

Análisis de diferentes estimadores de error de postproceso para adaptatividad orientada al resultado

Giovanni Calderón

Laboratori de Càlcul Numèric
Departament de Matemàtica Aplicada III
Universitat Politècnica de Catalunya
Mòdul C2, Jordi Girona 1-3, E-08034 Barcelona, España
e-mail: giovanni.calderon@upc.es, pedro.diez@upc.es
web: <http://www-lacan.upc.es>

Pedro Díez

Departamento de Matemáticas
Facultad de Ciencias
Universidad de Los Andes
La Hechicera, Mérida 5101, Venezuela

Resumen

En las aplicaciones prácticas la resolución numérica de un problema de contorno requiere controlar la calidad de la solución aproximada. Si bien hasta hace no mucho se utilizaba generalmente una medida energética del error, en la actualidad se prefiere que la medida del error esté basada a cantidades de interés que determina el usuario. 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 no es única. En este trabajo se analizan tres representaciones del error combinadas con diferentes estrategias de postproceso. Se utilizan las ideas introducidas por Zienkiewicz y Zhu⁹ para el postproceso de tensiones y por Wiberg¹¹ para desplazamientos. Se presentan estudios de convergencia del error, tanto en problemas térmicos como mecánicos. Además, se discuten aspectos de implementación y metodología y su uso en procesos de mallado adaptativo. noindent

Palabras clave: *estima de error, SPR, cantidades de interés, adaptatividad.*

Summary

Practical numerical solvers for boundary problems require assessing the resulting accuracy. Error was used to be measured using the energy norm but, currently, the error is preferred to be evaluated using quantities of interest defined by the end user. The error representation for these magnitudes requires solving both the original problem (primal) and an adjoint problem (dual) associated with the quantity of interest, that have to be combined. The representation of the error, i.e. the way of combining them, is not unique. Here, three error representations are analyzed combined with different recovery procedures. The ideas introduced by Zienkiewicz and Zhu⁹ for stress recovery and by Wiberg¹¹ for displacements are used. The numerical tests analyze the performance of the proposed methodologies both in thermal and mechanical problems. Implementation aspects are also discussed, especially in the framework of adaptive remeshing processes.

Keywords: *error estimation, recovery, quantities of interest, adaptivity.*

INTRODUCCIÓN

En muchas aplicaciones de la mecánica computacional el objetivo del cálculo es obtener ciertas cantidades específicas de la solución y no la solución global. Estas cantidades, en general, son de interés en el campo de la física o la ingeniería: por ejemplo, desplazamientos o tensiones en ciertas zonas. Desde el punto de vista matemático nos restringiremos a cantidades, que estén caracterizadas por funcionales lineales $J(\mathbf{u})$ de la solución \mathbf{u} .

La representación del error viene dada por una combinación de la solución primal y de una función de influencia, que es la solución de un problema adjunto (dual) al problema primal. En este problema adjunto, el funcional lineal $J(\cdot)$ aparece en el lado derecho de la ecuación débil y desempeña el papel de una carga externa. Esta función de influencia explica, cómo el residuo en el problema primal influye sobre el error en la cantidad de interés. La combinación de estimas de error en norma energética para los problemas primal y dual permite estimar cotas del error en la cantidad de interés¹⁻⁵.

Para estimar el error en norma energética 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 Rheinboldt⁶. La otra alternativa está basada en los estimadores por postproceso o suavizado (recovery), que tienen su origen en el estimador de Zienkiewicz y Zhu⁷. En este trabajo se analiza el uso de estimadores de postproceso en el ámbito de la estima de cantidades de interés.

Los estimadores por postproceso clásicos se basan en estima de tensiones. Debido a que la representación del error en la cantidad de interés está dada por el producto energético de los errores primal y dual (que se denotará por $B(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon})$), una doble estima de tensiones es necesaria para su evaluación. Sin embargo, a partir del residuo (débil) del problema primal aplicado al error en el dual (que será denotado por $\mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon})$) (análogamente para el residuo del problema dual y el error del primal $\mathcal{R}^D(\mathbf{e})$), se obtiene una representación del error, que sólo requiere de una estima “implícita”. En estos casos se deben estimar desplazamientos en lugar de tensiones.

Las distribuciones locales del error asociadas a las representaciones del error $\mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon})$ y $\mathcal{R}^D(\mathbf{e})$ se expresan a través de los nodos de discretización. Este hecho simplifica el cálculo y la implementación, ya que no presenta el salto de flujos de la solución aproximada en la frontera de los elementos, los cuales sí están presentes en la representación mediante el residuo fuerte⁸.

En este artículo se analizan las tres representaciones del error dadas anteriormente. La estima de tensiones se hace a través del postproceso SPR (Superconvergent Patch Recovery) introducido por Zienkiewicz y Zhu^{9,10}. Para el postproceso de desplazamientos se siguen las ideas dadas por Wiberg y colaboradores^{11,12}.

El resto del artículo se estructura de la siguiente manera. En el primer apartado se introduce el problema modelo, el problema dual y la notación necesaria. En el siguiente se derivan las representaciones del error a ser analizadas y se introduce la representación residual nodal del error. Posteriormente se plantean los estimadores, que se van a utilizar y se discuten aspectos prácticos de su implementación. Finalmente se presentan los ejemplos numéricos tanto para problemas térmicos como mecánicos y las conclusiones más relevantes.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Problema modelo

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \geq 1$ un dominio abierto con frontera $\partial\Omega$ dividida en dos partes disjuntas Γ_N y Γ_D tal que $\bar{\Gamma}_N \cup \bar{\Gamma}_D = \partial\Omega$, $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$ y Γ_D , la porción del contorno, donde los desplazamientos son prescritos, es tal que se garantiza, que se coartan los movimientos del sólido rígido. El dominio Ω está ocupado por un material elástico lineal en equilibrio

estático bajo la acción del campo de fuerzas másicas y de superficie prescritas en el cuerpo. El modelo matemático que rige el problema viene dado por la ecuación de equilibrio y condiciones de contorno

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

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \quad \text{en } \Gamma_N \quad (1b)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{en } \Gamma_D \quad (1c)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})$ representa el tensor de tensiones asociado al vector de desplazamientos \mathbf{u} , \mathbf{f} denota el campo de fuerzas volumétricas y \mathbf{t} y $\bar{\mathbf{u}}$ son la tracción y los desplazamientos prescritos a lo largo de Γ_N y Γ_D , respectivamente. Para facilitar la presentación, en [11, 12] se asume que $\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$ sin pérdida de generalidad, ya que las condiciones de contorno no homogéneas pueden siempre ser incluidas con una redefinición apropiada de las cargas.

El espacio de desplazamientos admisible \mathbf{V} se define como

$$\mathbf{V} := \{\mathbf{u} \in [\mathbf{H}^1(\Omega)]^d : \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{en } \Gamma_D\}$$

Para calcular una solución aproximada del problema definido en (1), usando el método de elementos finitos (MEF), es necesario establecer su formulación variacional: encontrar $\mathbf{u} \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = L(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad (2)$$

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

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot D^{-1} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}) d\Omega, \quad L(\mathbf{v}) := \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} ds \quad (3)$$

y D es el tensor de Hooke.

El problema (2) se aproxima con el MEF; se utiliza una discretización asociada a una partición de Ω , en elementos Ω_k , $k = 1, \dots, n_{\text{elem}}$ tal que $\bar{\Omega} = \bigcup_k \bar{\Omega}_k$ y $\Omega_k \cap \Omega_j = \emptyset$ para $k \neq j$. La partición induce el espacio funcional finito $\mathbf{V}_H \subset \mathbf{V}$ de funciones polinómicas a trozos dentro de cada elemento Ω_k . Entonces, la aproximación por EF de \mathbf{u} es $\mathbf{u}_H \in \mathbf{V}_H$ tal que

$$B(\mathbf{u}_H, \mathbf{v}) = L(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_H \quad (4)$$

Ecuación del error y error de referencia

El error numérico en la aproximación \mathbf{u}_H de \mathbf{u} es la función $\mathbf{e} \in \mathbf{V}$ tal que $\mathbf{e} := \mathbf{u} - \mathbf{u}_H$. Al substituir \mathbf{u} por $\mathbf{u}_H + \mathbf{e}$ en (2), resulta la ecuación del error

$$B(\mathbf{e}, \mathbf{v}) = \mathcal{R}^P(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad (5)$$

donde $\mathcal{R}^P(\cdot)$ es el *residuo débil* asociado a la solución aproximada \mathbf{u}_H dado por

$$\mathcal{R}^P(\mathbf{v}) = L(\mathbf{v}) - B(\mathbf{u}_H, \mathbf{v}) \quad (6)$$

Éste puede interpretarse como el término fuente de error. Además se tiene que $\mathcal{R}^P(\mathbf{v}) = 0$, $\forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_H$ (6); este resultado se conoce como *ortogonalidad de Galerkin*.

