UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS
POSTGRADO DE MATEMÁTICAS
MÉRIDA – VENEZUELA

Proyecto de Tesis de Maestría:

UN ESTIMADOR DE ERROR RESIDUAL EXPLÍCITO PARA ADAPTATIVIDAD ORIENTADA AL RESULTADO

A seguir por:

Lic. José Prieto

Tutor: Prof. Giovanni Calderón*

*Grupo Ciencias de la Computación, Departamento de Matemáticas, Edificio Teórico de Ciencias, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, La Hechicera, Mérida 5101, Estado Mérida, Venezuela. http://webdelprofesor.ula.ve/ciencias/giovanni e-mail: giovanni@ula.ve

1. Datos del Proyecto

Estudiante: Lic. José Prieto
Tutor: Prof. Giovanni Calderón (ULA)
Área de investigación: Mecánica computacional y Análisis Numérico.
Duración: El proyecto está planteado para el periodo: septiembre 2011 - abril 2012.
Unidad académica receptora: Grupo Ciencias de la Computación, Departamento de Matemáticas, Edificio Teórico de la Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida 5101, Venezuela.

2. Introducción

Resulta común que las aproximaciones numéricas para modelos matemáticos que surgen de problemas de ingeniería o ciencias sean obtenidas a partir del método de los elementos finitos (MEF). No obstante, la resolución numérica de un problema de contorno requiere controlar la calidad de la solución aproximada. Este control puede lograrse mediante un proceso adaptativo de la malla para aproximar eficientemente la solución numérica del problema. Si bien, en el pasado, se utilizaba generalmente una medida energética para definir el error; en el presente, se prefiere que la medida del error sea en base a cantidades de interés que determina el usuario. Estas cantidades suelen ser de utilidad en el campo de la ingeniería y representan regularmente: tensiones, desplazamientos o gradientes térmicos, entre otras. Desde un punto de vista matemático, se restringe la atención a cantidades que estén caracterizadas por un funcional lineal $\mathcal{J}(u)$ de la solución u del problema.

La representación del error a partir de cantidades de interés involucra en su evaluación las soluciones del problema original (primal) y la de un problema adjunto o dual. Dichas soluciones se pueden combinar de diferentes maneras; en otras palabras, la representación del error no es única. Para definir una estimación del error cometido al resolver estos problemas (primal y dual) se suele usar, entre otros, un estimador de error residual explícitos a posteriori.

Los estimadores de error de tipo residual fueron introducidos por Babuška y Rheinboldt [1]. Estos estimadores aproximan el error resolviendo problemas locales, donde el término fuente viene dado por el residuo débil. En la literatura especializada se han descrito y analizado numerosos estimadores de error residual, tanto explícitos como implícitos; muchos de estos estimadores, junto a las ideas que ellos involucran, fueron recopilados por Ainsworth y Oden en [2].

Una vez que se ha estimado el error y evaluado la representación del error elegida, un componente fundamental dentro de un proceso adaptativo está dado por el criterio de remallado. Por tanto, es necesario definir y analizar criterios de remallado para el proceso adaptativo orientado al control del error en cantidades de interés. Recientemente, Calderón y Díez [3], siguiendo las ideas introducidas por Li y Bettess [4], definen y analizan criterios de remallado para cantidades de interés, probando además la optimalidad de uno de los criterios propuestos.

Dado un problema de contorno (ecuación diferencial parcial elíptica), el objetivo central de este proyecto consiste en crear un proceso adaptativo para el control del error usando como medida una cantidad de interés. Para este fin, se introduce y analiza el estimador de error residual explícito propuesto por Rosales y Díez [5]. Pues, a diferencia de los estimadores de error explícitos habituales, este no depende de constantes desconocidas. A partir del output de este estimador, se definen estimaciones para la representación del error en la cantidad de interés, poniendo especial interés en las representaciones que surgen del residuo primal y residuo dual. Por último, el proceso adaptativo se alcanza utilizando el criterio de remallado propuesto en [3].

3. Planteamiento del Problema

Se introduce el problema de contorno modelo, el problema dual y las representaciones del error; a partir de estos, se quiere definir y analizar un proceso adaptativo.

3.1. Problema modelo y ecuación del error

La función incognita u es la solución de un problema general de contorno definido en $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, un dominio abierto, acotado y con frontera suave. La forma débil del problema queda dada como sigue: encontrar $u \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(u, v) = L(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_0, \tag{1}$$

donde los espacios funcionales $\mathbf{V}$ y $\mathbf{V}_0$ difieren en los valores del contorno Dirichlet: las funciones de $\mathbf{V}$ verifican la condición de contorno Dirichlet y las funciones de $\mathbf{V}_0$ su contraparte homogénea.

