

ADAPTATIVIDAD EN CANTIDADES DE INTERÉS A PARTIR DE LA REPRESENTACIÓN NODAL DEL ERROR

Giovanni Calderón^a y Pedro Díez^b

^a*Grupo Ciencias de la Computación, Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, La Hechicera, Mérida 5101, Venezuela, giovanni@ula.ve*

^b*Laboratori de Càlcul Numèric, Departament de Matemàtica Aplicada III, Universitat Politècnica de Catalunya, Mòdul C2, Jordi Girona 1-3, E-08034 Barcelona, España, <http://www-lacan.upc.edu>*

Palabras clave: Adaptatividad orientada al resultado, criterio de remallado, estima a posteriori del error, error en cantidades de interés

Resumen. La resolución numérica de un problema de contorno requiere controlar la calidad de la solución aproximada. Hoy en día se prefiere que este control sea en base a cantidades de interés determinadas por el usuario y no en la tradicional medida energética del error. La representación del error en estas cantidades de interés no son únicas y pueden darse en función de los elementos de la malla o mediante representaciones nodales; resultados recientes demuestran que la representación nodal resulta más eficiente, tanto de forma numérica como de implementación. En un proceso adaptativo, además de la representación y estima del error es necesario definir y analizar un criterio de remallado, éste traduce los resultados obtenidos del estimador de error en una distribución espacial del tamaño de elemento que conlleve a una malla óptima. En este trabajo se define y analiza un proceso adaptativo que surge al usar representaciones nodales del error junto a un criterio de remallado que resulta óptimo para cantidades de interés. La experimentación numérica muestra la eficiencia y las propiedades de convergencia del proceso adaptativo.

1. INTRODUCCIÓN

En las aplicaciones prácticas, la resolución numérica de un problema de contorno requiere 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. 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 interés en el campo de la ingeniería y representan regularmente: tensiones, desplazamientos o gradientes térmicos, entre otras. La representación del error en estas cantidades de interés involucra las soluciones del problema original (primal) y de un problema adjunto (o dual) asociado, que se pueden combinar de diferentes maneras; es decir, la representación del error no es única.

En [Calderón and Díez \(2006\)](#) se analiza en detalle el comportamiento de las técnicas de suavizado (introducida originalmente por [Zienkiewicz and Zhu \(1987\)](#)) para el caso de estima de tensiones en norma de energética) para definir estimas del error en cantidades de interés, éstas son evaluadas en distintas representaciones del error que se definen a partir de la solución primal o dual. En estos casos se deben estimar desplazamientos en lugar de tensiones. A partir de este análisis se concluye que las representaciones nodales del error, usando el residuo débil asociado a la solución primal o dual, son las que presentan mejores resultados tanto numéricamente como de implementación, ya que para su evaluación sólo se necesita estimar una solución (primal o dual). Además, estas representaciones nodales del error no presentan el salto de flujos de la solución aproximada en la frontera de los elementos, los cuales sí están presentes en la representación del error en función de los elementos que forman la discretización del dominio ([Bangerth and Rannacher, 2003](#)).

Una vez se ha estimado el error, un componente fundamental dentro de un proceso adaptativo está dado por el criterio de remallado. Por lo tanto, es necesario definir y analizar criterios de remallado para el proceso adaptativo orientado al control del error en cantidades de interés. En este contexto 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 and Oden, 1999](#); [Peraire, 2003](#); [Páres et al., 2003](#)).

Recientemente, los autores, en [Díez and Calderón \(2007\)](#), siguiendo las ideas introducidas en [Li et al. \(1995\)](#) y [Oñate and Bugeda \(1993\)](#), definen y analizan criterios de remallado para cantidades de interés usando las representaciones del error definidas en [Calderón and Díez \(2006\)](#) pero sin estimar errores; es decir, la evaluación del error se hizo de forma exacta. Los autores logran además probar la optimalidad de uno de los criterios propuestos.

La idea principal de este artículo consiste en juntan los resultados obtenidos en [Calderón and Díez \(2006\)](#) y [Díez and Calderón \(2007\)](#) para implementar un proceso adaptativo orientado al control del error en función de una cantidad de interés. Es decir, se define y analiza el proceso adaptativo que surge al usar las representaciones nodales del error y el criterio de remallado que resultó óptimo para cantidades de interés. La estima del error se lleva a cabo siguiendo las técnicas de suavizado introducidas en [Calderón and Díez \(2006\)](#).

El resto del artículo se estructura de la siguiente manera. En el siguiente apartado se introduce el problema modelo, el problema dual y se derivan las representaciones del error a ser analizadas. En 3 se definen los estimadores y se discuten aspectos prácticos de su implementación. En 4 se desarrolla el criterio de remallado (óptimo) a ser aplicado en el proceso adaptativo. Finalmente, en 5, se presentan los resultados numéricos y las conclusiones más relevantes.

2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

2.1. Problema modelo y ecuación del error

La función incognita \mathbf{u} es la solución de un problema general de contorno definido en $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \geq 1$, un dominio abierto, acotado y con frontera $\partial\Omega$ suave. La formulación variacional del problema queda dada como sigue: encontrar $\mathbf{u} \in \mathcal{V}$ tal que

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0, \quad (1)$$

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

La solución aproximada \mathbf{u}_H de (1) usando el método de elementos finitos (MEF) pertenece al espacio funcional discreto $\mathcal{V}_H \subset \mathcal{V}$, inducido por la discretización del dominio Ω en elementos Ω_k , $k = 1, \dots, n_{\text{elem}}$, tal que $\bar{\Omega} = \bigcup_k \bar{\Omega}_k$, $\Omega_k \cap \Omega_j = \emptyset$ para $k \neq j$, y verifica

$$a(\mathbf{u}_H, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_{H0} \subset \mathcal{V}_H, \quad (2)$$

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

$$a(\mathbf{e}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}) - a(\mathbf{u}_H, \mathbf{v}) =: \mathcal{R}^P(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0, \quad (3)$$

donde \mathcal{R}^P define el *residuo débil* asociado a la solución aproximada \mathbf{u}_H del problema primal.

