

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS
DOCTORADO EN MATEMÁTICAS
MÉRIDA-VENEZUELA

PROYECTO DE TESIS DOCTORAL

UN NUEVO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS PARA LOS
PROBLEMAS DIFUSIVOS CON CONDUCTIVIDADES MUY DISTINTAS:
ESTIMA DE ERROR Y ADAPTATIVIDAD

Doctorando:
MSc. Felipe Cordero González
ULA - Venezuela

Tutor: Dr. Pedro Díez
Laboratori de Càlcul Numèric,
Departament de Matemàtica Aplicada III,
Universitat Politècnica de Catalunya,
Barcelona - España,
pedro.diez@upc.edu

Cotutor: Dr. Giovanni Calderón
Departamento de Matemática,
Facultad de Ciencias,
Universidad de Los Andes,
Mérida - Venezuela
giovanni@ula.ve

Índice general

Índice general	I
1. Área de Investigación	1
2. Objetivo General	1
3. Introducción	1
4. Estado del Arte	3
4.1. Problema modelo	3
4.2. Forma variacional del problema	5
4.3. Método de elementos finitos (FEM)	6
4.4. Descripción de fases con level set	6
4.5. Método de elementos finitos extendidos (XFEM)	7
4.6. Modificación del XFEM (XFEM+)	9
4.7. Representación y estima a posteriori del error	9
4.8. Estima de la solución del problema dual	11
4.9. Unicidad y representación óptima del error	13
4.10. Adaptatividad	14
5. Objetivos Específicos	15
6. Metodología	16
7. Plan de Trabajo	16
Referencias	21

1. Área de Investigación

Área: Matemática Aplicada

Especialidad: Método de Los Elementos Finitos aplicados a Problemas Elípticos

2. Objetivo General

Dado en un problema de transmisión de calor en un medio no homogéneo (con dos materiales distintos separados por una interfase), el objetivo central es mejorar la precisión de los flujos (cercanos a la interfase) calculados con “*el método de los elementos finitos extendidos*” (XFEM). Para ello se propone XFEM+, un método que introduce una restricción adicional a la formulación XFEM y donde considera la continuidad del flujo normal sobre la interfase. Al mismo tiempo se quiere optimizar el cálculo mediante un proceso adaptativo a partir de una cantidad de interés relacionada con esa condición adicional.

3. Introducción

El modelado de fenómenos difusivos se hace a través de EDPs. Este es el caso, por ejemplo, de la ecuación de Poisson, que es extensamente usada para simular la transmisión de calor tanto en un medio homogéneo como no homogéneo. En la mayoría de los casos la solución exacta de los modelos matemáticos es desconocida, esto hace necesario recurrir a métodos numéricos para su aproximación; introduciendo así, un error de aproximación al sustituir la solución del modelo por la solución del método numérico.

Debido a su potencial y versatilidad, “*el método de los elementos finitos*” (FEM) es el más utilizado para obtener las soluciones aproximadas de estos problemas. Sin embargo, cuando el medio es no homogéneo donde la conductividad del medio está separada por una interfase, obtener soluciones precisas con el FEM clásico conlleva un alto costo computacional, ya que la malla debe ser conforme con la geometría de la

interfase y en general, si se utilizan elementos estándares, se necesita un alto nivel de refinamiento alrededor de la misma. Es por ello que el *método de los elementos finitos extendido* [1, 2, 3, 4, 5] se ha convertido en una interesante técnica para el análisis de los problemas con interfase, ya que permite hacer independiente la geometría de la interfase respecto de la malla de elementos finitos.

Por otro lado, cuando se aplica XFEM a los problemas de difusión en un sistema de dos fases con conductividades muy distintas, éste produce también una representación inexacta de los flujos en la vecindad de la interfase. Este fenómeno se ha observado en problemas prácticos: el deterioro de los flujos numéricos que proporciona XFEM cerca de la interfase cuando los parámetros de conductividad son muy distintos [10]. El enriquecimiento XFEM mejora la calidad global de la solución pero no satisface algunos rasgos locales de los flujos, por lo que los flujos numéricos resultantes en la vecindad de la interfase no es realista. Con el fin de remediar este inconveniente se propone introducir una restricción adicional a la formulación XFEM agregando una propiedad que reproduzca los rasgos de los flujos locales en la zona de transición; Este método lo llamaremos XFEM+ y será el utilizado para la adaptatividad.

Al resolver numéricamente un problema resulta conveniente controlar la calidad de la solución aproximada. Este control puede lograrse mediante un proceso de adaptatividad de la malla para aproximar eficientemente la solución del problema. En un proceso adaptativo se debe disponer, para todo el dominio, de la distribución local del error que se comete al usar la solución aproximada como solución del modelo. En otras palabras, se debe estimar el error cometido en la aproximación. Ahora, para obtener aproximaciones numéricas del error se debe acudir a los estimadores a posteriori, pues los estimadores a priori no permiten evaluar el error ni estimarlo (los estimadores a priori constituyen una herramienta básica para el estudio teórico de la convergencia del FEM, ver Brenner y Scott [6]).

