en la Tabla III, donde la caja superior contiene los resultados cuando se utiliza la estima E_1 , mientras que en la caja inferior se presentan los resultados encontrados utilizando la estima E_2 . En este problema el error relativo de las estimas es del 0.03%.

Algunas mallas obtenidas mediante el proceso de adaptatividad utilizando como indicador del error las estimas aquí presentadas se pueden observar en la Figura 14.

mall	n_{el}	$J(e)$	E_1	e_{rel}	Θ_1
0	484	0.252×10^{-1}	-0.266×10^{-2}	0.7%	-0.10
1	2371	-0.140×10^{-3}	-0.131×10^{-3}	0.03%	0.94
4	3282	-0.148×10^{-3}	-0.126×10^{-3}	0.03%	0.85
6	3698	-0.174×10^{-3}	-0.124×10^{-3}	0.03%	0.71
			E_2		Θ_2
0	484	0.252×10^{-1}	-0.266×10^{-2}	0.7%	-0.10
1	2371	-0.140×10^{-3}	-0.117×10^{-3}	0.03%	0.83
4	3282	-0.148×10^{-3}	-0.129×10^{-3}	0.03%	0.87
6	3698	-0.174×10^{-3}	-0.127×10^{-3}	0.03%	0.72

Tabla III. Ejemplo 3: Malla, número de elementos, error analítico en la cantidad de interés, estima, error relativo de la estima e índice de efectividad usando *mallas adaptadas*

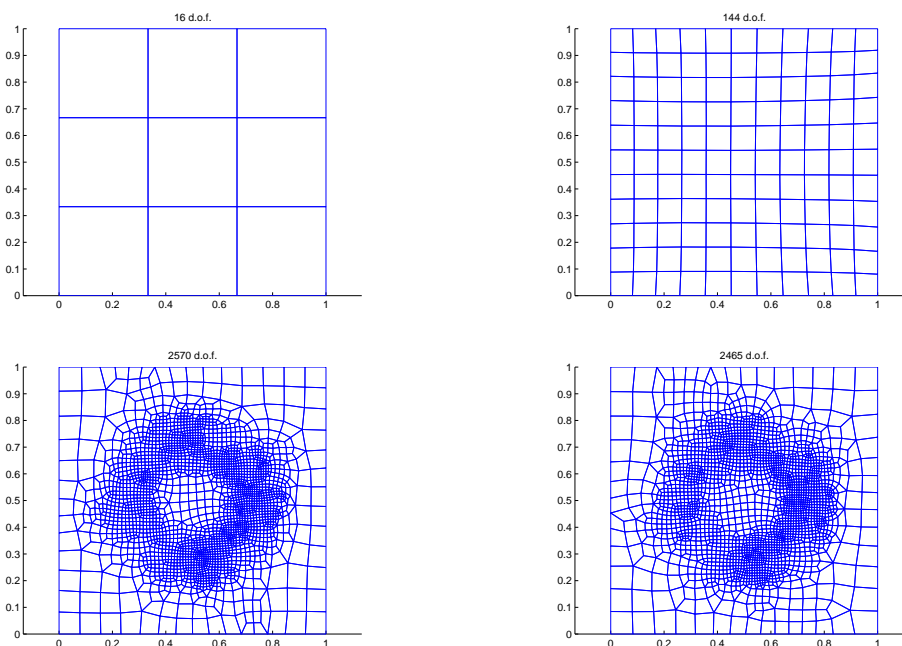


Figura 14. Ejemplo 3: Mallas adaptadas

Ejemplo 4: Problema mecánico elástico lineal

Se estimó el error en un problema mecánico elástico lineal bidimensional sobre el dominio mostrado en la Figura 15. En esta figura también se pueden observar las deformadas con la solución primal (izquierda) y con la solución dual (derecha). Las condiciones de contorno impuestas se pueden observar en la Figura 16 y se describen a continuación:

- Desplazamientos nulos prescritos en el fondo de la presa.
- Desplazamientos restringidos en la dirección x en el extremo izquierdo y el derecho de la base de la presa.
- Presión hidrostática en la parte mojada de la presa, que va de 0 a $8 \times 10^4 Pa$.