2.2. 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 \mathbf{u}_H mediante una cierta cantidad de interés representada por un funcional lineal $\mathcal{J}(\cdot)$. Para expresar el error en la cantidad de interés, $\mathcal{J}(\mathbf{e})$, se define el *problema adjunto o dual*: encontrar $\mathbf{z} \in \mathcal{V}_0$ tal que

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

Entonces, dado que \mathbf{v} puede ser reemplazada por \mathbf{e} , pues $\mathbf{e} \in \mathcal{V}$, se obtiene la representación del error

$$\mathcal{J}(\mathbf{e}) = a(\mathbf{e}, \mathbf{z}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{z}). \quad (5)$$

Desafortunadamente, la solución \mathbf{z} del 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 $\mathbf{z}_H \in \mathcal{V}_{H0}$ que satisface:

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{z}_H) = \mathcal{J}(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_{H0}. \quad (6)$$

El error asociado se denota por $\boldsymbol{\epsilon} := \mathbf{z} - \mathbf{z}_H$ y verifica la ecuación del error

$$a(\mathbf{v}, \boldsymbol{\epsilon}) = \mathcal{J}(\mathbf{v}) - a(\mathbf{v}, \mathbf{z}_H) =: \mathcal{R}^D(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0, \quad (7)$$

donde \mathcal{R}^D define el *residuo débil* asociado a la solución aproximada \mathbf{z}_H del problema dual.

Usando la propiedad de ortogonalidad de Galerkin ($a(\mathbf{e}, \mathbf{v}_H) = 0 \quad \forall \mathbf{v}_H \in \mathcal{V}_{H0}$), la representación del error dada en (5) puede ser modificada introduciendo una función arbitraria \mathbf{v}_H .

En particular, tomando \mathbf{v}_H como la solución del problema dual (6) en \mathcal{V}_{H0} , esto es $\mathbf{v}_H = \mathbf{z}_H$, la *representación del error* en la cantidad de interés se expresa a partir de (5) y (7) como:

$$\mathcal{J}(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{e}). \quad (8)$$

Observación 1. La representación del error $\mathcal{J}(\mathbf{e}) = a(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon})$, que surge a combinar (5) y la propiedad de ortogonalidad de Galerkin, requiere para su evaluación estimar el error en los dos problemas primal y dual, resultando en desventaja con las representaciones dadas en (8) que requieren sólo estimar el error en uno de los dos problemas. Por otro lado, si los errores estimados vienen dados por $\mathbf{e}^* = \mathbf{e} - \boldsymbol{\eta}_1$ y $\boldsymbol{\epsilon}^* = \boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\eta}_2$, con $\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2 \in \mathcal{V}_{H0}$, entonces

$$\mathcal{J}(\mathbf{e}) = a(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) = a(\mathbf{e}^*, \boldsymbol{\epsilon}^*) + a(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2). \quad (9)$$

Obviamente, el término $a(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2)$ no necesariamente es pequeño y puede deteriorar la calidad de la estima (para mayores detalles ver Calderón and Díez (2006)). Por estos motivos, en este trabajo sólo consideraremos las representaciones del error dadas en (8).

2.3. Representación nodal del error

En un proceso adaptativo es necesario disponer de una distribución local del error en todo el dominio Ω . Esto generalmente se logra restringiendo los operadores integrales a cada elemento Ω_k de la malla. Por ejemplo, usando el residuo primal para la representación del error se tiene

$$\mathcal{J}(\mathbf{e}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} \mathcal{R}_k^P(\boldsymbol{\epsilon}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} a_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}),$$

donde $a_k(\cdot, \cdot)$ y $\mathcal{R}_k^P(\cdot)$ representan las restricciones al elemento Ω_k de la malla de $a(\cdot, \cdot)$ y $\mathcal{R}^P(\cdot)$, respectivamente. No obstante,

$$\mathcal{R}_k^P(\boldsymbol{\epsilon}) = a_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) + \int_{\partial\Omega_k} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \boldsymbol{\epsilon} ds$$

es una medida local del error difícil de interpretar e implementar; pues, además de la integral de línea resulta necesario estimar la solución primal \mathbf{u} . En consecuencia, una estrategia distinta para la distribución local del error debe ser planteada.

Utilizando la propiedad de *partición de la unidad* que verifican las funciones base N_i , $i = 1 \dots n_{\text{poin}}$, del espacio de aproximación \mathcal{V}_H , es decir $\sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} N_i(\mathbf{x}) = 1$, para todo $\mathbf{x} \in \Omega$, y la linealidad de $\mathcal{R}^P(\cdot)$ se tiene que

$$\mathcal{J}(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^P\left(\boldsymbol{\epsilon} \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} N_i\right) = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon}), \quad (10)$$

donde cada contribución $\mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon})$ se puede calcular fácilmente una vez se conoce $\boldsymbol{\epsilon}$ y está asociada al soporte de N_i denotado por ω_i (denominado *estrella* y formado por el conjunto (patch) de elementos conectados al nodo i de la malla). Así pues, las contribuciones $\mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon})$ al error $\mathcal{J}(\mathbf{e})$ están asociadas a los nodos \mathbf{x}_i , no a los elemento Ω_k del dominio Ω . Esto es poco habitual pero presenta ventajas en el cálculo (las contribuciones locales no presentan saltos de flujo en la frontera de ω_i) y en los procesos de remallado, donde la información que requieren los malladores automáticos se expresa preferentemente en los nodos.

Análogamente, se establece una distribución asociada a la representación mediante el residuo dual. Así, las representaciones del error dadas en (8) inducen las siguientes representaciones de la distribución espacial del error:

$$\mathcal{J}(\mathbf{e}) = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^{\text{P}}(N_i \boldsymbol{\epsilon}) = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^{\text{D}}(N_i \mathbf{e}) \quad (11)$$

3. ESTIMA DEL ERROR ORIENTADA AL RESULTADO

En las representaciones del error deducidas en la sección anterior, los errores primal \mathbf{e} y dual $\boldsymbol{\epsilon}$ son desconocidos (u y z incógnitas). Consecuentemente, el objetivo ahora consiste en aproximar las soluciones de los problemas primal y dual, y utilizarlas en la representación del error que se desee. Desde un punto de vista práctico, se usan las soluciones de referencia \mathbf{u}_h y \mathbf{z}_h en lugar de las soluciones exactas \mathbf{u} y \mathbf{z} . Obviamente, calcular \mathbf{u}_h o \mathbf{z}_h es equivalente a calcular los errores de referencia $\mathbf{e}^{\text{ref}} := \mathbf{u}_h - \mathbf{u}_H$ o $\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} := \mathbf{z}_h - \mathbf{z}_H$. Sin embargo, el cálculo global de \mathbf{u}_h y \mathbf{z}_h en \mathcal{V}_h conlleva un costo computacional prohibitivo, por lo cual se hace necesario definir procesos que resulten admisibles computacionalmente para definir estimas de \mathbf{u}_h y \mathbf{z}_h . El proceso de estima a posteriori del error que se presenta sigue las ideas introducidas por [Wiberg et al. \(1992\)](#); [Wiberg and Li \(1994\)](#) y proporciona aproximaciones \mathbf{u}^* y \mathbf{z}^* de \mathbf{u}_h y \mathbf{z}_h , respectivamente, que se obtienen postprocesando las soluciones \mathbf{u}_H y \mathbf{z}_H . En otras palabras, se estiman desplazamientos en lugar de tensiones.