La mayoría de los estimadores a posteriori buscan evaluar o aproximar el error en norma energética (error global). Sin embargo, en la actualidad, en muchas aplicaciones de las ciencias existe un interés particular en ciertas cantidades específicas de la solución (cantidad de interés) y no en la solución global. Éstas, en general, son de

interés en el campo de la física o la ingeniería y suelen estar orientadas al diseño y optimización de un determinado problema. En estos casos, se prefiere que la medida del error sea en base a cantidades de interés (determinadas por el usuario) en vez de en base a la norma energética.

Cantidades de interés comúnmente usadas en el campo de la física o la ingeniería suelen representar: flujo de calor a través de una porción de la frontera del dominio, gradientes de temperatura, velocidad, desplazamientos o tensiones en ciertas zonas, valor puntual o promedios de la solución en una parte del dominio, etc. Desde un punto de vista matemático, las cantidades de interés a ser utilizadas para el control del error se pueden caracterizar, por funcionales lineales, $J(u)$, de la solución, u . Se quiere usar funcionales que involucren los flujos sobre la interfase a fin de obtener un método adaptativo para el nuevo XFEM+.

4. Estado del Arte

4.1. Problema modelo

Se considera un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, abierto y acotado con frontera suave dividida en dos partes en lo que se refiere a las condiciones de contorno: $\partial\Omega = \bar{\Gamma}_N \cup \bar{\Gamma}_D$, con $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$ siendo Γ_N la parte donde se imponen condiciones de tipo Neumann y Γ_D donde se imponen condiciones de tipo Dirichlet. En este dominio se desea resolver el siguiente problema de contorno que incluye la ecuación de Poisson:

$$\nabla \cdot (-\nu \nabla u) = f \quad \text{en } \Omega \quad (1a)$$

$$-\nu \nabla u \cdot \mathbf{n} = g_N \quad \text{sobre } \Gamma_N \quad (1b)$$

$$u = u_D \quad \text{sobre } \Gamma_D \quad (1c)$$

donde u es la incógnita (que, por ejemplo, representa la temperatura), f es el término fuente, g_N es el flujo de calor prescrito en Γ_N , \mathbf{n} la normal unitaria exterior, u_D la temperatura prescrita en Γ_D y ν es el parámetro que, en el caso de un problema térmico, representa la conductividad.

En este problema de balance, el flujo se define mediante la expresión siguiente

$$\mathbf{q} = -\nu \nabla u. \quad (2)$$

Se va a considerar que el coeficiente ν (conductividad) corresponde a dos materiales distintos. Es decir, el dominio Ω se divide en dos partes Ω_1 y Ω_2 asociados a los valores ν_1 y ν_2 , tal como se ilustra en la figura 1. Los dos subdominios Ω_1 y Ω_2 tienen la frontera común $\Gamma_{\text{int}} = (\partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2) \setminus \partial\Omega$ y completan el dominio $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Gamma_{\text{int}}$.

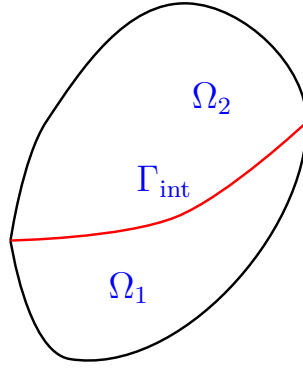


Figura 1: Representación del dominio Ω , los subdominios y la interfase

En este caso, en la interfase Γ_{int} se ha de verificar la continuidad de la componente normal del flujo. La ecuación (1a) no tiene sentido en los puntos de la discontinuidad y se tiene que sustituir por la continuidad del flujo normal. Es decir, en $P \in \Gamma_{\text{int}}$ se introducen los flujos a ambos lados de la interfase

$$\mathbf{q}_1 = -[\nu \nabla u]|_{\Omega_1} = -\nu_1 \nabla u|_{\Omega_1} \quad (3a)$$

$$\mathbf{q}_2 = -[\nu \nabla u]|_{\Omega_2} = -\nu_2 \nabla u|_{\Omega_2} \quad (3b)$$

y se impone la continuidad de su componente normal

$$\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{n}$$

siendo \mathbf{n} una normal unitaria a Γ_{int} en el punto genérico P (no importa el signo).

Así el problema de contorno (1) se tiene que reescribir como sigue:

$$\nabla \cdot (-\nu \nabla u) = f \quad \text{en } \Omega_1 \cup \Omega_2 \quad (4a)$$

$$-\nu \nabla u \cdot \mathbf{n} = g_N \quad \text{sobre } \Gamma_N \quad (4b)$$

$$u = u_D \quad \text{sobre } \Gamma_D \quad (4c)$$

$$\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{n} \quad \text{sobre } \Gamma_{\text{int}} \quad (4d)$$

Si los valores de ν_1 y ν_2 son distintos, la condición (4d) implica que el gradiente de u tiene una discontinuidad en la componente normal a Γ_{int}

$$\nabla u|_{\Omega_1} \cdot \mathbf{n} \neq \nabla u|_{\Omega_2} \cdot \mathbf{n}$$