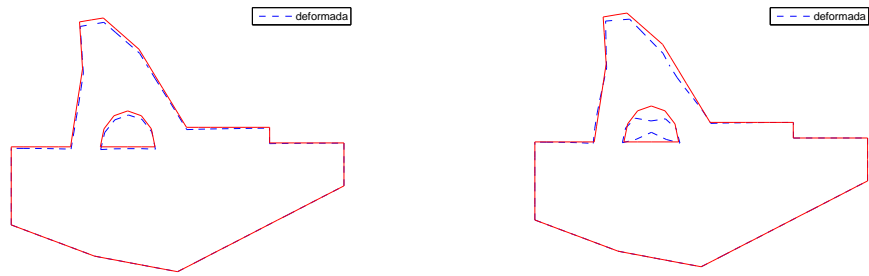


Figura 15. Ejemplo 4: Contorno y deformada para: izq: solución primal, der: solución dual

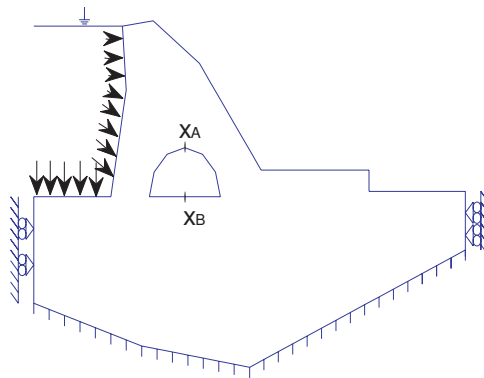


Figura 16. Ejemplo 4: Condiciones de contorno

- Condiciones naturales en el resto del contorno.

Sobre todo el dominio se considera el peso propio, imponiendo la aceleración de la gravedad de $-10.0 m/s^2$ en la dirección del eje y .

Los parámetros materiales utilizados, correspondientes al concreto son los siguientes:

- Módulo de Young: $E = 3.1 \times 10^7 N/m^2$
- Radio de Poisson: $\nu = 0.25$
- Densidad: $\rho = 2.3 \times 10^3 kg/m^3$.

La cantidad de interés a estudiar es el desplazamiento en la dirección del eje y de los puntos $\mathbf{x}_A(9.8, 2.3)$ y $\mathbf{x}_B(9.8, 0.0)$ (parte mas alta del agujero de la presa y su proyección sobre la base del hueco) que se indican en la Figura 16. Con este fin se resuelve un problema dual, en el que se utiliza un factor de influencia sobre los puntos \mathbf{x}_A y \mathbf{x}_B como término fuente.

Para definir la cantidad de interés, se escoge $\mathbf{q} = \{0, 1\}^T$ y $j = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_B)$. De este modo se tiene el funcional

$$J(\mathbf{u}) = \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x})[\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_B)] = \mathbf{q} \cdot [\mathbf{u}(\mathbf{x}_A) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_B)]$$

que se puede escribir como

$$J(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x})(\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_B)) d\Omega$$