En estos tipo de estimadores por postproceso (suavizado) es habitual estimar tensiones en lugar de desplazamientos (SPR, [Zienkiewicz and Zhu \(1987, 1992a,b\)](#)). Sin embargo, en esta opción se hace necesario la estima de los errores de tensiones (o flujos) de los problemas primal y dual, y sólo puede ser aplicada en la representación del error (9) y no con las representaciones dadas en (11).

Con el fin de facilitar la exposición, se utilizará la solución del problema dual para introducir las estimas ($J(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^{\text{P}}(\boldsymbol{\epsilon})$). Sin embargo, los resultados son equivalentes para la estima de la solución del problema primal.

La meta es obtener $\mathbf{z}^* \in \mathcal{V}_h$ a partir de \mathbf{z}_H tal que $\mathbf{z}^* \approx \mathbf{z}_h$ o que mejore la calidad (más suave) de la solución \mathbf{z}_H . Se asume, que el espacio de referencia seleccionado es h-refinado; es decir, hay un cierto factor de refinamiento r ($r = 2, 3, 4, \dots$) tal que $h = H/r$ ($\mathcal{V}_H \subset \mathcal{V}_h$). No se está considerando la posibilidad de enriquecer el espacio de referencia aumentando el orden de la interpolación, esto es, usando enriquecimiento de tipo “p” aunque el procedimiento sería similar.

La solución mejorada \mathbf{z}^* tiene que incorporar la información (necesariamente no local) que \mathbf{z}_H puede facilitar sobre las curvaturas. Para conseguir que \mathbf{z}^* contenga esta información se sigue el siguiente proceso.

Todo elemento, Ω_k , de la malla generada por \mathcal{V}_H tiene asociado un patch de elementos, ω_k (distinto del patch conectado al nodo k de la malla), formado por todos los elementos que lo rodean (ver Figura 1). El suavizado se realiza localmente, en cada patch de elementos, centrado en cada elemento de la malla. Los valores de \mathbf{z}_H en los nodos del patch (marcados con \circ en la Figura 1) son usados como entrada para definir una función polinómica \mathbf{z}^s ($\mathbf{z}^s \in [\mathcal{P}_n]^2$, con \mathcal{P}_n el espacio de polinomios de orden n) en ω_k mediante un proceso de mínimos cuadrados. En dos dimensiones: $\mathbf{z}^s := [z_x^s \ z_y^s]^T$, con z_x^s y z_y^s los polinomios a definir para los desplazamientos en x y y , respectivamente. Estos polinomios son evaluados en los nodos de la malla de referencia, contenidos en Ω_k , para definir los valores nodales de \mathbf{z}^* (nodos marcados con \bullet en la Figura 1).

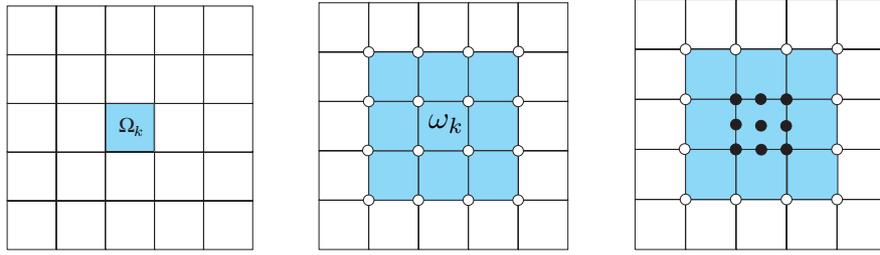


Figura 1: Ilustración del proceso recovery en 2D. Cada elemento de la malla Ω_k (gráfica de la izquierda) es asociado con un patch ω_k (sombreado en la gráfica del centro) y los nodos correspondientes de la malla H (marcados con \circ). Un polinomio es ajustado a los valores de los nodos \circ usando un criterio de mínimos cuadrados (para cada componente del vector desplazamiento). Este polinomio se evalúa para obtener los valores mejorados en la malla de referencia h (nodos marcados con \bullet en la gráfica de la derecha).

Es decir,

$$z^*|_{\Omega_k} = \Pi_h z^s,$$

donde Π_h es el operador de interpolación nodal sobre \mathcal{V}_h . El promedio de todos los valores computados se utiliza para los nodos de la malla h implicados en diferentes patch.

Los polinomios de cada componente de z^s en el patch ω_k se describen como

$$z_x^s = \mathbf{P} \mathbf{a}_x \quad \text{y} \quad z_y^s = \mathbf{P} \mathbf{a}_y,$$

donde \mathbf{P} es el vector fila de la base de polinomios que se utiliza y, \mathbf{a}_x y \mathbf{a}_y son los vectores columna de parámetros (coeficientes de los polinomios) a determinar.

Por ejemplo, para elementos bilineales, se selecciona un polinomio cuadrático completo (6 grados de libertad) para definir cada componente de z^s . Es decir,

$$\mathbf{P} = [1 \ x \ y \ xy \ x^2 \ y^2] \quad \text{y} \quad \mathbf{a}_\alpha = [a_1^\alpha \ a_2^\alpha \ a_3^\alpha \ a_4^\alpha \ a_5^\alpha \ a_6^\alpha]^\text{T} \quad \text{con} \quad \alpha = x, y.$$

Para determinar \mathbf{a}_α se hace un ajuste por mínimos cuadrados usando los valores nodales de z_H en el patch ω_k . Así, para cada componente de z^s , se minimiza el funcional

$$\mathcal{F}(\mathbf{a}_\alpha) = \int_{\omega_k} ([z_H]_\alpha - z_\alpha^s)^2 d\Omega = \int_{\omega_k} ([z_H]_\alpha - \mathbf{P} \mathbf{a}_\alpha)^2 d\Omega,$$

donde $[z_H]_\alpha$ representa los valores de z_H en la coordenada α ($\alpha = x, y$). Obsérvese que $[z_H]_\alpha$ es una función escalar (no es un vector).