Este salto del gradiente será mayor cuanto mayor sea la diferencia entre ν_1 y ν_2 . Sin embargo, la continuidad de la incógnita u en Ω garantiza que la componente tangencial del gradiente es continua. Es decir que si denominamos $\boldsymbol{\tau}$ al vector tangente a Γ_{int} en P , tenemos que :

$$\nabla u|_{\Omega_1} \cdot \boldsymbol{\tau} = \nabla u|_{\Omega_2} \cdot \boldsymbol{\tau}.$$

4.2. Forma variacional del problema

La forma débil del problema (4) requiere introducir los siguientes espacios funcionales. El espacio de funciones admisibles \mathbf{V} , donde se encuentra la solución del problema estacionario (1), se define como

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

y el espacio de variaciones o funciones de prueba, \mathbf{V}_0 , se define como

$$\mathbf{V}_0 := \{u \in \mathcal{H}^1(\Omega) : u = 0 \text{ en } \Gamma_D\}.$$

Así, la forma débil de (4) se escribe como: encontrar $u \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(u, v) = L(v), \quad \text{para todo } v \in \mathbf{V}_0, \quad (5)$$

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

$$B(u, v) := \int_{\Omega_1 \cup \Omega_2} \nu \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega \quad \text{y} \quad L(v) := \int_{\Omega} f v \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} g_N v \, ds.$$

4.3. Método de elementos finitos (FEM)

El espacio funcional donde se encuentra la solución FEM del problema está asociado a una malla de elementos con tamaño característico H , se denomina \mathbf{V}_H y es un subespacio de \mathbf{V} , $\mathbf{V}_H \subset \mathbf{V}$. La malla consiste en una discretización del dominio Ω en elementos Ω^k , $k = 1, \dots, n_{el}$ disjuntos y que cubren el dominio, es decir, tales que $\bar{\Omega} = \bigcup_k \bar{\Omega}^k$, y, para $k \neq k'$, $\Omega^k \cap \Omega^{k'} = \emptyset$. Este espacio viene generado por las funciones de interpolación (o de forma) N_i , $i = 1, \dots, n_{poin}$, asociadas a los n_{poin} nodos de la malla: $V_H = \text{span}\{N_1, \dots, N_{poin}\}$.

La aproximación en \mathbf{V}_H de u se denomina u_H y queda determinada por los valores nodales u_i , $i = 1, \dots, n_{poin}$:

$$u_H = \sum_{i=1}^{n_{poin}} N_i u_i.$$

La aproximación FEM, u_H es tal que

$$B(u_H, v) = L(v), \quad \text{para todo } v \in \mathbf{V}_{H_0} \subset \mathbf{V}_0, \quad (6)$$

siendo \mathbf{V}_{H_0} la contraparte discreta del espacio \mathbf{V}_0 .

4.4. Descripción de fases con level set

La técnica de los level sets [7, 8] se utiliza para describir la localización de las fases sin tener que hacer coincidir la línea de interfase con los lados de los elementos. Para ello, se introduce una función de nivel ϕ (la función level set) de manera que

$$\phi(x) = \begin{cases} > 0, & x \in \Omega_1 \\ = 0, & x \in \Gamma_{int} \\ < 0, & x \in \Omega_2 \end{cases}$$

De hecho, en la práctica, la función ϕ se toma como la función distancia a la interfase, con signo. A menudo, además, esta función se trunca a una cierta distancia de manera que a partir de ese momento se toma constante.

La función level set, ϕ , también se aproxima por una función de \mathbf{V}_H , ϕ_H . Los valores nodales ϕ_i , $i = 1, \dots, n_{\text{poin}}$ permiten interpolar ϕ en cada elemento:

$$\phi \approx \phi_H = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} N_i \phi_i.$$

De esta manera, la descripción discreta de la interfase es una curva continua, suave en el interior de los elementos y con discontinuidades en la pendiente en los lados de los elementos que contienen la interfase. En el caso de elementos lineales es, precisamente, una línea poligonal quebrada. Esto permite también calcular el vector normal unitario a la interfase en un punto P de la interfase interior a un elemento Ω^k :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi_H}{\|\nabla \phi_H\|} \quad \text{con} \quad \nabla \phi_H = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \nabla N_i \phi_i.$$

4.5. Método de elementos finitos extendidos (XFEM)

En la formulación convencional de elementos finitos, la existencia de una interfase se modela explícitamente mediante la frontera de los elementos. En contraste, en el método XFEM [1, 2, 3, 4, 5] los lados de los elementos no tienen que coincidir con la posición de la interfase, lo que proporciona una gran versatilidad. El método aprovecha el concepto de la partición de la unidad para enriquecer la solución del FEM clásico incorporando funciones que contengan características de la solución exacta que el FEM no contiene y se basa en el enriquecimiento del modelo de elementos finitos con grados de libertad adicionales en los elementos geoméricamente intersecados por la interfase. De esta forma la discontinuidad se incorpora sin modificar la discretización de la malla, que es generada sin considerar la posición de la interfase. Esta idea se utiliza, en este contexto, para añadir discontinuidades en la derivada normal en la interfase. Para ello se introduce una función *ridge* (carena o arista), R , introducida

en [9] y definida por

$$R = \sum_{i=1}^{n_{poin}} N_i |\phi_i| - \left| \sum_{i=1}^{n_{poin}} N_i \phi_i \right|.$$

Esta función se anula en los elementos que no contienen la interfase (todos los ϕ_i son del mismo signo) y, en los elementos que sí la contienen, se anula en los nodos y presenta una discontinuidad en la derivada precisamente sobre la interfase. En lo que sigue, se denomina \mathcal{E}_{enr} al conjunto de índices de los elementos que contienen parte de la interfase. Así, R sólo es distinto de cero en los elementos Ω^k con $k \in \mathcal{E}_{enr}$.