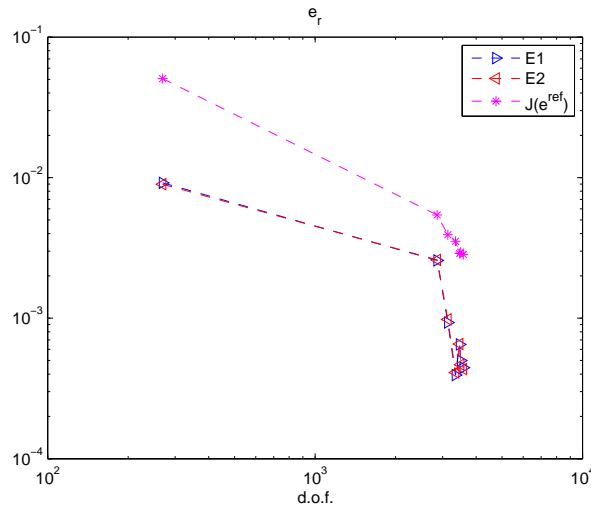


Figura 17. Ejemplo 4: Error relativo

mallla	n_{el}	$J(e^{ref})$	E_1	e_{rel}	$J(u_H)$
0	227	$.195 \times 10^{-2}$	$.354 \times 10^{-3}$	0.9 %	$.0 \times 10^{-0}$
1	2742	$.214 \times 10^{-3}$	$.101 \times 10^{-3}$	0.2 %	$.383 \times 10^{-1}$
3	3184	$.139 \times 10^{-3}$	$.155 \times 10^{-4}$	0.03 %	$.365 \times 10^{-1}$
4	3291	$.114 \times 10^{-3}$	$.257 \times 10^{-4}$	0.06 %	$.354 \times 10^{-1}$
$E2$					
0	227	$.195 \times 10^{-2}$	$.346 \times 10^{-3}$	0.8 %	$.0 \times 10^{-0}$
1	2742	$.214 \times 10^{-3}$	$.102 \times 10^{-3}$	0.2 %	$.383 \times 10^{-1}$
3	3184	$.139 \times 10^{-3}$	$.162 \times 10^{-4}$	0.04 %	$.365 \times 10^{-1}$
4	3291	$.114 \times 10^{-3}$	$.258 \times 10^{-4}$	0.06 %	$.354 \times 10^{-1}$

Tabla IV. Ejemplo 4: Malla, número de elementos, error de referencia en la cantidad de interés, estima, error relativo de la estima y cantidad de interés aproximada usando *mallas adaptadas*

Pero con el fin de que la solución del problema dual no presente singularidades, se suaviza la función j , usando *molificadores* (ver [16]). Finalmente la cantidad de interés se define por

$$J(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x})(W_{\epsilon}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) - W_{\epsilon}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_B)) d\Omega$$

con W_{ϵ} dado en (9). En este problema se ha tomado $\epsilon = 0.02$.

Se procedió a estimar el error sobre varias mallas adaptativas con el criterio de remallado dado en [12] y utilizando la distribución de error según la estima aquí presentada. El error relativo de la estima se puede ver en la Figura 17. En esta figura, E_1 y E_2 representan las estimas sobre mallas adaptadas. $J(e^{ref})$ es el error en la cantidad de interés sobre una malla de referencia, obtenida como un refinamiento de cada una de las mallas adaptadas. El refinamiento se efectuó, dividiendo cada elemento de la malla adaptada en 16 subelementos. En la Tabla IV se presentan diversos valores obtenidos para el problema. En la malla inicial, el índice de efectividad global es del 18 por ciento, mientras que en la malla 1 es del 47 por ciento. El valor de la cantidad de interés sobre la malla de referencia es de 0.395×10^{-1} y sobre la cuarta malla adaptada es de 0.354×10^{-1} lograndose alcanzar un error relativo de

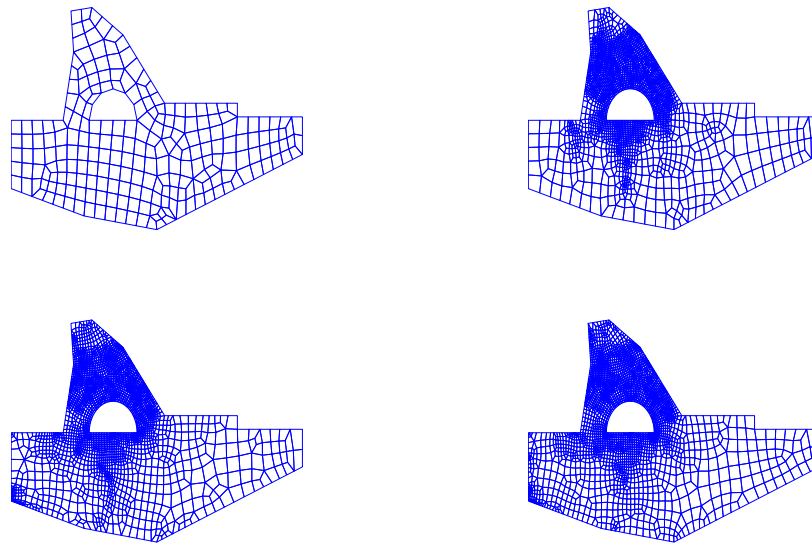


Figura 18. Ejemplo 4: Mallas adaptadas

0.06%. En la Figura 18 se pueden observar algunas de las mallas obtenidas en el proceso adaptativo empleado en este problema. En este caso, los elementos están concentrados en la zona de interés.