La condición de mínimo resulta en

$$\mathbf{A} \mathbf{a}_x = \mathbf{b}_x \quad \text{y} \quad \mathbf{A} \mathbf{a}_y = \mathbf{b}_y,$$

donde

$$\mathbf{A} = \int_{\omega_k} \mathbf{P}^\text{T} \mathbf{P} d\Omega \quad \mathbf{b}_x = \int_{\omega_k} \mathbf{P}^\text{T} [z_H]_x d\Omega \quad \mathbf{b}_y = \int_{\omega_k} \mathbf{P}^\text{T} [z_H]_y d\Omega.$$

El orden de la matriz cuadrada \mathbf{A} es igual a la dimensión de la base \mathbf{P} (es decir, \mathbf{A} es 6×6). Así, el número de ecuaciones a resolver en cada patch es pequeño. Además, se tiene la misma matriz \mathbf{A} en la solución para cada componente de z^s y por lo tanto sólo una factorización de ésta es necesaria.

El hecho de usar una base cuadrática completa (6 grados de libertad) para ajustar los valores nodales de z_H en ω_k permite evaluar los patch de tres elementos (número mínimo de elementos en un patch) sin ninguna dificultad.

En la implementación numérica, para evitar el posible mal condicionamiento de \mathbf{A} se reescala la base de polinomios. Así, la base \mathbf{P} se define como

$$\mathbf{P} = [1 \quad \lambda \quad \mu \quad \lambda\mu \quad \lambda^2 \quad \mu^2]$$

donde

$$\lambda = \frac{x - x_m}{h_x} \quad \text{y} \quad \mu = \frac{y - y_m}{h_y}$$

son coordenadas adimensionales; x_m, y_m representan el centro del patch y h_x, h_y las longitudes características del patch, esto es, $x_m - h_x/2 \leq x \leq x_m + h_x/2$ y $y_m - h_y/2 \leq y \leq y_m + h_y/2$, de manera que λ y μ se mueva entre -1 y 1 .

Utilizando el suavizado de desplazamientos descrito anteriormente se obtienen \mathbf{u}^* y \mathbf{z}^* que permiten estimar los errores $\mathbf{e}^* = \mathbf{u}^* - \mathbf{u}_H$ y $\boldsymbol{\epsilon}^* = \mathbf{z}^* - \mathbf{z}_H$. Sustituyendo \mathbf{e}^* y $\boldsymbol{\epsilon}^*$ por \mathbf{e} y $\boldsymbol{\epsilon}$ en (11) se obtienen los estimadores

$$\mathcal{S}_1 := \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(N_i \mathbf{e}^*) \quad \mathcal{S}_2 := \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^D(N_i \boldsymbol{\epsilon}^*) \quad (12)$$

4. CRITERIO DE REMALLADO

Hasta el momento se han introducido representaciones y estimas del error en cantidades de interés. No obstante, para conseguir la solución que cumpla con una precisión requerida a priori (*solución aceptable*) utilizando una malla con el menor número de grados de libertad (*malla óptima*) es preciso, además de la representación y estima del error, un proceso adaptativo. Para concretar este proceso adaptativo es necesario definir un *criterio de remallado*, éste traduce los resultados obtenidos del estimador de error en una distribución espacial del tamaño de elemento que conlleva a una malla óptima. En este trabajo sólo nos concentraremos en procesos adaptativos tipo h (tamaño de elemento) ya que resultan más generales y al mismo tiempo sencillos de aplicar cuando se dispone de un generador de mallas.

Si el criterio de remallado es derivado apropiadamente, la nueva malla debe proporcionar una solución aproximada que satisface los requisitos de exactitud a un costo computacional mínimo. Las particularidades asociadas a los criterios de remallado en cantidades de interés están relacionadas especialmente con dos factores: las contribuciones locales del error tienen en general diferentes signos y, la distribución espacial del error no es única.

El cambio de signo en las contribuciones locales del error ocasiona que, en algunas partes del dominio, refinando la malla disminuya el error en la cantidad de interés mientras que en otras zonas el refinamiento de la malla tiene el efecto contrario. En este sentido, uno podría pensar en compensar los errores que vienen de distintas zonas para controlar el error final. No obstante, una estrategia de remallado basada en compensar las contribuciones del error sería inestable, requiriendo una alta precisión tanto para la estima del error como para el generador automático de mallas. En la práctica, en lugar de promediar las contribuciones del error con signos opuestos, es mucho más apropiado utilizar los valores absolutos del error y refinar todas las zonas donde las contribuciones del error son grandes (en valor absoluto), independientemente del signo que posea. Obviamente, este tipo de estrategia conduce a definir mallas muy conservadoras, con una gran cantidad de elementos, especialmente si la distribución espacial del error tiene contribuciones locales con signos opuestos que se compensan entre ellas.

Por otro lado, la carencia de unicidad para la distribución del error permite que el error en la cantidad de interés pueda ser descrito por diferentes expresiones equivalentes, dando como

resultado distintas distribuciones locales del error. Obviamente, si el criterio de remallado se basa en los valores absolutos de las contribuciones locales del error, las distribuciones espaciales del error preferidas son aquellas que tienen *todas* o *la mayoría* de las contribuciones locales con el mismo signo. Así, el hecho de usar valores absolutos tiene el menor efecto posible en la malla que resulta al aplicar el criterio de remallado.

4.1. Marco general para los criterios de remallado

Es común que el output de un criterio de remallado sea el tamaño de elemento para la nueva malla. Sin embargo, los generadores automáticos de mallas (ver, por ejemplo, [Sarrate and Huerta \(2000\)](#)) requieren la información sobre el tamaño de elemento deseado para la nueva malla expresada en los nodos de la malla actual. Así, para llevar esta información a los nodos se requiere de un postproceso que involucra un suavizado de la distribución del tamaño real de los elementos; este hecho, introduce errores al proceso, especialmente donde las variaciones del error sean rápidas. No obstante, a partir de (12) se pueden definir criterios de remallado cuyo output esté dado en los nodos de la malla y no en los elementos.