De hecho, se puede restringir el rango de variación del índice i a aquellos nodos que pertenecen a elementos que contienen la interfase. Estos nodos se denominan nodos enriquecidos y el conjunto de valores de estos índices se denomina \mathcal{N}_{enr} . Así la ecuación anterior se puede reescribir

$$R = \sum_{i \in \mathcal{N}_{enr}} N_i |\phi_i| - \left| \sum_{i \in \mathcal{N}_{enr}} N_i \phi_i \right|.$$

La aproximación XFEM, u_X , se escribe como

$$u_X = \sum_{i=1}^{n_{poin}} N_i u_i + \sum_{j \in \mathcal{N}_{enr}} RN_j a_j, \quad (7)$$

donde a_i son los valores nodales enriquecidos. Nótese que los valores nodales u_i de la solución u_X en general no coinciden con los de u_H . Al introducir el enriquecimiento también las incógnitas originales cambian.

La solución u_X pertenece al espacio discreto $V_X = V_H \oplus \text{span}\{RN_i, i \in \mathcal{N}_{enr}\}$ y se caracteriza por una ecuación análoga a (6) sustituyendo \mathbf{V}_H por \mathbf{V}_X . El XFEM enriquece la solución introduciendo la posibilidad de que aparezca un salto en la componente normal del gradiente para intentar satisfacer (4d), según se indica en (7). Así, el gradiente de u_X resulta ser

$$\nabla u_X = \sum_{i=1}^{n_{poin}} \nabla N_i u_i + \sum_{j \in \mathcal{N}_{enr}} (R \nabla N_j + \nabla RN_j) a_j$$

La discontinuidad de ∇u_X en un punto P de Γ_{int} interior a un elemento Ω^k proviene de ∇R puesto que ∇N_i y R son continuos en el interior de Ω^k . De hecho, suponiendo que ϕ es positivo en Ω_1 y negativo en Ω_2 , tenemos que la expresión de R a ambos lados de la interfase es

$$R|_{\Omega_1} = \sum_{i \in \mathcal{N}_{\text{enr}}} N_i (|\phi_i| - \phi_i) \quad \text{y} \quad R|_{\Omega_2} = \sum_{i \in \mathcal{N}_{\text{enr}}} N_i (|\phi_i| + \phi_i).$$

Obsérvese que $\nabla R|_{\Omega_2} - \nabla R|_{\Omega_1} = 2\nabla \phi_H \neq 0$. De hecho, como se esperaba, el salto del gradiente de R es paralelo a la normal \mathbf{n} ya que esta es paralela a $\nabla \phi_H$.

Gracias a esta propiedad, se espera que el XFEM sea capaz de obtener una mejora sustancial en la aproximación de la solución exacta.

4.6. Modificación del XFEM (XFEM+)

Cuando se aplica XFEM a los problemas de difusión en un sistema de dos fases con conductividades muy distintas, esta popular estrategia produce una representación inexacta de los flujos en la vecindad de la interfase. El enriquecimiento XFEM mejora la calidad global de la solución pero no satisface algunos rasgos locales de los flujos, por lo que los flujos numéricos resultantes en la vecindad de la interfase no es realista. Con el fin de remediar este inconveniente se propone una restricción adicional a la formulación XFEM agregando una propiedad que reproduzca los rasgos de los flujos locales en la zona de transición. Esta aproximación será denotada como XFEM+ y fue introducida en [10] y requiere añadir condiciones lineales al sistema algebraico XFEM.

4.7. Representación y estima a posteriori del error en cantidades de interés

Para efecto de la presentación de los resultados que existen en la literatura, la función incognita u define la solución de un problema estacionario que tiene una

representación variacional de la forma: encontrar u tal que

$$B(u, v) = L(v), \quad \text{para todo } v \in \mathbf{V}, \quad (8)$$

donde a representa una forma bilineal y L un funcional, ambas definidas en un espacio \mathbf{V} de funciones admisibles para el problema en cuestión (espacio de Hilbert). La solución exacta u del problema débil (5) será aproximada por la solución de elementos finitos u_H , definida en el espacio finito dimensional $\mathbf{V}_H \subset \mathbf{V}$. Para lo que sigue, u_H representa cualquier aproximación de elementos finitos (FEM, XFEM o XFEM+). Esta solución aproximada verifica que

$$B(u_H, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}_H \quad (9)$$

El error, $e := u - u_H$, que surge de la aproximación, pertenece al espacio \mathbf{V} y satisface la ecuación residual

$$B(e, v) = \mathcal{R}^P(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}, \quad (10)$$

donde $\mathcal{R}^P(\cdot)$ es el *residual débil* asociado a la solución aproximada u_H dado por:

$$\mathcal{R}^P(v) := L(v) - B(u_H, v). \quad (11)$$

La representación del error viene dada por una combinación de la solución del problema original (primal) y de una función de influencia, z , que es solución del *problema adjunto (o dual)*:

$$B(v, z) = J(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}_H \quad (12)$$