Desde un punto de vista práctico a menudo en el desempeño de los estimadores de error se usa una solución de referencia. Esto es una aproximación \mathbf{u}_h mucho más cercana a \mathbf{u} que la solución aproximada \mathbf{u}_H . En este trabajo se utiliza una solución de referencia \mathbf{u}_h asociada a una malla refinada uniformemente a partir de la malla original y caracterizada

por un tamaño de elemento h ; se asume que $h \ll H$. El espacio de interpolación asociado a la malla de referencia \mathbf{V}_h incluye al espacio \mathbf{V}_H ($\mathbf{V}_H \subset \mathbf{V}_h$), ya que la malla de referencia se construye refinando la malla original. Por lo tanto, la solución aproximada \mathbf{u}_H se puede representar también en la base de funciones de interpolación, que genera el espacio de referencia \mathbf{V}_h . El error de referencia $\mathbf{e}^{\text{ref}} := \mathbf{u}_h - \mathbf{u}_H$ es la proyección del error exacto en el espacio de referencia, esto es, $\mathbf{e}^{\text{ref}} \in \mathbf{V}_h$ es la solución de la ecuación discreta correspondiente a (5)

$$B(\mathbf{e}^{\text{ref}}, \mathbf{v}) = \mathcal{R}^P(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_h \quad (7)$$

Cantidad de interés y problema dual

Sea $J(\cdot)$ un funcional lineal tal que el objetivo, que se desea alcanzar, es controlar el error al evaluar $J(\mathbf{u})$. La precisión de $J(\mathbf{u}_H)$ puede ser estimada en términos del error $J(\mathbf{e}) = J(\mathbf{u}) - J(\mathbf{u}_H)$. Idealmente, para evaluar $J(\mathbf{e})$ se debería calcular \mathbf{e} usando (5) y luego obtener $J(\mathbf{e})$. Sin embargo, el problema (5) aún en su versión discreta (7) resulta inabordable o demasiado costoso. Otra alternativa consiste en relacionar $J(\mathbf{e})$ con el residuo $\mathcal{R}^P(\cdot)$ sin tener que computar el error \mathbf{e} . Es decir, obtener $\mathbf{z} \in \mathbf{V}$ tal que $J(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^P(\mathbf{z})$. Así se introduce el *problema dual* (o adjunto) como un problema auxiliar para estimar el error en la cantidad de interés: encontrar $\mathbf{z} \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(\mathbf{v}, \mathbf{z}) = J(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad (8)$$

En lo que sigue, se verá que \mathbf{z} indica, cómo el residuo afecta la cantidad $J(\mathbf{e})$. Por otra parte, si \mathbf{z} pudiese ser calculado exactamente, se podría determinar $J(\mathbf{u})$ directamente a partir de los datos, ya que usando (2) y (8) se tiene

$$J(\mathbf{u}) = B(\mathbf{u}, \mathbf{z}) = L(\mathbf{z})$$

Desafortunadamente, el problema dual (8) presenta las mismas dificultades de resolución que el problema primal (2) y para calcular $J(\mathbf{u})$ se requiere obtener \mathbf{z} con la misma precisión que \mathbf{u} . Por lo tanto es necesario introducir la solución aproximada $\mathbf{z}_H \in \mathbf{V}_H$ que satisface

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

El error asociado a \mathbf{z}_H se denota por $\boldsymbol{\epsilon} := \mathbf{z} - \mathbf{z}_H$ y es la solución de

$$B(\mathbf{v}, \boldsymbol{\epsilon}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad (10)$$

donde el funcional lineal \mathcal{R}^D es el residuo del problema dual y viene dado por

$$\mathcal{R}^D(\mathbf{v}) = J(\mathbf{v}) - B(\mathbf{v}, \mathbf{z}_H). \quad (11)$$

Finalmente, el error de referencia en el problema dual $\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} := \mathbf{z}_h - \mathbf{z}_H$ es la solución del problema discreto

$$B(\mathbf{v}, \boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_h \quad (12)$$

En este trabajo la cantidad de interés se restringe a funcionales lineales de la forma

$$J(\mathbf{u}) = (\mathbf{j}, \mathbf{u}) \quad (13)$$

donde (\cdot, \cdot) representa el producto interno usual en $[\mathbf{L}_2(\Omega)]^d$ y la función $\mathbf{j} \in [\mathbf{L}_2(\Omega)]^d$ es la representación de Riesz de $J(\cdot)$. Así la forma fuerte del problema dual (8) es

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) = \mathbf{j} \quad \text{en} \quad \Omega \quad (14a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{en} \quad \Gamma_N \quad (14b)$$

$$\mathbf{z} = \mathbf{0} \quad \text{en} \quad \Gamma_D \quad (14c)$$

En los ejemplos numéricos, que se presentan más adelante, se escoge $J(\cdot)$ que represente el valor (desplazamiento / temperatura) de la solución en un punto dado del dominio Ω . El funcional lineal correspondiente a una combinación lineal de las componentes de \mathbf{u} en el punto \mathbf{x}_0 queda dado por

$$J(\mathbf{u}) = \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) = (\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\mathbf{q}, \mathbf{u}(\mathbf{x}))$$

donde \mathbf{q} contiene los coeficientes de la combinación lineal, es decir, $\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)\mathbf{q}$. Para que la solución del problema dual no presente singularidades se suaviza la función \mathbf{j} . Esto significa que en vez del valor de \mathbf{u} en \mathbf{x}_0 , $J(\mathbf{u})$ representa un promedio local de la solución alrededor de \mathbf{x}_0

$$J(\mathbf{u}) := \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) W_{\varepsilon}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) d\Omega \quad (15)$$

Al eliminar las singularidades se palián algunos problemas de convergencia en el proceso adaptativo y se obtienen mejores efectividades.

La función de ponderación W_{ε} depende del parámetro ε , que representa el radio del volumen de promediado. Es común seleccionar W_{ε} de la forma

$$W_{\varepsilon}(\mathbf{x}) := \begin{cases} C \exp(-\varepsilon^2/(\varepsilon^2 - |\mathbf{x}|^2)) & \text{si } |\mathbf{x}| < \varepsilon \\ 0 & \text{si } |\mathbf{x}| \geq \varepsilon \end{cases}$$

donde la constante C , que depende de ε y \mathbf{x}_0 , se toma tal que

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

En la práctica el valor de ε varía según el problema. A menudo ε se escoge del orden del tamaño de elemento H de la primera malla del proceso adaptativo.

REPRESENTACIÓN DEL ERROR

Representación global

Teorema 1. Sean $\mathbf{u}_H, \mathbf{z}_H$ aproximaciones en \mathbf{V}_H de los problemas primal y dual (soluciones de (4) y (9)). Entonces el error en la cantidad de interés asociado a estas soluciones, $J(\mathbf{e})$, se puede representar de las siguientes formas

$$J(\mathbf{e}) = B(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) \quad (16a)$$

$$= \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon}) \quad (16b)$$

$$= \mathcal{R}^D(\mathbf{e}) \quad (16c)$$

donde \mathcal{R}^P y \mathcal{R}^D representan los residuos del problema primal y dual dados por (6) y (11) respectivamente.

Demostración: De la ortogonalidad de Galerkin se deduce que

$$B(\mathbf{e}, \mathbf{z}_H) = \mathcal{R}^P(\mathbf{z}_H) = 0 \quad (17)$$

Por otro lado, \mathbf{v} puede ser reemplazada por \mathbf{e} en (8), pues $\mathbf{e} \in \mathbf{V}$, así

$$J(\mathbf{e}) = B(\mathbf{e}, \mathbf{z}) \quad (18)$$

Combinando (17) y (18), se tiene $J(\mathbf{e}) = B(\mathbf{e}, \mathbf{z}) - B(\mathbf{e}, \mathbf{z}_H) = B(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon})$.

La solución \mathbf{z} del problema dual (8) permite representar el error en la cantidad de interés usando el residuo primal: dado que $\mathbf{z} \in \mathbf{V}$, se puede reemplazar \mathbf{v} por \mathbf{z} en (5), esto es

$$B(\mathbf{e}, \mathbf{z}) = \mathcal{R}^P(\mathbf{z}) \quad (19)$$

Usando (18) y (19) junto a la propiedad de ortogonalidad dada en (17), se obtiene la igualdad (16b).

A partir de (16a) y (10), se obtiene $J(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{e})$, lo cual termina la prueba. ■

La representación (16a) es estándar y se ha utilizado profusamente, ya que permite estimar $J(\mathbf{e})$ a partir de estimas de \mathbf{e} y $\boldsymbol{\epsilon}$, que tengan un buen comportamiento desde el punto de vista *energético*. Es decir, se estima el error en el primal y el dual, se introducen las estimas en (16a) y se obtiene una estima de $J(\mathbf{e})$. Sin embargo, las representaciones (16b) y (16c) tienen la ventaja, de que requieren estimar el error en sólo uno de los dos problemas, luego el cálculo del residuo es explícito en el problema, en el que no se ha estimado. Los inconvenientes que surgen al utilizar (16b) y (16c) son dos:

- no basta haber estimado el flujo de \mathbf{e} o de $\boldsymbol{\epsilon}$: no basta con tener el error *en tensiones*; es necesario contar con una aproximación de los errores *en desplazamientos*
- la distribución espacial del error asociada a estas representaciones no es estándar.