Sea \mathcal{E} el error funcional que se desea controlar. En un proceso de adaptatividad normal, \mathcal{E} es la norma de energía del error (al cuadrado), $a(e, e)$, en adaptatividad orientada al resultado \mathcal{E} es precisamente $\mathcal{J}(e)$. La cantidad \mathcal{E} se puede descomponer en contribuciones nodales $\mathcal{E} = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{E}_i$, con $\mathcal{E}_i = \mathcal{R}^P(N_i \epsilon)$ o $\mathcal{E}_i = \mathcal{R}^D(N_i \epsilon)$, según sea el caso. Cada contribución nodal actúa sobre un parte del dominio, Ω_i , que contiene al nodo en cuestión, con una medida (tamaño nodal de elemento) denotada por H_i . Si los elementos en la malla son lo suficientemente regulares (no demasiado distorsionados), podemos suponer, al igual que para el tamaño de elemento, que el tamaño nodal de elemento H_i está dado por

$$H_i = [\Omega_i]^{1/d}, \quad \text{con } \Omega_i := \omega_i / n_{\text{en}},$$

y n_{en} el número de nodos por elemento.

Todas las cantidades que hacen referencia a la nueva malla se denotan con un acento circunflejo ($\hat{\cdot}$). El tamaño nodal de elemento en la nueva malla debería ser denotado con \hat{H}_i para $\hat{i} = 1, \dots, \hat{n}_{\text{poin}}$. Sin embargo, el criterio de remallado proporciona el mismo tamaño nodal de elemento en la nueva malla para todos los elementos que se forman a partir de la región Ω_i . Así, resulta más conveniente usar la notación \hat{H}_i para denotar el tamaño nodal de elemento en la nueva malla asociado a la región Ω_i .

La meta es entonces derivar una expresión para \hat{H}_i como función de \mathcal{E}_i y H_i , tal que la nueva malla cumpla los requisitos de precisión exigidos a un costo computacional mínimo (*malla óptima*).

4.2. Hipótesis requeridas y derivación del criterio de remallado

Derivar un criterio de remallado requiere establecer hipótesis, tanto en la convergencia local de las soluciones como en la distribución del error en la malla óptima. En principio, una estima a priori es necesaria para las contribuciones nodales del error. Para esto, se admite que las contribuciones nodales convergen localmente de forma análoga a como ocurre en los elementos. Es decir

$$\mathcal{E}_i \leq C(H_i)^\alpha, \quad \text{para } i = 1, \dots, n_{\text{poin}}, \quad (13)$$

donde C es una constante independiente del tamaño de la malla y α es el orden de convergencia de dicha contribución local. En la derivación del criterio de remallado se asume que la estima

es óptima, en el sentido que la desigualdad dada en (13) es reemplazada por la igualdad (ver, [Li et al. \(1995\)](#)). Así la siguiente igualdad se cumple:

$$\mathcal{E}_i = C(H_i)^\alpha, \quad \text{para } i = 1, \dots, n_{\text{poin}}. \quad (14)$$

El valor de α se deriva de las estimas a priori del error (representación en elementos) usualmente en norma de energía debido a que las contribuciones locales del error son definidas a partir de una representación del error que implica productos de energía de las cantidades de error ($\mathcal{J}(e) = a(e, \epsilon)$). Este orden de convergencia se asume además para la nueva malla, esto es

$$\widehat{\mathcal{E}}_i = C(\widehat{H}_i)^\alpha, \quad \text{para } \widehat{i} = 1, \dots, \widehat{n}_{\text{poin}}. \quad (15)$$

En segundo lugar, una hipótesis se debe hacer para la distribución del error en la malla óptima. Esto resulta, usualmente, en establecer una cierta uniformidad en la distribución del error. En nuestro caso, la nueva malla se busca tal que todas las contribuciones nodales del error sean iguales. Es decir, todos los $\widehat{\mathcal{E}}_i$, para $\widehat{i} = 1, \dots, \widehat{n}_{\text{poin}}$, son iguales y no dependen de \widehat{i} . En [Díez and Calderón \(2007\)](#) se prueba que esta suposición deriva en un criterio de remallado óptimo para adaptatividad orientada al resultado, en el sentido que provee la malla con el menor número de elementos y el error asociado a ésta resulta inferior a un cierto valor de tolerancia prescrito.

El error prescrito para la nueva malla, $\widehat{\mathcal{E}}$, es un dato conocido. Así, este criterio de remallado requiere que

$$\widehat{\mathcal{E}}_i = \widehat{\mathcal{E}} / \widehat{n}_{\text{poin}}, \quad \text{para } \widehat{i} = 1, \dots, \widehat{n}_{\text{poin}}. \quad (16)$$

Al deducir C de la ecuación (14) y sustituir en (15) se consigue

$$\frac{\mathcal{E}}{\widehat{n}_{\text{poin}}} = \mathcal{E}_i \frac{(\widehat{H}_i)^\alpha}{(H_i)^\alpha} \quad \text{y, consecuentemente,} \quad \widehat{H}_i = \left[\frac{\widehat{\mathcal{E}}}{\mathcal{E}_i \widehat{n}_{\text{poin}}} \right]^{1/\alpha} H_i, \quad (17)$$

donde el número de nodos de la nueva malla, $\widehat{n}_{\text{poin}}$, es aún desconocido. Al suponer válida la hipótesis de regularización de la malla se puede predecir el valor de $\widehat{n}_{\text{poin}}$. Se asume que el número de elementos en la nueva malla que ocupan la zona Ω_i de la malla actual será $[H_i / \widehat{H}_i]^d$. Así, la siguiente expresión para $\widehat{n}_{\text{poin}}$ es dada

$$\widehat{n}_{\text{poin}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \left[\frac{H_i}{\widehat{H}_i} \right]^d. \quad (18)$$

Sustituyendo (17) en (18) se obtiene que

$$\widehat{n}_{\text{poin}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \left[\frac{\mathcal{E}_i \widehat{n}_{\text{poin}}}{\widehat{\mathcal{E}}} \right]^{d/\alpha} = \frac{\widehat{n}_{\text{poin}}^{d/\alpha}}{\widehat{\mathcal{E}}^{d/\alpha}} \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} (\mathcal{E}_i)^{d/\alpha},$$

por lo tanto

$$\widehat{n}_{\text{poin}} = \left[\frac{1}{\widehat{\mathcal{E}}^{d/\alpha}} \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} (\mathcal{E}_i)^{d/\alpha} \right]^{\alpha/(\alpha-d)}. \quad (19)$$

De esta manera $\widehat{n}_{\text{poin}}$ se puede evaluar una vez se hayan calculado todos los errores locales \mathcal{E}_i en la malla actual, pues el error en la nueva malla, $\widehat{\mathcal{E}}$, es una cantidad prescrita.