La solución aproximada $u_{\rm H}$ de (1), obtenida mediante el método de elementos finitos (MEF), pertenece al espacio funcional discreto $\mathbf{V}_{\rm H} \subset \mathbf{V}$, inducido por la discretización del dominio Ω en elementos Ω_k, $k = 1, \ldots, \mathtt{n_{elem}}$, tal que $\overline{\Omega} = \bigcup_k \overline{\Omega}_k$, $\Omega_k \cap \Omega_j = \emptyset$ para $k \neq j$, y verifica

$$B(u_{\rm H}, v) = l(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\rm H0} \subset \mathbf{V}_{\rm H}, \tag{2}$$

con $\mathbf{V}_{\rm H0}$ la contraparte discreta del espacio $\mathbf{V}_0$. El error numérico asociado, $e := u - u_{\rm H}$,pertenece al espacio $\mathbf{V}_0$ y satisface la ecuación del error

$$B(e, v) = l(v) - B(u_{\rm H}, v) =: \mathcal{R}^{\mathtt{P}}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_0, \tag{3}$$

donde $\mathcal{R}^{\mathtt{P}}$ define el *residuo débil* asociado a la solución $u_{\rm H}$ del problema primal.

3.2. Cantidad de interés, problema dual y representación del error

El objetivo que se desea alcanzar se centra en controlar la calidad numérica de la solución primal $u_{\rm H}$ mediante una cierta cantidad de interés representada por un funcional lineal $\mathcal{J}(\cdot)$. La precisión de $\mathcal{J}(u_{\rm H})$ puede ser estimada en términos del error $\mathcal{J}(e) = \mathcal{J}(u) - \mathcal{J}(u_{\rm H})$. A primera vista, para evaluar $\mathcal{J}(e)$, se debería calcular e usando (3) y luego obtener $\mathcal{J}(e)$. No obstante, incluso en su versión discreta, el problema (3) resulta inabordable o imposible de resolver computacionalmente. Otra elección consiste en relacionar $\mathcal{J}(e)$ con el residuo débil sin tener que computar el error e. Es decir, obtener $z \in \mathbf{V}_0$ tal que $\mathcal{J}(e) = \mathcal{R}^{\mathtt{P}}(z)$. De esta forma, se introduce el *problema dual o adjunto*: encontrar $z \in \mathbf{V}_0$ tal que

$$B(v, z) = \mathcal{J}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_0. \tag{4}$$

Desafortunadamente, el problema dual (4) presenta la misma dificultad de resolución que el problema primal (1). Por lo tanto, es necesario introducir la solución de elementos finitos $z_{\rm H} \in \mathbf{V}_{\rm H0}$ que satisface:

$$B(v, z_{\rm H}) = \mathcal{J}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\rm H0}. \tag{5}$$

El error asociado se denota por $\epsilon := z - z_{\rm H}$ y verifica la ecuación del error

$$B(v, \epsilon) = \mathcal{J}(v) - B(v, z_{\rm H}) =: \mathcal{R}^{\mathtt{D}}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_0, \tag{6}$$

donde $\mathcal{R}^{\mathtt{D}}$ define el *residuo débil* asociado a la solución aproximada $z_{\rm H}$ del problema dual.

De esta manera, la representación del error queda dada por

$$\mathcal{J}(e) = B(e, \epsilon) = \mathcal{R}^{\mathtt{P}}(\epsilon) = \mathcal{R}^{\mathtt{D}}(e). \tag{7}$$

4. Objetivos

Objetivo general: Crear un proceso adaptativo orientado a cantidades de interés y aplicado al problema modelo (1), usando el estimador residual explícito dado en [5] y el criterio de remallado dado en [3].

Objetivos específicos: Para lograr llevar a cabo un proceso adaptativo para el problema modelo (encontrar una malla óptima de cálculo), resulta necesario cubrir, entre otros, los siguientes objetivos específicos:

1. Estudiar el MEF aplicado a problemas elípticos e implementar el código necesario para resolver el problemas modelo (1).
2. Análisis de los distintos estimadores a posteriori de error en norma energética y cantidades de interés: residuales (explícitos e implícitos) y de postproceso.
3. Representación del error para el caso de cantidades de interés (no es única). Al igual que en norma energética, se deben analizar los estimadores de error.
4. Criterios de remallado para la representación de error en cantidades de interés.
5. Implementación del código para crear el proceso adaptativo: Estimador residual, representación del error, criterios de remallado y postproceso.
6. Análisis de los resultados obtenidos (postproceso).