En el apartado siguiente veremos, que la distribución espacial natural, que se asocia a las representaciones (16b) y (16c) es incluso más adecuada para procesos adaptativos. Más adelante veremos, que estimar el error *en desplazamientos* con la precisión adecuada no representa tampoco una dificultad insalvable.

Distribución espacial del error

Como ya se ha dicho, el objetivo es controlar la calidad numérica de \mathbf{u}_H mediante el funcional lineal $J(\cdot)$, que representa la cantidad de interés. Este control puede lograrse mediante la adaptabilidad de la malla para aproximar eficientemente esta cantidad. Además, en un proceso de adaptación es necesario disponer de una distribución local del error en todo el dominio Ω . Por ejemplo, restringiendo los operadores integrales a cada elemento Ω_k , las representaciones (16a) y (16b) quedan dadas por

$$J(\mathbf{e}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} \mathcal{R}_k^P(\boldsymbol{\epsilon}) \quad (20)$$

donde $B_k(\cdot, \cdot)$ representa la restricción de $B(\cdot, \cdot)$ y $\mathcal{R}_k^P(\boldsymbol{\epsilon})$ la restricción del residuo al elemento Ω_k de la malla. Si bien (16a) y (16b) son representaciones equivalentes desde el punto de vista global, las distribuciones espaciales del error, que se infieren de (20) son distintas, es decir, $B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) \neq \mathcal{R}_k^P(\boldsymbol{\epsilon})$. De hecho se tiene que

$$\mathcal{R}_k^P(\boldsymbol{\epsilon}) = B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) + \int_{\partial\Omega_k} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \boldsymbol{\epsilon} d\Gamma \quad (21)$$

De forma análoga la representación (16c) define otra distribución espacial distinta.

Como queda reflejado en (21), la distribución local, elemento a elemento, que proporcionan los valores de $\mathcal{R}_k^P(\boldsymbol{\epsilon})$ no es, a diferencia de la asociada a $B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon})$, una medida local del error fácilmente interpretable.

En consecuencia, para obtener distribuciones de error a partir de las representaciones globales (16b) y (16c) es necesario seguir una estrategia distinta a restringir los operadores

integrales al elemento en cuestión. Para ello se utiliza la propiedad de *partición de la unidad*, que verifican las funciones N_i , $i = 1 \dots n_{\text{poin}}$, base del espacio de aproximación \mathbf{V}_H , es decir,

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} N_i(\mathbf{x}) = 1, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (22)$$

El soporte de cada N_i se denota ω_i , se denomina *estrella* y es el *patch* de elementos conectados al nodo i de la malla (Figura 1 para la representación de N_i y ω_i en 2D).

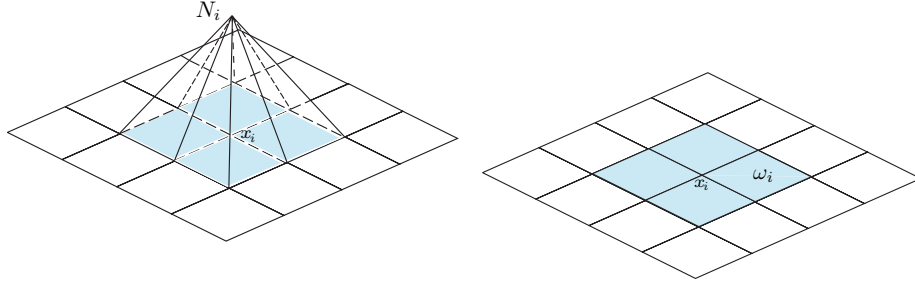


Figura 1. Representación de la función N_i y su soporte ω_i en una malla de cuadriláteros

Usando la propiedad (22) y la linealidad de $\mathcal{R}^P(\cdot)$, se tiene que

$$J(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^P\left(\boldsymbol{\epsilon} \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} N_i\right) = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon}) \quad (23)$$

donde cada contribución $\mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon})$ se asocia al dominio ω_i y se puede calcular fácilmente, una vez se conoce $\boldsymbol{\epsilon}$:

$$\mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon}) = \int_{\omega_i} \mathbf{f} \cdot N_i \boldsymbol{\epsilon} \, d\Omega - \int_{\omega_i} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_H) \cdot D^{-1} \boldsymbol{\sigma}(N_i \boldsymbol{\epsilon}) \, d\Omega \quad (24)$$

La contribución $\mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon})$ al error $J(\mathbf{e})$ está de esta manera asociada al nodo \mathbf{x}_i , no al elemento Ω_k . Esto es poco habitual, pero presenta ventajas en los procesos de remallado, donde la información, que requieren los malladores automáticos, se expresa preferentemente en los nodos.

De forma análoga se establece una distribución espacial asociada a la representación (16c)

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

que se puede determinar, una vez se conoce o se ha estimado el error del problema primal \mathbf{e} .

Así las representaciones del error (16) inducen las siguientes representaciones de la distribución espacial del error

$$J(\mathbf{e}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) \quad (25a)$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\epsilon}) \quad (25b)$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^D(N_i \mathbf{e}) \quad (25c)$$

Los mismos resultados siguen siendo válidos, si las soluciones exactas \mathbf{u} y \mathbf{z} se sustituyen por soluciones *de referencia* asociadas a una malla mucho más rica, ya sea refinando el tamaño de elemento (como en los ejemplos que se muestran en este trabajo) o aumentando el grado del polinomio interpolador en cada elemento.

Aspectos computacionales

En las representaciones discretas del error de (25b) y (25c) las funciones $N_i \mathbf{e}^{\text{ref}}$ y $N_i \boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}$ no pertenecen al espacio de referencia \mathbf{V}_h . Esto hace que el cálculo de las contribuciones locales al error sea más complicado y que, por ejemplo, requiera cuadraturas de orden mayor. Sin embargo, estas funciones pueden sustituirse por sus proyecciones sobre \mathbf{V}_h . Efectivamente, por ejemplo, para el caso (25b) se tiene

$$\begin{aligned} J(\mathbf{e}^{\text{ref}}) = \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}) &= \mathcal{R}^P(\Pi_h \boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}) \\ &= \mathcal{R}^P\left(\Pi_h \left[\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} \sum_{i=1}^{\text{npoint}} N_i \right]\right) \\ &= \sum_{i=1}^{\text{npoint}} \mathcal{R}^P(\Pi_h [\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} N_i]) \end{aligned}$$

debido a que la proyección y la función residuo son lineales. Esta representación no altera el valor global del error. Las contribuciones locales del error se calculan de manera sencilla, aplicando el residuo a cada elemento del espacio de referencia \mathbf{V}_h . Por lo tanto en adelante se utilizará $\mathcal{R}^P(\Pi_h [\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} N_i])$ para definir los valores locales del error en vez de $\mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} N_i)$. Esto permite una simplificación significativa en cuanto a implementación y costo de cálculo de las estimas.

Por otro lado, aunque en principio $\mathcal{R}^P(\Pi_h [\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} N_i]) \neq \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} N_i)$, en la referencia¹³ se prueba, que el comportamiento de las dos contribuciones locales es prácticamente equivalente.

ESTIMA DEL ERROR

Hasta ahora se ha visto, cómo representar el error en la cantidad de interés $J(\mathbf{e})$ a partir de evaluaciones “energéticas” de los errores en el primal \mathbf{e} y en el dual $\boldsymbol{\epsilon}$. Ahora el objetivo es 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 \mathbf{V}_h conlleva un coste 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 . Los procesos de estima a posteriori del error, que se presentan, proporcionan 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 .

Con el fin de facilitar la exposición se utilizará la solución del problema dual para introducir las estimas. Sin embargo, los resultados son equivalentes para la estima de la solución del problema primal.

Se proponen dos estrategias distintas para obtener \mathbf{z}^* (equivalentemente $\boldsymbol{\epsilon}^*$). En ambas \mathbf{z}^* es obtenida por un postproceso simple a partir de \mathbf{z}_H . La primera propuesta está basada en el suavizado *de tensiones* SPR introducido por Zienkiewicz y Zhu^{9,10}. Obviamente, esta opción sólo se puede utilizar para determinar $J(\mathbf{e})$ según la representación del error (16a) y no con (16b) o (16c). En la segunda se define un postproceso de la incógnita \mathbf{z} (*desplazamientos*), siguiendo las ideas introducidas por Wiberg^{11,12}.

Estima usando suavizado de tensiones (SPR)

Las tensiones $\sigma_H = \sigma(z_H)$ son discontinuas elemento a elemento y no se pueden calcular en los nodos ni en la frontera de los elementos de la malla. El suavizado SPR es una técnica, que permite obtener unas tensiones mejoradas σ^* en un espacio similar a \mathbf{V}_H , es decir, interpoladas con las funciones base $N_1, N_2, \dots, N_{n_{\text{poin}}}$ ($\sigma^* := \bar{\sigma}\mathbf{N}$) y que aproximen a las tensiones exactas σ mejor que σ_H . Es decir, el objetivo consiste en remplazar el valor exacto del error $\epsilon_\sigma := \sigma(z) - \sigma_H$ ($\epsilon_\sigma^{\text{ref}} := \sigma_h(z_h) - \sigma_H$) por la aproximación $\epsilon_\sigma^{\text{ref}} := \sigma^* - \sigma_H$, suponiendo que σ^* es mucho más cercano a σ que σ_H .