Al abordar otras características para definir una malla óptima se pueden derivar otras expresiones para definir criterios de remallado (ver [Díez and Calderón \(2007\)](#)). Sin embargo, como ya ha dicho, es el criterio implementado en este apartado el que resulta óptimo para adaptatividad orientada al resultado.

El orden de convergencia local, α , depende de la distribución del error que se escoja. Al escoger $\mathbf{v}_H = \mathbf{z}_H$, la distribución del error queda dada, de forma indistinta, a partir de (8) o (11). El orden de convergencia local que corresponde a cualquiera de estas distribuciones está dada por $\alpha = 2p + d$, donde p es el grado de la interpolación y d la dimensión del dominio. Sin embargo, se pudiera buscar un \mathbf{v}_H para el cual la distribución del error resulte óptima para el proceso adaptativo. Un análisis en profundidad sobre como escoger el \mathbf{v}_H que resulte óptimo para el proceso adaptativo está dado en [Díez and Calderón \(2007\)](#).

4.3. Factor de corrección

En el desarrollo del criterio de remallado se ha supuesto implícitamente que todas las contribuciones locales del error son positivas o, más generalmente, todas tienen el mismo signo (ecuación (16)). Como se dijo previamente esto supone tomar valores absolutos en las contribuciones locales dando como resultado una estrategia de remallado muy conservadora. De hecho, en estos casos la suma de todos los \mathcal{E}_i es mucho más grande que $\mathcal{J}(e)$.

Una estrategia para obtener una representación local del error que corrija el efecto que produce el fenómeno de cambio de signo en la contribuciones locales consiste en usar un *factor de corrección* apropiado. La idea se centra en que dicha representación debe tener el mismo signo que $a_i(\mathbf{e}, \epsilon)$ para todas las contribuciones locales y sin embargo, la suma de sus magnitudes sea igual a $\mathcal{J}(e)$.

Se introduce el factor

$$\beta := \frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} a_i(\mathbf{e}, \epsilon)}{\sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} |a_i(\mathbf{e}, \epsilon)|} = \frac{\mathcal{J}(e)}{\sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} |a_i(\mathbf{e}, \epsilon)|} . \quad (20)$$

Obviamente, la representación del error

$$\mathcal{E}_i = \beta |a_i(\mathbf{e}, \epsilon)|$$

verifica que $\mathcal{E} = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{E}_i$ y todas las contribuciones locales tienen el mismo signo de $\mathcal{J}(e)$.

El factor β es menor o igual a uno (en valor absoluto) y es pequeño si la distribución de error $a_i(\mathbf{e}, \epsilon)$ presenta el fenómeno de signos opuestos en sus contribuciones.

Se espera que esta corrección trabaje apropiadamente si el orden de convergencia de los errores locales corregidos permanece constante y puede predecirse. Es decir, si (13) se cumple y α es conocido. Evidencias numéricas demuestran que el valor de β no varía mucho a lo largo del proceso adaptativo y, por consiguiente, la cota a priori (13) también se cumple para la representación corregida. Así, resultará más ventajoso definir el criterio de remallado mediante el uso del factor de corrección, debido a que los valores absolutos no tienen ningún efecto en la malla resultante.

5. CONTROL ADAPTATIVO DEL ERROR

La estrategia más simple para controlar el error de la aproximación mediante una cantidad de interés consiste en un proceso iterativo que implemente todas las técnicas dadas a lo largo de este artículo. Esta estrategia resulta muy general y no requiere información del tipo de problema

a tratar. Los principales pasos que conforman el algoritmo (para la representación del error $\mathcal{J}(e) = \mathcal{R}^P(\epsilon)$) son dados a continuación:

1. Se define la malla inicial sobre la cual se calcula las soluciones primal u_H y dual z_H .
2. Utilizando el suavizado de desplazamiento se estima el error dual: ϵ^*
3. Calcular la distribución espacial del error a partir de $\mathcal{S}_1 := \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(N_i \epsilon^*)$
4. Si $\mathcal{J}(e) \approx \mathcal{S}_1 \leq \text{TOL}$ (tolerancia prescrita), PARAR (fin del proceso).
La solución u_H cumple la precisión requerida.
En caso contrario:
 - a) Calcular los \hat{H}_i para definir la nueva malla de cálculo.
 - b) Calcular el factor de corrección β y modificar la distribución espacial del error obtenida en el paso 3.
 - c) Generar la nueva malla.
5. Definir la malla nueva como la malla inicial e ir al paso 1.

6. EXPERIMENTACIÓN NUMÉRICA

En este apartado se presentan los resultados numéricos obtenidos al aplicar el algoritmo adaptativo propuesto anteriormente. El comportamiento y precisión de las estimas y criterio de remallado se analiza en un caso térmico estacionario (problema sintético). El error estimado en cada iteración del proceso adaptativo es comparado con el que se obtiene al usar las soluciones de referencia u_h y z_h . Estas soluciones de referencia son determinadas por un factor de refinamiento de $h = H/4$ (es decir, cada elemento de la malla H es dividido en 16 nuevos elementos). Al usar soluciones de referencia, la calidad de la estima se mide usando el *índice de efectividad*

$$\mathcal{J}^{\text{eff}} := \frac{\mathcal{S}_i}{\mathcal{J}(e^{\text{ref}})}, \quad \text{con } i = 1, 2.$$

Todos los cálculos, tanto los de las soluciones primal, u_H , y dual, z_H , como los de las soluciones de referencia son hechos usando elementos bilineales ($p = 1$).

Se resuelve (1) para el caso térmico (problema de Poisson) en el dominio $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, con condiciones de contorno $u(x, y) = x$ y un término fuente, f , tal que la solución exacta, dada en la Figura 2 (izquierda), tiene la expresión analítica: $u(x, y) = x(0.6 + e^{-10.5(1-(x-0.5)^2/.25^2-(y-0.5)^2/.25^2)^2})$. La cantidad de interés se define por $\mathcal{J}(u) := \int_{\Omega} u(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)d\Omega$, con $\psi(\mathbf{x}) := \mathcal{C} \exp(-\epsilon^2/(\epsilon^2 - |\mathbf{x}|^2))$ si $|\mathbf{x}| < \epsilon$ y 0 si $|\mathbf{x}| \geq \epsilon$, $\mathbf{x}_0 = (0.5, 0.5)$, $\epsilon = 0.3$ y la constante \mathcal{C} se toma tal que $\int_{\Omega} \psi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)d\Omega = 1$.