En este problema adjunto el funcional lineal $J(\cdot)$ aparece al lado derecho de la ecuación débil y desempeña el papel de una carga externa. Esta función de influencia explica cómo el residuo (se entiende por residuo la no verificación de la forma fuerte de la ecuación diferencial que se está resolviendo) en el problema primal influye sobre el error en la cantidad de interés. Es decir, ya que $e \in \mathbf{V}$, se tiene a partir de (10),

(12) y la propiedad de *ortogonalidad de Galerkin* la representación del error

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z - v_H) = B(e, z - v_H). \quad \forall v_H \in \mathbf{V}_H \quad (13)$$

Estas ideas de dualidad fueron inicialmente desarrollados por Babuška y Miller [11, 12, 13]. Contribuciones posteriori han sido dadas por Eriksson, Estep, Hansbo y Johnson [14] y los trabajos de Rannacher y colaboradores [15, 16, 17], recientemente agrupados en [18].

La segunda igualdad de (13) se cumple sólo de forma global. Obsérvese que para evaluar $\mathcal{R}^P(z - v_H)$ sólo se requiere conocer (estimar) la solución del problema dual en comparación con $B(e, z - v_H)$ que requiere conocer las soluciones de ambos problemas: primal y dual. No obstante, la representación local de \mathcal{R}^P incluye saltos en las aristas de los elementos, y es aquí donde se presentará el mayor esfuerzo computacional.

Si z pudiera ser calculada exactamente, se podría determinar $J(e)$ directamente a partir de los datos, ya que usando (8) y (12) se tiene que $J(u) = L(z)$. Desafortunadamente, el problema dual (12) presenta las mismas dificultades de resolución que el problema primal (8).

La solución z del problema dual será aproximada numéricamente como parte del proceso de estima del error. Para esto, el costo de este cálculo adicional debe resultar “barato” en comparación con el costo de determinar la aproximación numérica del problema primal original.

4.8. Estima de la solución del problema dual

Si suponemos que la solución z del problema dual (12) es aproximada (estimada de alguna manera) se tiene que la representación del error (13) será entonces aproximada por

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z - v_H) \approx \mathcal{R}^P(\hat{z} - v_H) \quad (14)$$

donde \hat{z} denotará la estima de la solución z . En particular, teniendo en cuenta la propiedad de ortogonalidad, es claro que la aproximación \hat{z} , de z , no puede calcularse usando el mismo espacio de elementos finitos, V_H , empleado para el cálculo del

problema primal. Pues, de ser así, se tendría una estima trivial del error.

Para estimar el error (estima de z) existen dos alternativas que corresponden a dos grandes familias de métodos. En primer lugar los *estimadores de error de tipo residual* introducidos por Babuška y Rheinboldt [11]. La otra alternativa está basada en los *estimadores por postproceso o suavizado* que se inspiran en el estimador introducido por Zienkiewicz y Zhu [19], y posteriormente modificado por los mismos autores en [20, 21]. Estas dos familias de estimadores fueron originalmente propuestas para estimar el error de problemas estacionarios en norma energética. Sin embargo, hoy en día, se han aplicado estas ideas para desarrollar estimadores de error en cantidades de interés. Además, en el caso de una forma bilineal simétrica, la combinación de estimas de error en norma energética para los problemas primal y dual junto a la identidad del paralelogramo y la desigualdad triangular permiten estimar cotas superiores e inferiores del error en la cantidad de interés. Por ejemplo, se pueden citar, entre otros, los trabajos de Peraire, Paraschivoiu y Patera [22]; Paraschivoiu y Patera [23]; Peraire y Patera [24]; Oden y Prudhomme [25, 26]; Díez, Páres y Huerta [27]. Muchos de los resultados obtenidos en estos trabajos están recogidos por Ainsworth en [28].

Por otro lado, Rannacher y Bangerth [18] proponen acotaciones del error que involucran la solución del problema dual, pero este tipo de acotaciones puede llevar a sobreestimar el error verdadero. Esto es debido a que el efecto de cancelación que ocurre en la representación del error a través de la suma de los términos locales es suprimido. Larson y Niklasson [29] concluyen, mediante una extensa experimentación numérica, que esta estima no rinde buenos resultados y en muchos casos su precisión llega a deteriorarse significativamente. Además, al no haber constantes desconocidas en la estima, la pérdida en la exactitud es sólo consecuencia de las estimas analíticas.

Para las acotaciones del error y la estima de z en (14), Rannacher y Bangerth proponen: aproximaciones numéricas usando polinomios de interpolación de mayor orden o aproximaciones locales por postproceso.