El suavizado SPR se basa en una aproximación por mínimos cuadrados local del campo de tensiones σ_H . Así para cada nodo de la malla x_i se toma el *patch* de elementos, que lo contienen (el dominio ω_i), y se ajusta un polinomio a los valores de las tensiones calculadas σ_H . Una vez se ha determinado el polinomio, éste se evalúa en x_i y se obtiene así el valor nodal de σ^* .

El ajuste por mínimos cuadrados se puede plantear discreto o continuo. Esto es, se puede muestrear σ_H en un conjunto de puntos, que se suponen *superconvergentes* o bien se toma un producto escalar continuo, que suponga calcular integrales de σ_H , es decir, *muestrear* σ_H en los puntos de integración de la cuadratura (generalmente gaussiana) que se esté empleando.

En cualquiera de los dos casos se debe de asegurar que el ajuste por mínimos cuadrados cuenta con suficiente información, para que la solución sea calculable (obviamente, si existen menos datos, que coeficientes a determinar, el problema es irresoluble). En la Figura 2 se ilustran diversas configuraciones de *patches* y datos que pueden dar problemas y requieren agrandar el *patch* para contar con suficientes datos.

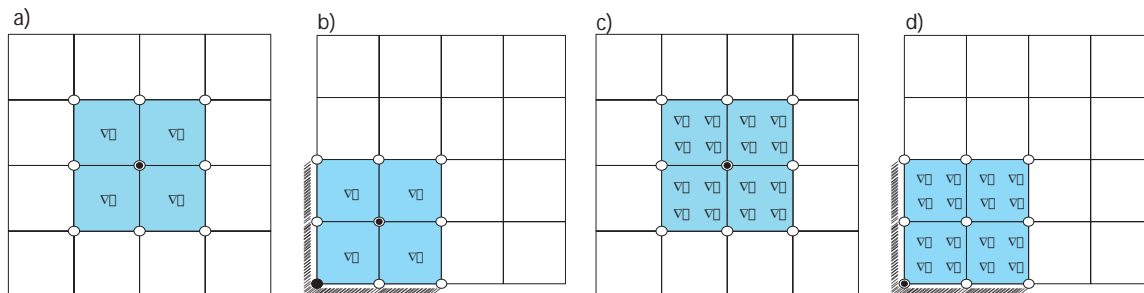


Figura 2. SPR en elementos cuadriláteros bilineales: \circ nodos. En las gráficas a) y b) se ilustra el ajuste discreto a partir de puntos de muestreo *superconvergentes* (∇) que, en el caso b), requieren ampliar el *patch* de uno a cuatro elementos. En las gráficas c) y d) se ilustra el ajuste continuo, que equivale a muestrear en los puntos de Gauss (∇)

En este trabajo se adopta la técnica SPR. Sin embargo, algunas particularidades del suavizado deben ser precisadas:

- Para elementos cuadriláteros lineales se define un polinomio cuadrático completo (la base del polinomio es $\mathbf{P} = [1, x, y, xy, x^2, y^2]$) usando un ajuste por mínimos cuadrados, en el que el producto escalar es continuo (definido por integrales, no por sumas).
- Dado que el criterio de ajuste implica integrales y no sumas y que las integrales se calculan utilizando cuadraturas de Gauss, en la práctica en lugar de los puntos superconvergentes se usan los puntos de Gauss. Por lo tanto para el caso de un *patch*

interno se ajusta el polinomio cuadrático (6 grados de libertad) a los valores de σ_H en los 16 puntos de Gauss (Figura 2c).

- Los *patch* cuyo número de elementos sea menor que cuatro son sustituidos por *patch de elementos grande*. Esto es, además de los elementos, que tienen al nodo como vértice, se toman los elementos que los rodean. La Figura 2d ilustra el *patch* grande en el caso, en que el nodo de ensamblaje está ubicado en una esquina del contorno.

Estima usando suavizado de desplazamientos

La meta es obtener $\mathbf{z}^* \in \mathbf{V}_h$ a partir de \mathbf{z}_H tal que $\mathbf{z}^* \approx \mathbf{z}_h$, es decir, tal que se mejore la calidad 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 $h = H/r$. 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.

El “recovery” de desplazamientos es esencialmente distinto al de tensiones. Las tensiones suavizadas recuperan la continuidad, de la que la solución de EF carece: σ_H se proyecta sobre un espacio como \mathbf{V}_H , al que no pertenece, para obtener σ^* . El caso de los desplazamientos es muy distinto. La solución de EF, \mathbf{z}_H , es continua y lo que se pretende es encontrar \mathbf{z}^* en \mathbf{V}_h más “suave”. Además $\mathbf{V}_H \in \mathbf{V}_h$, con lo que la proyección de \mathbf{z}_H sobre \mathbf{V}_h es precisamente \mathbf{z}_H . 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.

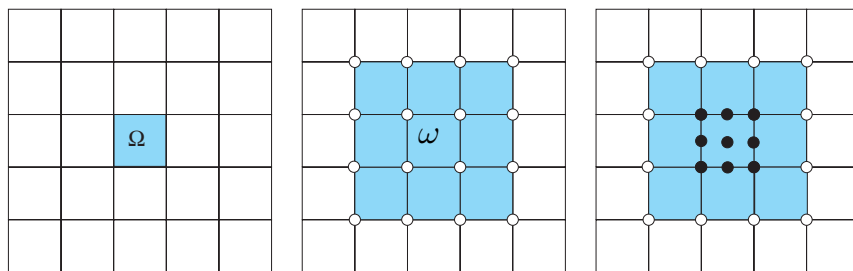


Figura 3. Ilustración del proceso recovery en 2D. Cada elemento de la malla Ω_k (gráfica de la izquierda) es asociado con un *patch* ω_k (sombreado en la gráfica del centro) y los nodos correspondientes de la malla H (marcados con \circ). Un polinomio es ajustado a los valores de los nodos- \circ usando 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)

Todo elemento Ω_k de la malla generada por \mathbf{V}_H tiene asociado un *patch* de elementos ω_k formado por todos los elementos que lo rodean (Figura 3). 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 3) 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 3). Es decir,

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

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

Los polinomios de cada componente de \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{z}_H en el *patch* ω_k . Así para cada componente de \mathbf{z}^s se minimiza el funcional

$$\begin{aligned} F(\mathbf{a}_\alpha) &= \int_{\omega_k} ([\mathbf{z}_H]_\alpha - z_\alpha^s)^2 d\Omega \\ &= \int_{\omega_k} ([\mathbf{z}_H]_\alpha - \mathbf{P}\mathbf{a}_\alpha)^2 d\Omega \end{aligned}$$

donde $[\mathbf{z}_H]_\alpha$ representa los valores de \mathbf{z}_H en la coordenada α ($\alpha = x, y$). Obsérvese, que $[\mathbf{z}_H]_\alpha$ 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

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

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 \mathbf{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 \mathbf{z}_H en ω_k permite evaluar los *patches* 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

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

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 muevan entre -1 y 1 .

Dado que las tensiones son *derivadas* de los desplazamientos, a primera vista sería necesario utilizar polinomios de un grado superior en el ajuste de los desplazamientos. Sin embargo, existen dos razones, por las que se ha propuesto utilizar en ambos casos, tanto

para tensiones como para desplazamientos, polinomios cuadráticos. En primer lugar, lo que importa es que los desplazamientos suavizados puedan incorporar información sobre la curvatura local de la solución, para lo cual basta utilizar grado 2; posteriormente se interpola la función enriquecida en una malla más fina y se pierde la suavidad cualquiera que sea el grado del polinomio utilizado. En segundo lugar, utilizar polinomios de grado 3 requiere determinar un número mayor de grados de libertad (en 2D, 10 por cada componente, en vez de 6) y conlleva la necesidad de disponer de más información para hacer el ajuste por mínimos cuadrados. Esto conduce a tener que variar la definición de los *patch* es aumentando su tamaño.

Estimadores propuestos

Utilizando el método SPR, se aproxima el error en tensiones (o flujos) del problema primal y del problema dual. Esto es, se suaviza $\sigma(\mathbf{u}_H)$ y $\sigma(\mathbf{z}_H)$ para obtener σ_u^* y σ_z^* y así calcular $\sigma_e^* = \sigma_u^* - \sigma(\mathbf{u}_H)$ y $\sigma_\epsilon^* = \sigma_z^* - \sigma(\mathbf{z}_H)$ que son aproximaciones a σ_e y σ_ϵ , respectivamente. Además, utilizando el suavizado de desplazamientos, se obtienen \mathbf{u}^* y \mathbf{z}^* , que permiten obtener una aproximación de los errores en desplazamientos $\mathbf{e}^* = \mathbf{u}^* - \mathbf{u}_H$ y $\boldsymbol{\epsilon}^* = \mathbf{z}^* - \mathbf{z}_H$.

Combinando estas aproximaciones en las representaciones del error (16), se obtienen cuatro estimadores

$$E_1 := \int_{\Omega} \sigma_e^* \cdot D^{-1} \sigma_\epsilon^* d\Omega \quad (26a)$$

$$E_2 := B(\mathbf{e}^*, \boldsymbol{\epsilon}^*) \quad (26b)$$

$$E_3 := \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\epsilon}^*) \quad (26c)$$

$$E_4 := \mathcal{R}^D(\mathbf{e}^*) \quad (26d)$$

Obsérvese, que E_1 y E_2 corresponden a la representación (16a), el primero asociado a la estima con SPR y el segundo al suavizado de desplazamientos.