El proceso adaptativo se inicia en una malla uniforme de 100 elementos con un error relativo en la cantidad de interés del 200 % ($\mathcal{J}(e^{\text{ref}})/\mathcal{J}(u_h) = 200\%$) y se quiere alcanzar una solución con un error inferior al 0.05 %.

Para comparar la efectividad alcanzada a lo largo del proceso adaptativo, se lleva paralelamente un cálculo en mallas uniformes de 100 (malla inicial), 400, 625, 1600, 2500, 3600, 6400 y 10000 elementos. Para la presentación de los resultados, la solución de referencia utilizada

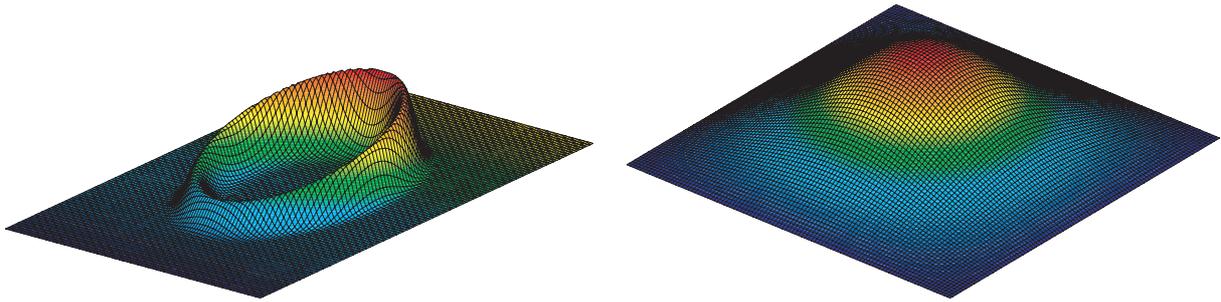


Figura 2: Izquierda: Solución primal u_h . Derecha: Solución dual z_h

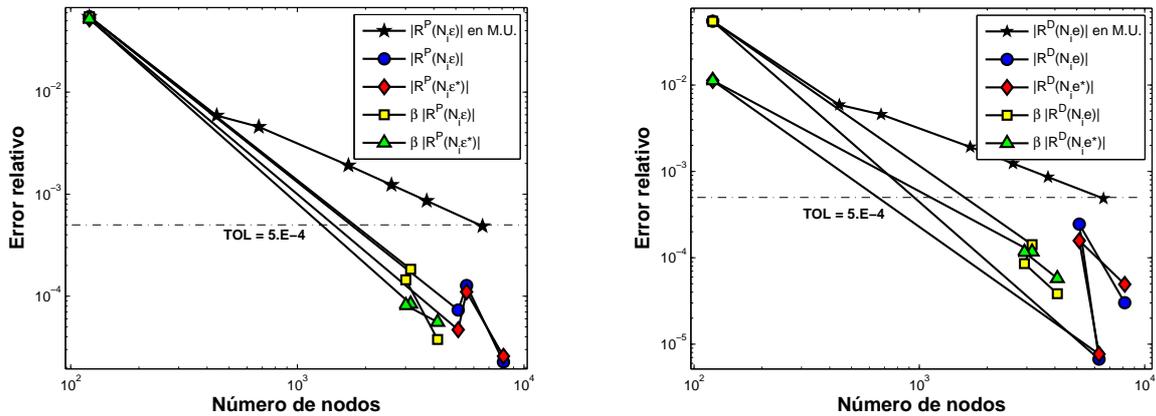


Figura 3: Convergencia del error relativo. \circ y \square referencia, \diamond y \triangle estimado, \star mallas uniformes.

para evaluar el error relativo está dada por la mejor solución (u_h) encontrada en las mallas de referencia.

Los resultados obtenidos del proceso adaptativo se resumen en las figuras 3, 4 y 5. La Figura 3 muestra los errores relativos (estimado y de referencia) alcanzados para las estimas propuestas \mathcal{E}_1 (izquierda) y \mathcal{E}_2 (derecha). Los índices e efectividad son dados en la Figura 4 y la Figura 5 ilustra la sucesión de mallas que se obtienen a lo largo del proceso adaptativo.

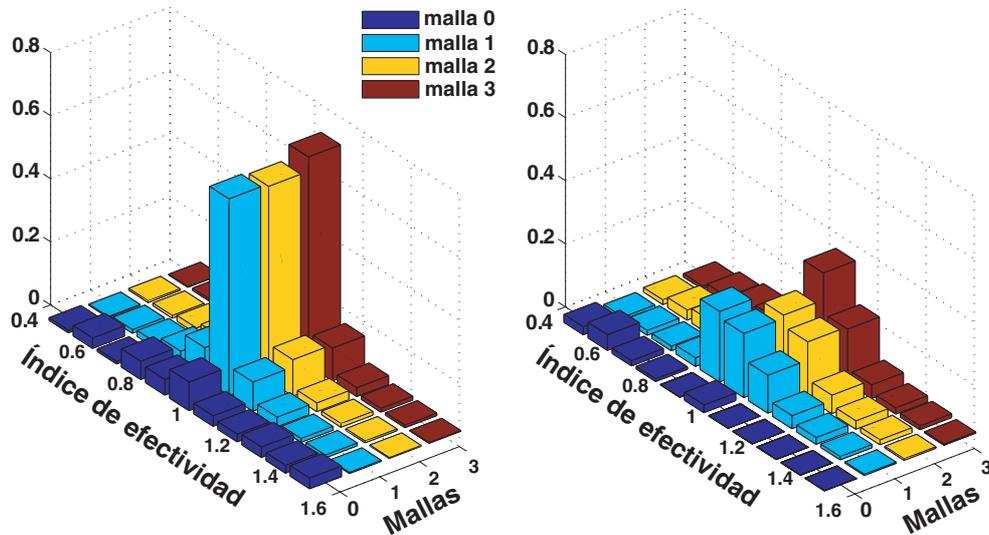


Figura 4: Histogramas para los índices de efectividad normalizados. Estima $\mathcal{E}_1 = \mathcal{R}^P(\epsilon^*)$ (izquierda) y $\mathcal{E}_2 = \mathcal{R}^D(\epsilon^*)$ (derecha).