La otra alternativa para la estima de z la presentan los estimadores de tipo residual (ver Babuška y Rheinboldt [11], además, entre otros, se pueden ver: Díez [30]; Díez, Egozcue y Huerta [31] y las citas hechas en estos trabajos). Estos estimadores se

basan en la resolución de problemas locales (uno en cada elemento del dominio). Sin embargo, para resolver estos problemas locales, es necesario determinar condiciones de contorno alrededor de cada elemento del dominio, y en nuestro caso será además necesario definir la condición inicial para cada problema local. Este tipo de estimadores tienen una sólida base teórica (ver, por ejemplo, Ainsworth [28]) pero, en la aplicación práctica, resultan ser menos eficaces que los estimadores de proyección de flujo.

4.9. Unicidad y representación óptima del error

La representación del error en la cantidad de interés involucra las soluciones del problema primal y del problema dual asociado, las cuales se pueden combinar de diferentes maneras. En otras palabras, la representación del error no es única (ver, por ejemplo, la ecuación (13) donde se definen dos representaciones distintas) y en muchos casos puede depender del problema a tratar. Por otro lado, aunque es habitual que las representaciones locales del error se expresen a través de los elementos de discretización que conforman el dominio, se pueden definir representaciones locales usando los nodos de discretización (ver, por ejemplo, los trabajos de Morin, Nochetto y Siebert [32]; Páres, Díez y Huerta [33], para el caso de problemas estacionarios) agregando así nuevas posibilidades para la representación del error. Este hecho, además, simplifica el cálculo y la implementación ya que elimina el salto de flujos de la solución aproximada en la frontera de los elementos de aquellas representaciones definidas a partir del residuo fuerte del error.

Por otro lado, ya que la representación a posteriori del error se cumple para todo v_H del espacio de elementos finitos \mathbf{V}_H , se tiene un grado de libertad adicional en la representación del error. Este grado de libertad pudiera ser utilizado, por ejemplo, para escoger una distribución espacial del error lo más homogénea posible y así evitar en el proceso adaptativo, posibles, refinamientos excesivos de la malla de cálculo.

De lo anteriormente dicho surgen las preguntas: ¿qué representación del error produce los mejores resultados en un proceso adaptativo? ¿cuál estima es la apropiada para cada representación? y ¿cuál es la v_H óptima y bajo qué costo computacional se alcanza?

Inspirados en la idea de Calderón y Díez [34], en donde se analizan en detalle el comportamiento de las técnicas de suavizado, se definirán y analizarán tres formas para la representación del error (las distribuciones locales del error asociadas al residuo se expresan a través de los nodos de discretización) con dos estrategias de postproceso para la estima del mismo. Se presentan estudios de convergencia y se discuten aspectos de implementación y metodología y su uso en procesos de mallado adaptativo.

4.10. Adaptatividad

El paradigma en adaptatividad dentro del contexto del FEM consiste en conseguir la solución, que cumpla con una precisión requerida a priori (*solución aceptable*) utilizando una malla con el menor número de grados de libertad (*mallado óptimo*). Para esto, además de la estima y una apropiada representación del error, es necesario un proceso adaptativo de la malla inicial. Los ingredientes principales en cualquier proceso adaptativo son un estimador del error y un generador de mallas. La expresión que traduce el output del estimador de error en una distribución espacial del tamaño de elemento óptimo para la nueva malla, input del generador de mallas, se denomina criterio de remallado.

En el contexto de adaptatividad basada en la norma de energía, la atención se ha dedicado a los criterios de remallado que definen el tamaño del elemento como una función del error local denominados tipo h. Entre otros, se pueden citar, los trabajos de Li y colaboradores [35, 36]; Zienkiewicz y Zhu [19]; Oñate y Bugeda [37]; Díez y Huerta [38]. En el marco de adaptatividad orientada al resultado, donde el objetivo es el control del error en una cierta cantidad de interés en lugar de la norma de energía, cada autor sigue su propia receta, basada a menudo en consideraciones heurísticas y sin ninguna exigencia en el diseño y optimalidad de la malla, ni en la representación del error utilizada (Prudhomme y Oden [25]; Peraire [39]; Parés y colaboradores [40]), y esto suele ser peor si se trata de problemas parabólicos.

Las particularidades asociadas a los criterios de remallado en cantidades de interés se relacionan especialmente con dos factores: que las contribuciones locales del error presentan en general signos opuestos y el hecho que la representación del error no

es única. Una estrategia general que defina e implemente criterios de remallado para adaptatividad orientada al resultado es dada por Díez y Calderón en [41]. En este artículo, los autores analizan cómo se han de utilizar los criterios de remallado en el proceso adaptativo orientado al control del error en cantidades de interés; se estudia analíticamente la optimalidad de estos criterios y se definen versiones (además de sus versiones para distribuciones elementales del error) para distribuciones nodales del error.

5. Objetivos Específicos

Como ya se dijo antes, el objetivo final que se quiere alcanzar es usar el XFEM modificado (XFEM+) para implementar un algoritmo adaptativo orientado al cálculo de la solución de los “problemas de difusión con conductividades muy distintas” de manera que la evaluación de la cantidad de interés sea óptima; este algoritmo debería entonces tomar en cuenta los saltos de los flujos normales sobre la interfase que es la dificultad que presenta XFEM para este tipo de problema.