Según se ha mencionado, las distribuciones espaciales, que corresponden a E_1 y E_2 , estarán asociadas a elementos, mientras que las de E_3 y E_4 estarán asociadas a nodos.

Nótese también, que E_1 y E_2 requieren postprocesar las dos soluciones (primal y dual), mientras que E_3 y E_4 requieren sólo un postproceso (en uno de los problemas) y la evaluación explícita del residuo en el otro problema.

Análisis del estimador por postproceso de desplazamientos

Dado que \mathbf{e}^* y $\boldsymbol{\epsilon}^*$ pertenecen a \mathbf{V}_h (espacio de referencia), el objetivo del postproceso es conseguir, que \mathbf{e}^* y $\boldsymbol{\epsilon}^*$ aproximen lo mejor posible a \mathbf{e}^{ref} y $\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}$ (errores de referencia). Obviamente esto equivale a decir, que \mathbf{u}^* y \mathbf{z}^* sean buenas aproximaciones de \mathbf{u}_h y \mathbf{z}_h .

Sin embargo, el postproceso de desplazamientos es capaz de mejorar la *curvatura* de la solución aproximada, pero no los valores de los desplazamientos. Es decir, la solución suavizada \mathbf{u}^* mejora en sus derivadas (se parecen más a las de \mathbf{u}_h , pero no en los valores sin derivar).

De todos modos, si se definen las funciones w_1 y w_2 en \mathbf{V}_H

$$w_1 := \Pi_H \mathbf{u}_h - \mathbf{u}_H \quad \text{y} \quad w_2 := \Pi_H \mathbf{z}_h - \mathbf{z}_H$$

se puede suponer que

$$\mathbf{u}_h \approx \mathbf{u}^* + w_1 \quad \text{y} \quad \mathbf{z}_h \approx \mathbf{z}^* + w_2$$

es decir, los errores estimados, primal y dual, pueden expresarse como

$$\mathbf{e}^* = \mathbf{u}^* - \mathbf{u}_H \approx \mathbf{e}^{\text{ref}} - w_1 \quad \text{y} \quad \boldsymbol{\epsilon}^* = \mathbf{z}^* - \mathbf{z}_H \approx \boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}} - w_2$$

Debido a la ortogonalidad de Galerkin, alterar la estima del error añadiendo funciones de \mathbf{V}_H no altera el resultado para los estimadores E_3 y E_4 . Sin embargo, para el estimador E_2 (que también utiliza el postproceso de desplazamientos), esta alteración es significativa. En efecto

$$E_2 = B(\mathbf{e}^*, \boldsymbol{\epsilon}^*) \approx B(\mathbf{e}^{\text{ref}}, \boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}) + B(w_1, w_2) - \underbrace{(B(\mathbf{e}^{\text{ref}}, w_2) + B(w_1, \boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}))}_{=0}$$

Obviamente, el término $B(w_1, w_2)$ no tiene por qué ser pequeño y puede que, especialmente cuando las mallas sea groseras, deteriore la calidad del estimador E_2 . Esto es así, ya que w_1 y w_2 son funciones en principio arbitrarias de \mathbf{V}_H , pero que tenderán a ser nulas si H tiende a cero.

EXPERIMENTACIÓN NUMÉRICA

En esta sección se presentan los resultados numéricos obtenidos al aplicar las estimas propuestas a las representaciones del error dadas en (16). El comportamiento y precisión de las estimas se analiza en dos problemas típicos: el primero presenta un caso térmico sintético, mientras el segundo ejemplo es un problema mecánico, que simula el comportamiento de una presa de gravedad y que fue usado por Zienkiewicz y Zhu⁷, y por diversos autores en trabajos posteriores. Aunque para el primer ejemplo la solución exacta se conoce, el análisis se hace respecto de la solución de referencia \mathbf{u}_h . Así la calidad de la estima se mide usando el *índice de efectividad*

$$I^{\text{eff}} := \frac{\Phi}{J(\mathbf{e}^{\text{ref}})}$$

donde Φ puede tomar los valores E_1 , E_2 , E_3 y E_4 .

La calidad local de la estima se mide usando el *índice de efectividad local* $I_k^{\text{eff}} = \Phi_k / J_k$, donde Φ_k y J_k representan las contribuciones a Φ y J del elemento Ω_k (para E_1 y E_2) o del nodo k (para E_3 y E_4). Localmente $J(\mathbf{e}^{\text{ref}})$ es sustituida por la representación del error, que esté estimando Φ , evaluada en los errores de referencia. Tanto I_k^{eff} como su representación global I^{eff} proporcionan información de la precisión de la estima y el signo del error. Se introduce además el índice $I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$, que se define por

$$I_{\text{abs}}^{\text{eff}} := \frac{\sum_k |\Phi_k|}{\sum_k |J_k|}$$

La cantidad $I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$ da una idea del efecto de los cambios de signo en los valores locales del error. Obviamente, si todas las contribuciones locales tienen el mismo signo, I^{eff} e $I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$ son idénticas. En la experimentación numérica se analizan las dos cantidades.

Ejemplo 1: problema térmico

Se resuelve (1) para el caso térmico (donde $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})$ representa un flujo) en el dominio $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, con condiciones de contorno Dirichlet homogéneas en todo el contorno $\partial\Omega$ y un término fuente f seleccionado, tal que la solución exacta, dada en la Figura 4 (izquierda), tiene la siguiente expresión analítica

$$u(x, y) = 100e^{-800(x-0,1)^2(y-0,1)^2} \sin(\pi x) \sin^2(\pi y)$$

La cantidad de interés se define de acuerdo a (15) (para el caso escalar) con $\mathbf{x}_0 = (0, 5, 0, 2)$. La solución del problema dual queda representada en la Figura 4 (derecha). Las soluciones aproximadas \mathbf{u}_H y \mathbf{z}_H son calculadas usando elementos bilineales ($p = 1$) en una secuencia

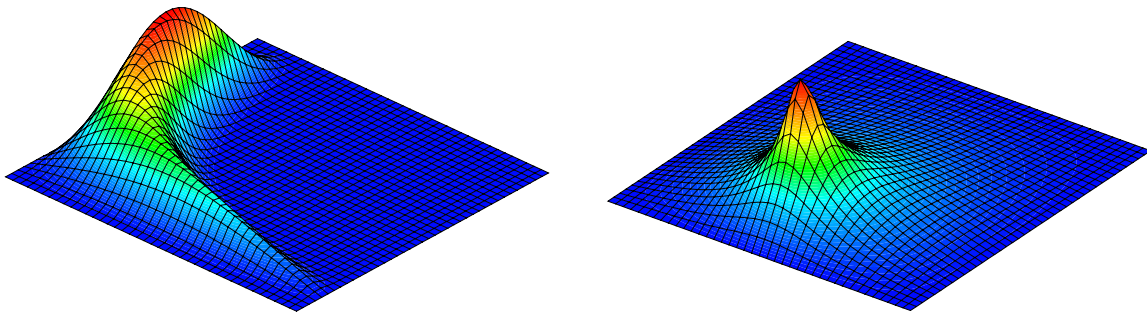


Figura 4. Ejemplo 1: Izquierda: Solución primal \mathbf{u}_h . Derecha: Solución dual \mathbf{z}_h

de mallas uniformes de 400, 625, 1600, 2500, 4489 y 6889 elementos (cuadriláteros lineales). Las soluciones de referencia \mathbf{u}_h y \mathbf{z}_h 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).

Los resultados numéricos para la sucesión de mallas se presentan en las Tablas I y II. En la Tabla I se da el error relativo de referencia $J(\mathbf{e}^{\text{ref}})/J(\mathbf{u}_h)$ y sus distintas estimas E_1 , E_2 , E_3 y E_4 . Mientras en la Tabla II se presentan los porcentajes de efectividad, que logra cada estima en la sucesivas mallas.