CONCLUSIONES

- Se ha propuesto un estimador de error orientado a cantidades de interés usando funciones burbuja. En la estima se tomó en cuenta dos contribuciones al error, una interior y otra sobre aristas.
- Se ha utilizado la representación del error como el producto energético de los residuos dual y primal, obteniendo un estimador del tipo residual dual ponderado.
- En los resultados numéricos obtenidos para los problemas térmicos se observan índices de efectividad global de alrededor del 70 por ciento.
- Usando refinamiento uniforme, los estimadores presentados exhiben un orden de convergencia asintóticamente correcto. Además, con procesos adaptativos, se alcanzan las tolerancias preestablecidas para los errores relativos .
- El estimador presentado es muy económico al ser explícito. Además, no depende de constantes arbitrarias.
- El estimador de error presentado, junto con el criterio de remallado dado en [17], permiten alcanzar en muy pocas iteraciones la tolerancia escogida.
- En problemas mecánicos, con muy pocas iteraciones se obtienen mallas adaptadas con elementos concentrados alrededor de los puntos de interés, permitiendo hallar soluciones suficientemente precisas concentrando los grados de libertad allí donde se requieren.

REFERENCIAS

- 1 M. Ainsworth y J. T. Oden, “*A posteriori error estimation in finite element analysis*”, Wiley, (2000).
- 2 T. Grätsch y K.-J. Bathe, “A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis”, *Computers and Structures*, Vol. **83**, pp. 235-265, (2005).
- 3 T.J.R. Hughes, “*The Finite Element Method. Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*”, Dover, (2000).
- 4 I. Babuška y W. C. Rheinboldt, “A-posteriori error estimates for the finite element method”, *Mathematics of Computation*, Vol. **12**, pp. 1597-1615, (1978).
- 5 D.W. Kely, J.P. De S. Gago y O.C. Zienkiewicz, “A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element methods: Part I - Error Analysis”, *Int. J. Numer. Meth. Engr.*, Vol. **19**, pp. 1593-1619, (1983).
- 6 W. Bangerth y R. Rannacher, “*Adaptive finite element methods for differential equations*”, Birkhäuser Verlag, (2003).
- 7 R.E. Bank y A. Weiser, “Some A Posteriori error estimators for elliptic partial differential equations”, *Mathematics of Computation*, Vol. **44**, pp. 283-301, (1985).
- 8 O.C. Zienkiewicz y J.Z. Zhu, “The superconvergent patch recovery (SPR) and a posteriori error estimates. Part 1: the recovery technique”, *Int. J. Numer. Meth. Engr.*, Vol. **33**, pp. 1331-1364, (1992).
- 9 O.C. Zienkiewicz y J.Z. Zhu, “The superconvergent patch recovery (SPR) and a posteriori error estimates. Part 2: error estimates and adaptivity”, *Int. J. Numer. Meth. Engr.*, Vol. **33**, pp. 1365-1382, (1992).
- 10 O.C. Zienkiewicz y J.Z. Zhu, “The superconvergent patch recovery (SPR) and adaptive finite element refinement”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engr.*, Vol. **101**, pp. 207-224, (1992).
- 11 N.-E. Wiberg y X.D. Li, “A postprocessed error estimate and an adaptive procedure for the semidiscrete finite element method in dynamic analysis”, *Int. J. Num. Meth. Engr.*, Vol. **37**, pp. 3585-3603, (1994).
- 12 P. Díez y G. Calderón, “Goal-oriented error estimation for transient parabolic problems”, *Comput. Mech.*, Vol. **39**, pp. 631-646, (2007).
- 13 G. Calderón y P. Díez, “Análisis de diferentes estimadores de error de postproceso para adaptividad orientada al resultado”, *Rev. Internac. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, Vol. **22**, pp. 193-214, (2006)
- 14 P. Díez, J.J. Egozcue y A. Huerta, “A posteriori error estimation for standard finite element analysis”, *Comp. Meth. Applied Mech. and Engr*, Vol. **163**, pp. 141-157, (1998).
- 15 S. Prudhomme y J. T. Oden, “On goal-oriented error estimation for elliptic problems: application to the control of pointwise errors”, *Comp. Meth. Applied Mech. and Engr.*, Vol. **176**, pp. 313-331, (1999).
- 16 J. T. Oden y S. Prudhomme, “Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method”, *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. **41**, pp. 735-756, (2001).
- 17 P. Díez y G. Calderón, “Remeshing criteria and proper error representations for goal oriented h-adaptivity”, *Comp. Meth. in Applied Mech. and Engr.*, Vol. **196**, pp. 719-733, (2007).