A partir de esto, dos problemas generales deben ser resueltos:

- Representar y estimar de forma óptima el error cometido a evaluar la cantidad de interés $J(e)$ (Representación y estima del error).
- Calcular de forma eficiente la solución primal u_X^+ tal que el error en la cantidad de interés, $J(e)$, sea mínimo (Adaptatividad).

Para esto se plantea los siguientes objetivos:

Objetivo 1: Hacer un análisis de convergencia en normas globales (energética, L_2 , H_1) del método propuesto XFEM+. Este estudio debería involucrar información referente a los flujos normales a la interfase para resaltar la mejora de la aproximación con respecto al XFEM. Se podría intentar, entre otros, hacer un estudio de convergencia local como es el integral del flujo en la interfase.

Objetivo 2: Debido a que la condición de continuidad normal del flujo (4d) no está introducida explícitamente en la formulación variacional (8), se estudiará la posibilidad de introducir esta condición usando una formulación variacional tipo Nitsche [42].

Objetivo 3: Realizar una representación a posteriori del error y construir acotaciones para dicha representación. En este objetivo se quieren seguir las ideas que existen en la literatura para el caso XFEM.

Objetivo 4: En cuanto a los criterios de remallado en cantidades de interés, es conveniente afrontar el estudio teórico de sus propiedades de convergencia, es decir, de cuántos pasos de remallado son necesarios para alcanzar una malla que cumpla el criterio de optimalidad.

6. Metodología

Se desarrolla un estudio teórico-práctico en donde las herramientas matemáticas se fundamentan en el análisis matemático de los elementos finitos, entre los que podemos mencionar la utilización de: ecuaciones diferenciales parciales, formulación débil, espacio de Sobolev, interpolación, espacios finito dimensional, álgebra lineal, etc. El análisis práctico o computacional se basa en la implementación en la computadora de códigos (generalmente realizados en el lenguaje Matlab) de los elementos finitos y cuyos resultados arrojados corroboren los avances teóricos obtenidos.

7. Plan de Trabajo

Cursos Realizados:

- Durante el período Mar-2006- Sep-2008 se tomó los cursos: Álgebra Lineal, Análisis Real, Teoría de Funciones de una Variable Compleja, Ecuaciones Diferenciales Ordinarias, Análisis Numérico: Métodos de elementos finitos I, Métodos

de elementos finitos II: Estima de Error y Adaptatividad, Estima de Error y Adaptatividad Orientada al Resultado de Problemas Transitorios.

- Durante el período Oct-2008-Sep-2009 se cumplió con un año de estadía en la Universidad Politécnica de Cataluña en Barcelona-España en la cual se aprobó dos cursos: Mecánica de Fluidos Avanzada y Elementos Finitos en Fluidos. Además se realizó un artículo que fue aprobada para su publicación en la *Revista Internacional Métodos Numéricos de Cálculo y Diseño en Ingeniería (RIMNI)*.

Plan a realizar

- Presentación del examen de candidatura.
- Preparación y envío para su revisión del artículo: “*Estima de error y adaptatividad Aplicando una Modificación del Método de Los Elementos Finitos Extendidos*”
- Culminación y defensa de la tesis doctoral

Referencias

- [1] N. Moës, J. Dolbow, and T. Belytschko. A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46:131–150, 1999.
- [2] T. Belytschko and T. Black. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(5):601–620, 1999.
- [3] C. Daux, N. Moës, J. Dolbow, N. Sukumar, and T. Belytschko. Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48:1741–1760, 2000.
- [4] J. Chessa and T. Belytschko. An extended finite element method for two-phase fluids. *Transactions of the ASME*, pages 10–17, 2003.

-
- [5] S. Zlotnik, P. Díez, M. Fernández, and J. Vergés. Numerical modelling of tectonic plates subduction using X-FEM. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:4283–4293, 2007.
- [6] S. Brenner and R.L. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer, Berlin Heidelberg, New York, 1994.
- [7] J. A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1999, 1999.
- [8] S. Osher and R. Fedkiw. Level set methods: an overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169:463–502, 2001.
- [9] N. Moës, M. Cloirec, P. Cartaud, and J. F. Remacle. A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192:3163–3177, 2003.
- [10] F. Cordero y P. Díez. XFEM+: una modificación de XFEM para mejorar la precisión de los flujos locales en problemas de difusión con conductividades muy distintas. *Revista Internacional Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 26(2), 2010.
- [11] I. Babuška and A. Miller. The post-processing approach in the finite element method. part 1. calculation of displacements, stresses and other higher derivatives of displacements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:1085–1109, 1984.
- [12] I. Babuška and A. Miller. The post-processing approach in the finite element method. part 2. the calculation of stress intensity factors. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:1111–1129, 1984.
- [13] I. Babuška and A. Miller. The post-processing approach in the finite element method. part 3. a posteriori error estimates and adaptive mesh selection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:2311–2324, 1984.
- [14] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo, and C. Johnson. Introduction to adaptive methods for differential equations. *Acta Numerica*, pages 105–158, 1995.
- [15] R. Becker and R. Rannacher. *An optimal control approach to a posteriori error estimation in finite element methods*. INF 293/294, D-69120, Heidelberg. <http://gaia.iwr.uni-heidelberg.de>, Germany, 2001.