Malla	nelem	Error relativo para:				
		$J(\mathbf{e}^{\text{ref}})$	E_1	E_2	E_3	E_4
1	400	$0,146 \times 10^{-1}$	$0,135 \times 10^{-1}$	$0,223 \times 10^{-1}$	$0,204 \times 10^{-1}$	$0,216 \times 10^{-1}$
2	625	$0,749 \times 10^{-2}$	$0,541 \times 10^{-2}$	$0,485 \times 10^{-2}$	$0,879 \times 10^{-2}$	$0,929 \times 10^{-2}$
3	1600	$0,245 \times 10^{-2}$	$0,184 \times 10^{-2}$	$-0,120 \times 10^{-3}$	$0,219 \times 10^{-2}$	$0,225 \times 10^{-2}$
4	2500	$0,131 \times 10^{-2}$	$0,943 \times 10^{-3}$	$-0,399 \times 10^{-3}$	$0,108 \times 10^{-2}$	$0,102 \times 10^{-2}$
5	4489	$0,685 \times 10^{-3}$	$0,567 \times 10^{-3}$	$0,103 \times 10^{-4}$	$0,590 \times 10^{-3}$	$0,597 \times 10^{-3}$
6	6889	$0,402 \times 10^{-3}$	$0,351 \times 10^{-3}$	$0,694 \times 10^{-4}$	$0,355 \times 10^{-3}$	$0,358 \times 10^{-3}$

Cuadro I. Ejemplo 1: Valores del error relativo de referencia y sus estimas

M	nelem	E_1		E_2		E_3		E_4	
		I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$	I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$	I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$	I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$
1	400	92,1 %	109,1 %	152,4 %	141,6 %	139,9 %	127,1 %	148,0 %	172,4 %
2	625	72,2 %	96,1 %	64,8 %	139,4 %	117,4 %	122,9 %	124,0 %	165,0 %
3	1600	74,9 %	72,6 %	-4,0 %	119,3 %	89,1 %	128,2 %	91,7 %	124,5 %
4	2500	72,1 %	78,0 %	-30,5 %	113,8 %	82,4 %	121,8 %	84,2 %	116,5 %
5	4489	82,7 %	87,7 %	1,5 %	108,2 %	86,2 %	110,7 %	87,2 %	110,1 %
6	6889	87,3 %	94,9 %	17,3 %	108,1 %	88,5 %	108,3 %	89,1 %	106,8 %

Cuadro II. Ejemplo 1: Índices de efectividad del error estimado

Gráficamente estos resultados se muestran en las Figuras 5, 6 y 7. La Figura 5 presenta los índices de efectividad. El error relativo de referencia $B(e^{\text{ref}}, \epsilon^{\text{ref}})$ junto a los errores relativos estimados son presentados en la Figura 6.

Los errores relativos e índices de efectividad para E_1 , E_3 y E_4 presentan el comportamiento esperado; para estos tres casos el orden de convergencia es similar al que se alcanza al usar las soluciones de referencia (Figura 6). Sin embargo, para el caso de E_2 se observa un comportamiento errático en el error relativo e índice de efectividad I^{eff} , tal como se podía prever.

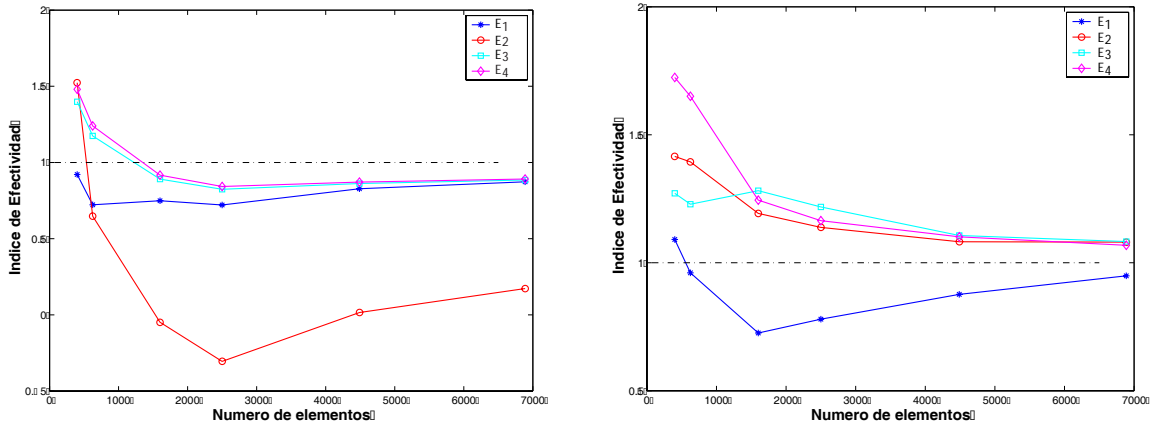


Figura 5. Ejemplo 1: Índices de efectividad: I^{eff} en la gráfica de la izquierda y $I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$ a la derecha

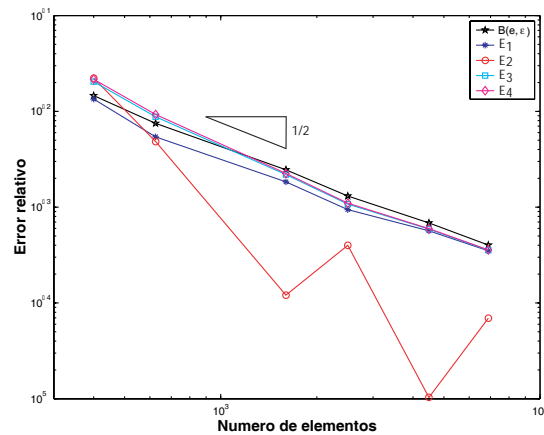


Figura 6. Ejemplo 1: Error relativo de referencia y sus estimas

La Figura 7 ilustra los histogramas, en las mallas 5 y 6, para los índices de efectividad normalizados. El estimador E_3 presenta los mejores resultados al estimar los índices de efectividad local ($I_k^{\text{eff}} \approx 1$), llegando a superar abiertamente las otras opciones. En estos histogramas el porcentaje de error, que queda sin evaluar para el rango entre el 50 % y el 150 %, en ningún caso llegan a superar el 0.01 % del error total a evaluar. Este porcentaje de error se traduce en suprimir entre un 6 % y un 16 % del total de elementos de la malla. En otras palabras, los elementos suprimidos presentan errores locales muy pequeños y, por lo tanto, no son de interés en un proceso adaptativo.

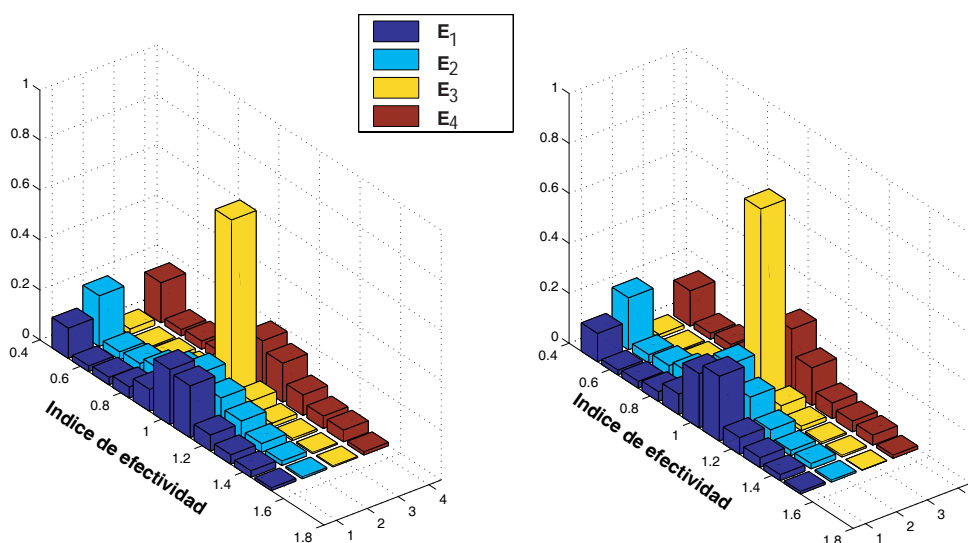


Figura 7. Ejemplo 1: Histograma para los índices de efectividad normalizados en las mallas 5 y 6. Fila 1: E_1 ; Fila 2: E_2 ; Fila 3: E_3 y Fila 4: E_4

Ejemplo 2: problema mecánico elástico (Presa de Zienkiewicz)

Se desea aproximar (1) para el dominio dado en la Figura 8. Las condiciones de contorno impuestas sobre este dominio son:

- ▷ desplazamientos prescrito en A_2 ,
- ▷ desplazamientos prescrito en la dirección x en A_1 y A_3 ,
- ▷ presión hidrostática en C , variando de 0 a 8×10^4 ,
- ▷ presión constante en B con un valor constante de 8×10^4 ,
- ▷ en el resto del contorno se prescriben condiciones de contorno Neumann homogéneas.

Sobre todo el dominio se impone una fuerza por unidad de superficie de valor $-10,0$ en la dirección y . Para el cálculo del problema se fijan los siguientes parámetros materiales: módulo de Young $3,1 \times 10^7$, coeficiente de Poisson 0,25 y densidad del hormigón $2,3 \times 10^3$.

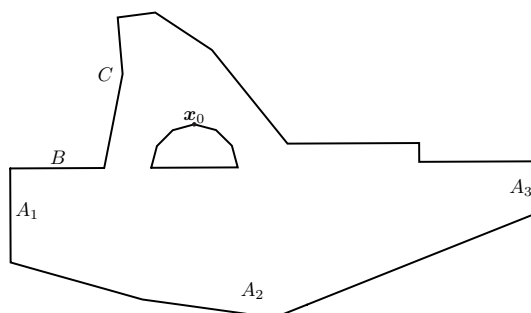


Figura 8. Ejemplo 2: Geometría del dominio

La cantidad de interés viene dada por el desplazamiento en y del punto $x_0 = (9, 8, 2, 3)$ (ubicado en la parte superior del túnel de la presa (Figura 8)). La estima del error se realiza para las soluciones obtenidas en una sucesión de mallas de 247, 344, 628, 923, 1425, 2500, 3608 y 4592 elementos (cuadriláteros lineales), las cuales tienen un tamaño de elemento lo más homogéneo posible. En este ejemplo las soluciones de referencia son calculadas con un factor de refinamiento de $r = 8$.