5. Metodología de Investigación

La metodología que se empleará en este trabajo es la usual en investigaciones matemáticas de esta naturaleza. En primer lugar, se realizará una exhaustiva revisión bibliográfica para establecer los antecedentes y limitaciones del problema, tanto teóricas como numéricas. Luego, sobre la base de estos resultados, se procederá a explorar y plantear estrategias que tomen en consideración las características del problema y mejoren las dificultades existentes.

Dadas las características sobre las cuales se fundamenta este proyecto de tesis de maestría, resulta habitual que la presentación y aprobación del proyecto se solicite tiempo depués de haberse iniciado la investigación en cuestión. Por tal motivo, muchas de las actividades a realizar a lo largo del proyecto ya han sido iniciadas o están, en muchos casos, ya concluidas.

Para lograr los objetivos planteados, se definen las siguientes actividades, sin que esto implique la no intersección en los periodos de ejecución de las mismas.

Actividad 1. Estudio del MEF aplicado a problemas elípticos. Esta actividad ya fue desarrollada en un curso electivo (semestre A-2009). En el curso se desarrollaron y validaron los códigos para encontrar soluciones aproximadas del problema modelo (1).

Actividad 2. Documentación del problema: Esta actividad engloba los objetivos 2, 3 y 4. Principalmente, nos centramos en el estudio de las referencias [2], [5], [3] y [6]. Sin embargo, se pretende una revisión de la literatura periódica en las hemerotecas nacionales, bases de datos y publicaciones electrónicas a las cuales podamos acceder, a fin de recabar la mayor información posible sobre el problema, tomando en cuenta los aspectos teóricos y numéricos del mismo. Esta información nos permitirá elaborar el estado del arte (antecedentes) del problema y formar las bases de esta línea de investigación.

Actividad 3. Implementación y validación de los algoritmos numéricos propuestos. El código de los algoritmos será creado (inicialmente) en MATLAB y la validación de los mismos se hará sobre un test de ejemplos académicos. Posteriormente, el código será implementado en FORTRAN, sin que esta parte final limite la culminación de la tesis.

Actividad 4. Postproceso y análisis de los resultados obtenidos de la experimentación numérica.

Actividad 5. Escritura de la tesis y su revisión. Se planificó escribir la tesis desde casi el comienzo del proyecto, primero empezando con el marco teórico y después con el desarrollo, para al final solo concentrarse en el esfuerzo de redacción de resultados y conclusiones. Posteriormente, se quiere presentar los resultados obtenidos en conferencias nacionales y su posible publicación en una revista especializada.

6. Calendario de Actividades

Se considera un periodo de actividades empezando en el mes de septiembre de 2011 y finaliza en abril del año proximo. El calendario se divide según las actividades detalladas anteriormente.

Actividades	Septiembre	Octubre	Noviembre	Diciembre	Enero	Febrero	Marzo	Abril
Actividad 1	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	
Actividad 2		✓	✓	✓	✓	✓	✓	
Actividad 3			✓	✓	✓	✓	✓	
Actividad 4						✓	✓	✓
Actividad 5			✓	✓	✓	✓	✓	✓

Cuadro 1: Calendario de actividades

Referencias

[1] I. Babuška and W.C. Rheinboldt, *A posteteriori error estimates for the finite element method*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 12, pp. 1597–1615, (1978).

[2] Mark Ainsworth and J. Tinsley Oden, *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. Pure and Applied Mathematics, Wiley-Interscience, 2000.

[3] Díez P. and Calderón G., *Remeshing criteria and proper error representations for goal oriented h-adaptivity*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 196, pp. 719–733, (2007).

[4] L.Y. Li and P. Bettess, *Notes on mesh optimal criterio in adaptive finite element computations*. Communications in Numerical Methods in Enginnering, Vol. 11, pp. 911-915, (1995).

[5] Rosales R. y Díez P., *Estima de error residual explícita para cantidades de interés utilizando funciones burbuja*. Revista Internacional Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería, Vol. 25, Issue 4, pp. 337-357, (2009).

[6] Calderón G. y Gallo R., *El Método de los Elementos Finitos: un enfoque matemático*. Escuela Venezolana de Matemáticas, IVIC, 2011.