-
- [16] R. Becker and R. Rannacher. An feed-back approach to error control in finite element methods: Basis analysis and examples. *East-West J. Numer. Math.*, 4:237–264, 1996.
- [17] R. Becker and R. Rannacher. *Adaptive Galerkin Finite Elements Methods for Partial differential Equations*. INF 293/294, D-69120, Heidelberg., Germany, 2001.
- [18] W. Bangerth and R. Rannacher. *Adaptive Finite Element Methods for Differential Equations*. Lecture in Mathematics, Birkhuser Verlag, 2003.
- [19] O. C. Zienkiewicz and J. Z. Zhu. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 24:337–357, 1987.
- [20] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery (spr) and a posteriori error estimates. part 1: The recovery technique. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 33:1331–1364, 1992.
- [21] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery (spr) and a posteriori error estimates. part 2: Error estimates and adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1365–1382, 1992.
- [22] M. Paraschivoiu, J. Peraire, and A. T. Patera. A posteriori finite element bounds for linear functional outputs of elliptic partial differential equation. *Comput. Methods Appl. Mech Engrg.*, 150:289–312, 1997.
- [23] M. Paraschivoiu and A. T. Patera. A hierarchical duality approach to bounds for the outputs of partial differential equation. *Comput. Methods Appl. Mech Engrg.*, 158:389–407, 1998.
- [24] J. Peraire and A. T. Patera. *Bounds for linear-functional output of coercive partial differential equation: local indicators and adaptive refinement*. *Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics*. Elsevier, Amsterdam, 1998. P. Ladevze and J. T. Oden eds.
- [25] S. Prudhomme and J. T. Oden. On goal-oriented error estimation for elliptic problems: application to the control of pointwise errors. *Comput. Methods Appl. Mech Engrg.*, 176:313–331, 1999.
- [26] J. T. Oden and S. Prudhomme. Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method. *Computers & Mathematics with Applications*, 41(5-6):735–756, 2001.

- [27] P. Díez, N. Páres, and A. Huerta. Recovering lower bounds of the error by post-processing implicit residual a posteriori error estimates. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56:1465–1488, 2003.
- [28] M. Ainsworth and J. T. Oden. *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. John Wiley & Sons, New York, 2000. Pure and Applied Mathematics.
- [29] M. G. Larson and A. J. Niklasson. *A posteriori error estimation of functionals in elliptic problems: Experiments*. Preprint 2001-04, Sweden, 2001. Chalmers Finite Element Center.
- [30] P. Díez. *Un nuevo estimador de error para el método de los elementos finitos*. Tesis PhD. UPC, Barcelona, 1996.
- [31] P. Díez, J. J. Egozcue, and A. Huerta. A posteriori error estimation for standard finite element analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 163:141–157, 1998.
- [32] P. Morin, R. H. Nochetto, and K. G. Siebert. Local problems on stars: A posteriori error estimators, convergence, and performance. *Mathematics Computation*, 72(1):1067–1097, 2003.
- [33] N. Páres, P. Díez, and A. Huerta. Subdomain-based flux-free a posteriori error estimators. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, In press., 2005.
- [34] G. Calderón and P. Díez. Análisis de diferentes estimadores de error de postproceso para adaptatividad orientada al resultado. *Aceptado para su publicación en: Revista internacional de Métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería*, 22(2), 2006.
- [35] L. Y. Li, P. Bettess, J. W. Bull, T. Bond, and I. Applegarth. Theoretical formulations for adaptive finite element computations. *Comm. Numer. Methods Engrg.*, 11:857–868, 1995.
- [36] L. Y. Li and P. Bettess. Notes on mesh optimal criteria in adaptive finite element computations. *Comm. Numer. Methods Engrg.*, 11:911–915, 1995.
- [37] E. Oñate and G. Bugeda. A study of mesh optimality criteria in adaptive finite element analysis. *Engineering Computations*, 10:307–321, 1993.
- [38] P. Díez and A. Huerta. A unified approach to remeshing strategies for finite element adaptativity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 176:215–229, 1999.

-
- [39] J. Peraire. Computing bounds for functional output of exact solutions of partial differential equations. *In Adaptive Modeling and Simulation*, 1:4–5, October 2003. N. E. Wiberg and P. Díez, eds.
- [40] N. Páres, J. Bonet, A. Huerta, and J. Peraire. Guaranteed bounds for linear output of interest in elasticity. *In Adaptive Modeling and Simulation*, 1:78–79, October 2003. N. E. Wiberg and P. Díez, eds.
- [41] P. Díez and G. Calderón. Remeshing criteria and proper error representations for goal oriented h-adaptivity. *Comput. Methods Appl. Mech. and Engrg.* Sometido a revisión en:.
- [42] A. Hansbo and P. Hansbo. An unfitted finite element method, based on nitsche’s method, for elliptic interface problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 191:5537–5552, 2002.