Malla	nelem	Error relativo para:				
		$J(e^{\text{ref}})$	E_1	E_2	E_3	E_4
1	247	$0,212 \times 10^{-1}$	$0,331 \times 10^{-1}$	$0,409 \times 10^{-1}$	$0,151 \times 10^{-1}$	$0,9426 \times 10^{-2}$
2	344	$0,158 \times 10^{-1}$	$0,275 \times 10^{-1}$	$0,278 \times 10^{-1}$	$0,116 \times 10^{-1}$	$0,874 \times 10^{-2}$
3	628	$0,748 \times 10^{-2}$	$0,155 \times 10^{-1}$	$0,143 \times 10^{-1}$	$0,541 \times 10^{-2}$	$0,298 \times 10^{-2}$
4	923	$0,656 \times 10^{-2}$	$0,122 \times 10^{-1}$	$0,113 \times 10^{-1}$	$0,465 \times 10^{-2}$	$0,336 \times 10^{-2}$
5	1425	$0,480 \times 10^{-2}$	$0,800 \times 10^{-2}$	$0,741 \times 10^{-2}$	$0,317 \times 10^{-2}$	$0,255 \times 10^{-2}$
6	2500	$0,312 \times 10^{-2}$	$0,504 \times 10^{-2}$	$0,516 \times 10^{-2}$	$0,216 \times 10^{-2}$	$0,175 \times 10^{-2}$
7	3608	$0,232 \times 10^{-2}$	$0,361 \times 10^{-2}$	$0,373 \times 10^{-2}$	$0,149 \times 10^{-2}$	$0,117 \times 10^{-2}$
8	4592	$0,205 \times 10^{-2}$	$0,293 \times 10^{-2}$	$0,318 \times 10^{-2}$	$0,134 \times 10^{-2}$	$0,108 \times 10^{-2}$

Cuadro III. Ejemplo 2: Valores del error relativo de referencia y sus estimas

Malla	nelem	E_1		E_2		E_3		E_4	
		I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$	I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$	I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$	I^{eff}	$I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$
1	247	155,9 %	157,1 %	192,7 %	203,9 %	71,3 %	97,5 %	44,4 %	71,8 %
2	344	173,7 %	171,4 %	175,2 %	182,3 %	73,4 %	88,4 %	55,1 %	73,0 %
3	628	206,8 %	160,8 %	191,0 %	163,4 %	72,2 %	93,2 %	39,8 %	75,0 %
4	923	185,3 %	164,0 %	171,7 %	174,1 %	70,7 %	87,9 %	51,1 %	70,5 %
5	1425	166,5 %	146,3 %	154,2 %	149,1 %	66,1 %	85,4 %	53,1 %	70,5 %
6	2500	161,3 %	155,1 %	165,3 %	152,0 %	69,2 %	88,3 %	56,0 %	70,0 %
7	3608	155,7 %	151,0 %	161,0 %	153,2 %	64,4 %	88,0 %	50,2 %	71,4 %
8	4592	142,8 %	140,8 %	155,0 %	146,4 %	65,5 %	86,6 %	52,8 %	71,5 %

Cuadro IV. Ejemplo 2: Índices de efectividad del error estimado

Los resultados numéricos son presentados en las Tablas III y IV. Al igual que antes, la Tabla III muestra los errores relativos estimados junto al error relativo de referencia. Mientras en la Tabla IV se presentan los porcentajes de efectividad que logra cada estima en la sucesivas mallas. Los índice de efectividad de las distintas estimas junto a sus histogramas, para las mallas 7 y 8, quedan dados por las Figuras 9 y 11 respectivamente. Los histogramas en las otras mallas analizadas presentan características similares a las presentadas en la Figura 11. El error relativo de referencia y los errores relativos estimados están representados en la Figura 10.

En este ejemplo nuevamente los resultados obtenidos para la estima E_3 tienen mejor precisión que la alcanzada por las otras opciones. Aún así algunas cuestiones deben ser mencionadas. En primer lugar, el error relativo estimado, en las cuatro opciones, tiene un comportamiento similar al error relativo de referencia, aproximadamente del orden $\mathcal{O}(H)$. Además el orden de magnitud, que existe entre los estimados y el de referencia, puede considerarse aceptable dentro del ambiente de adaptatividad. Sin embargo, los errores relativos, que existen entre los estimados y el de referencia, llegan a superar el 35 % en la última malla analizada. Aunque en esta malla la mejor precisión la tiene E_3 con un 34,6 % de error, el error en E_1 parece llevar una mayor velocidad de convergencia hacia el error de referencia. Por otro lado, aunque el índice de efectividad de E_1 y E_2 tienen un comportamiento simi-

lar, a partir de la malla 5 el índice de efectividad de E_1 parece tener la tendencia a seguir bajando y, por tanto, a mejorar su precisión. Los índices de efectividad de los otros dos estimadores E_3 y E_4 se mantienen constantes.

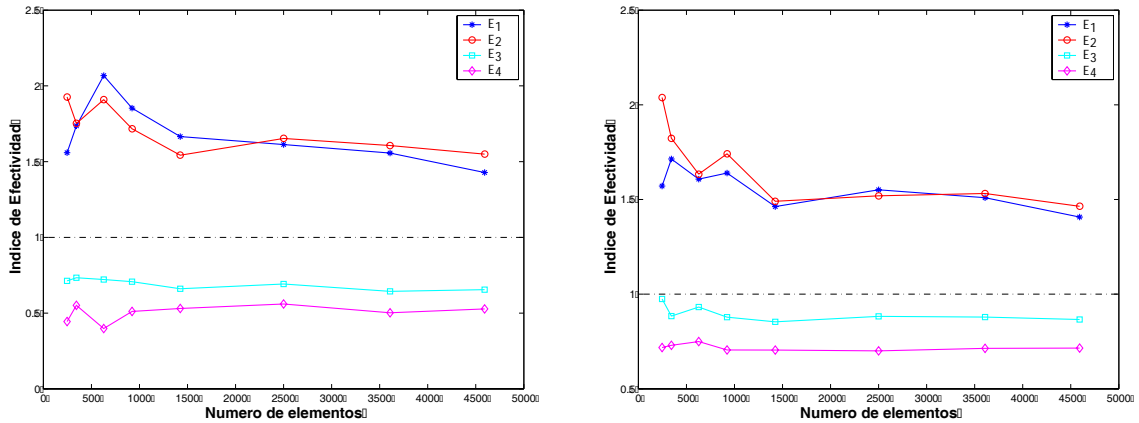


Figura 9. Ejemplo 2: Índices de efectividad: I^{eff} en la gráfica de la izquierda y I_{abs}^{eff} a la derecha

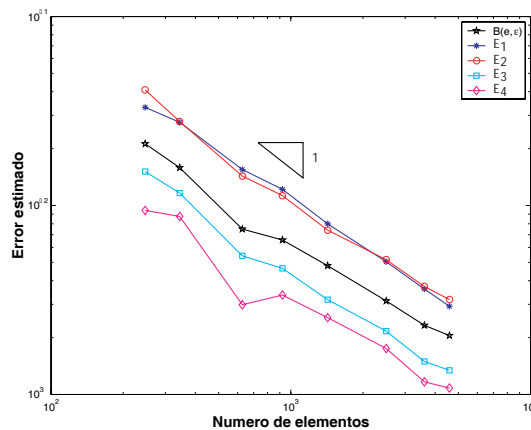


Figura 10. Ejemplo 2: Error relativo

En busca de más información del comportamiento de los estimadores propuestos, estos son analizados en mallas no uniformes. Para este fin, se define una sucesión de mallas a partir de la malla 2 (344 elementos). Sin embargo, no se usa ningún proceso adaptativo en la cantidad de interés para la definición de las mallas, simplemente se da una mayor densidad de elementos en la zona que rodea al punto x_0 , que define la cantidad de interés (adaptabilidad heurística). Se analiza el error estimado en una sucesión de 6 mallas de 344, 627, 840, 1222, 1629 y 2374 elementos. La Figura 12 ilustra las mallas de 344, 1222 y 2374 elementos. Los resultados para esta sucesión de mallas son representados en las Figuras 13 y 14. Los resultados muestran, que las conjeturas dadas anteriormente se cumplen, pues, el error relativo para E_1 converge rápidamente al error de referencia y, por lo tanto, su índice de efectividad tiende al 100%. Los errores para E_3 y E_4 tienen también una mejora significativa, mientras que los resultados de E_2 sufren el mismo efecto del Ejemplo 1.

Las diferencias de precisión encontradas para las dos sucesiones de mallas, se explica mediante la propiedad de superconvergencia del SPR. En la primera sucesión de mallas el error $\|e^{ref}\|$ (respectivamente $\|e^*\|$, en norma energética) decrece muy poco y la propiedad

de superconvergencia del SPR no tiene ningún efecto significativo en la convergencia. No obstante, en la segunda, el error $\|e^{ref}\|$ decrece más rápidamente y la superconvergencia del SPR toma importancia. La convergencia del error es aproximadamente del orden $\mathcal{O}(H^2)$.