Los resultados dados en la Figura 3 nos muestra que el criterio de remallado trabaja apropiadamente en las dos estimas propuestas, alcanzando el criterio de aceptabilidad a partir de la primera iteración. La estabilización del error alrededor del 0.1×10^{-4} nos prueba la rápida convergencia que presenta el criterio.

Aunque la estima \mathcal{E}_1 presenta un mejor \mathcal{J}^{eff} que el obtenido por \mathcal{E}_2 (ver Figura 4) se puede concluir que la precisión de las dos estimas es equivalente. Pues, de una a otra, la diferencia en cuanto a número de elementos requeridos por el criterio de remallado es insignificante y en ambos casos el error alcanzado pueden considerarse semejante. Además, la pérdida de efectividad de \mathcal{E}_2 se debe a que la solución del problema primal presenta cambios más rápidos que los que posee la solución del problema dual. Por lo tanto, en la práctica, la selección de la estima a ser aplicada depende de que tan suave sean las soluciones primal y dual.

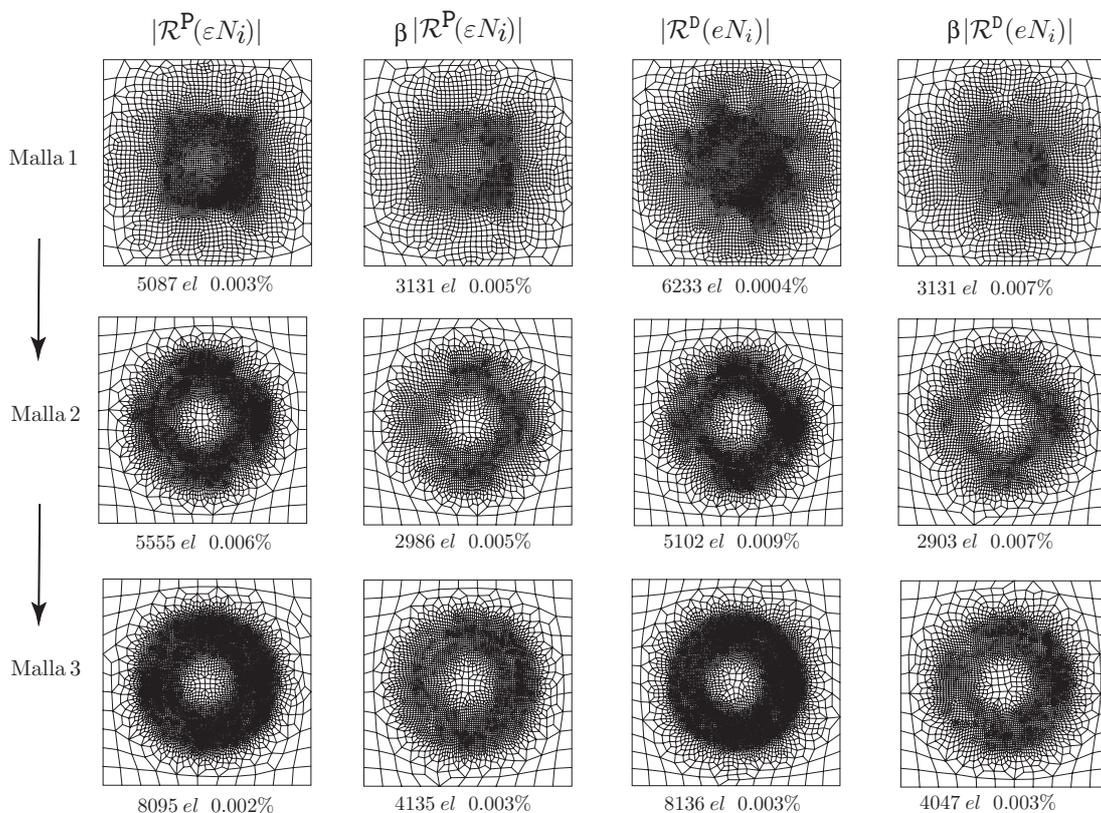


Figura 5: Sucesión de mallas obtenidas en el proceso adaptativo.

Debido al error que se produce al usar la estima resulta apropiado aplicar sólo un porcentaje del factor de corrección, β , para el proceso adaptativo. En los resultados mostrados se ha tomado un β mínimo en 0.5. Aún así los resultados obtenidos son semejantes a los obtenidos por \mathcal{E}_1 y \mathcal{E}_2 pero con un número de elementos significativamente menor en todas las mallas.

REFERENCIAS

- Bangerth R. and Rannacher R. *Adaptive finite element methods for differential equations*. Lecture in Mathematics. Birkhäuser Verlag, 2003.
- Calderón G. and Díez P. Análisis de diferentes estimadores de error de postproceso para adaptatividad orientada al resultado. *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, 22(2):193–213, 2006.
- Díez P. and Calderón G. Remeshing criteria and proper error representations for goal oriented h -adaptivity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:719–733, 2007.

- Li L., J.W. B., Bond T., and Applegarth I. Theoretical formulations for adaptive finite element formulations. *Comm. Numer. Methods Engrg.*, 11:239–249, 1995.
- Oñate E. and Bugeda G. A study of mesh optimality criteria in adaptive finite element analysis. *Engineering Computations*, 10:307–321, 1993.
- Peraire J. *Computing bounds for functional output of exact solutions of partial differential equations*, volume 1 of *Adaptive Modeling and Simulation*. N.E. Wiberg and P. Díez, eds., 2003.
- Páres N., Bonet J., Huerta A., and Peraire J. *Guaranteed bounds for linear output of interest in elasticity*, volume 1 of *Adaptive Modeling and Simulation*. N.E. Wiberg and P. Díez, eds., 2003.
- Prudhomme S. and Oden J. On goal-oriented error estimation for elliptic problems: application to the control of pointwise errors. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 176:313–331, 1999.
- Sarrate J. and Huerta A. Efficient unstructured quadrilateral mesh generation. *ijnme*, 49(10):1327–1350, 2000.
- Wiberg N. and Li X. Superconvergent patch recovery of finite-element and a posteriori l_2 norm error estimate. *Comm. in Numer. Meth. Engrg.*, 10:313–320, 1994.
- Wiberg N., Zeng L., and Li X. Error estimation and adaptivity in elastodynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 101:369–395, 1992.
- Zienkiewicz O. and Zhu J. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24:337–357, 1987.
- Zienkiewicz O. and Zhu J. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. part 1: The recovery technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1331–1365, 1992a.
- Zienkiewicz O. and Zhu J. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. part 2: Error estimates and adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1365–1382, 1992b.