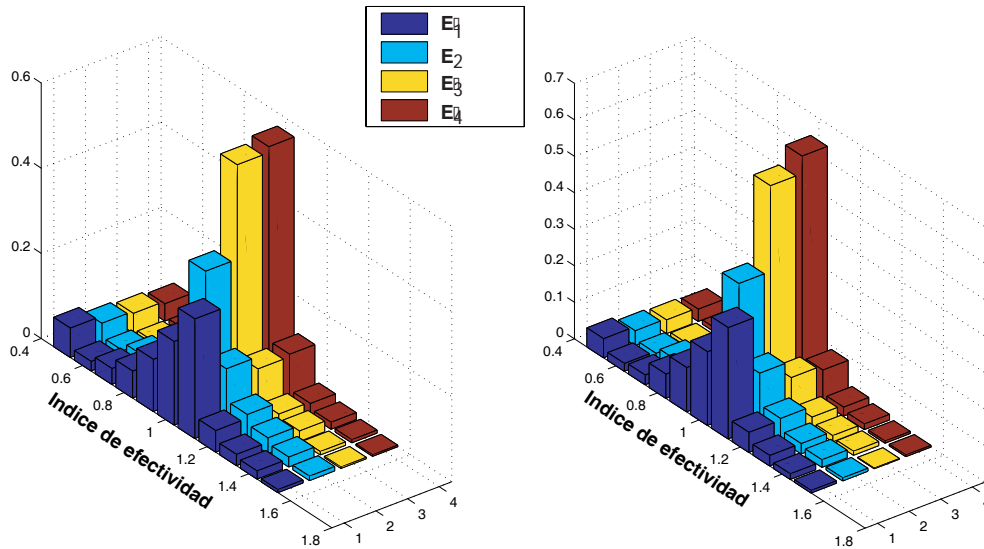


Figura 11. Ejemplo 2: Histograma para los Índices de efectividad normalizados en las mallas 7 y 8. Fila 1: E_1 ; Fila 2: E_2 ; Fila 3: E_3 y Fila 4: E_4

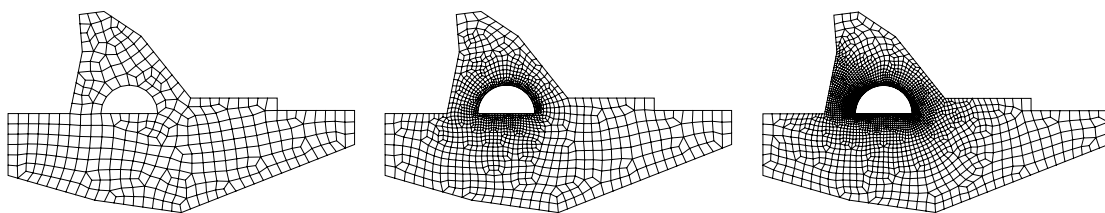


Figura 12. Ejemplo 2: De izquierda a derecha: mallas de 344, 1222 y 2374 elementos con tamaño no uniforme

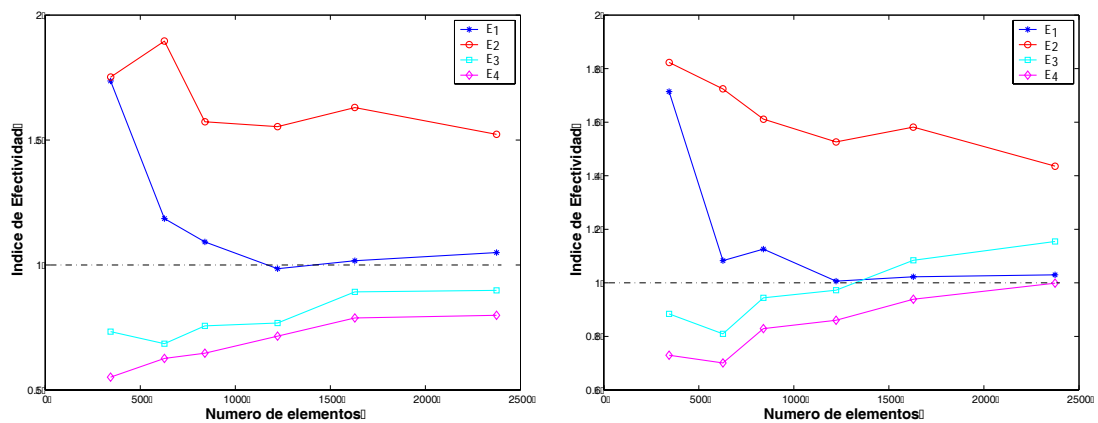


Figura 13. Ejemplo 2: Índices de efectividad para la segunda sucesión de mallas: I^{eff} en la gráfica de la izquierda y I_{abs}^{eff} a la derecha

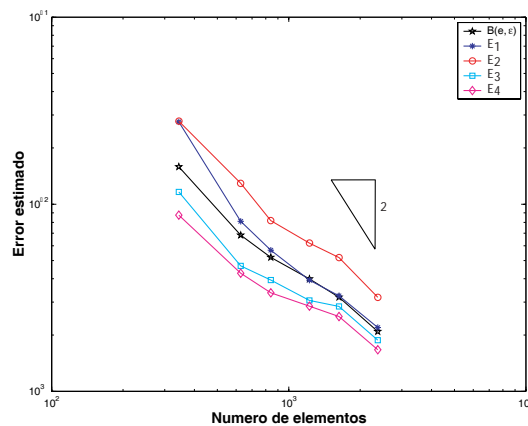


Figura 14. Ejemplo 2: Error relativo para la segunda sucesión de mallas

CONCLUSIONES

Se ha comparado la eficiencia de diversos estimadores de postproceso en el ámbito de la estima de cantidades de interés. El primero E_1 es la utilización directa del suavizado de tensiones mediante el SPR. Los demás E_2 , E_3 y E_4 utilizan el postproceso de desplazamientos en distintas representaciones del error.

Se ha mostrado que, globalmente, E_1 , E_3 y E_4 presentan precisiones equivalentes en la estima del error para la cantidad de interés, mientras que E_2 se comporta peor. Sin embargo, el comportamiento local es mejor en los estimadores E_3 y E_4 que, además, tienen unas distribuciones locales asociadas a los nodos y no a los elementos. Esto los hace aún más competitivos para ser utilizados en un proceso adaptativo.

Los resultados obtenidos para E_4 sugieren la necesidad de analizar estrategias, que implementen estimas de error mixtas, es decir, estimas que usen a E_3 en la parte del dominio, donde la solución primal sea suave y en su complemento con E_4 , siempre y cuando la solución dual sea suave en esta zona.

REFERENCIAS

- 1 M. Paraschivoiu y A.T. Patera, "A hierarchical duality approach to bounds for the outputs of partial differential equation", *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol. **158**, pp. 389–407, (1998).
- 2 M Paraschivoiu, J. Peraire y A.T. Patera, "A posteriori finite element bounds for linear-functional outputs of elliptic partial differential equation", *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol. **150**, pp. 289–312, (1997).
- 3 J. Peraire y A.T. Patera, "Bounds for linear-functional output of coercive partial differential equation: local indicators and adaptive refinement", P. Ladevèze y J.T. Oden (Eds.), "*Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics*", Elsevier, Amsterdam, pp. 199–215, (1998).
- 4 S. Prudhomme y J.T. Oden, "On goal-oriented error estimation for elliptic problems: application to the control of pointwise errors", *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol. **176**, pp. 313–331, (1999).
- 5 J.T. Oden y S. Prudhomme, "Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method", *Comput. Math. Appl.*, Vol. **41**, N° 5-6, pp. 313–331, (2001).
- 6 I. Babuška y W.C. Rheinboldt, "A posteriori error estimates for the finite element method", *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. **12**, pp. 1597–1615, (1978).

- 7 O.C. Zienkiewicz y J.Z. Zhu, “A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis”, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. **24**, pp. 337–357, (1987).
- 8 R. Bangerth y R. Rannacher, “Adaptive finite element methods for differential equations”, *Lecture in Mathematics*, Birkhäuser Verlag, (2003).
- 9 O.C. Zienkiewicz y J.Z. Zhu, “The superconvergent *patch* recovery and a posteriori error estimates. Part 1: The recovery technique”, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. **33**, pp. 1331–1365, (1992).
- 10 O.C. Zienkiewicz y J.Z. Zhu, “The superconvergent *patch* recovery and a posteriori error estimates. Part 2: Error estimates and adaptivity”, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. **33**, pp. 1365–1382, (1992).
- 11 N.E. Wiberg, L.F. Zeng y X.D. Li, “Error estimation and adaptivity in elastodynamics”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, Vol. **101**, pp. 369–395, (1992).
- 12 N.E. Wiberg y X.D. Li, “Superconvergent patch recovery of finite-element and a posteriori L_2 norm error estimate”, *Comm. in Numer. Meth. Engng.*, Vol. **10**, pp. 313–320, (1994).
- 13 N. Pares, P. Díez y A. Huerta, “Subdomain-based flux-free a posteriori error estimators”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, in press.