

CONTROL DEL ERROR EN MAGNITUDES DE INTERÉS DE PROBLEMAS TRANSITORIOS

Giovanni Ernesto Calderón Silva



Tesis Doctoral
Director: Pedro Díez
Barcelona, Octubre 2005

Departament de Matemàtica Aplicada III
Programa de Doctorat de Matemàtica Aplicada

... A Oroicis, Nube Blanca y Simón Ernesto,
compañeros en todas mis luchas.

... A Hermencia,
madre y luz de inspiración.

RESUMEN

En las aplicaciones prácticas, la resolución numérica de un problema transitorio 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 sea en base 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 definen y analizan dos estimas para problemas parabólicos (a partir de una definición del error y el método de elementos finitos discontinuos Galerkin en tiempo, $cG(q)dG(r)$). En la primera se utilizan las ideas introducidas por Zienkiewicz y Zhu (1987 y 1992) para postproceso de tensiones y por Wiberg (1992) para desplazamientos, se aplican estrategias similares para tratar también la parte temporal. La segunda utiliza estimadores de error de tipo residual. En los dos casos para tratar la parte temporal se aprovecha la superconvergencia del $cG(q)dG(r)$.

Además se analiza en detalle el comportamiento de las técnicas de suavizado para la parte espacial (estacionario). Debido a que la representación del error no es única, se definen y analizan tres formas para su representación con dos estrategias de postproceso para la estima del mismo. Se presentan estudios de convergencia y se discuten aspectos de implementación y metodología y su uso en procesos de mallado adaptativo.

Las estimas de error se utilizan en procesos de remallado adaptativo. En este trabajo se analiza también cómo se han de utilizar los criterios de remallado en el proceso adaptativo orientado al control del error en cantidades de interés. Se estudia analíticamente la optimalidad de estos criterios. Además de sus versiones para distribuciones elementales del error, se definen versiones para distribuciones nodales del error. Por otro lado, se analiza cómo escoger la distribución espacial del error idónea para lograr una representación óptima del mismo.

AGRADECIMIENTOS

Debo reconocer y agradecer a personas e instituciones que de una u otra forma han contribuido al desarrollo de este trabajo.

En primer lugar quiero agradecer a mi director de tesis Pedro Díez su dedicación y apoyo durante todo el proceso. Tanto sus conocimientos como sus talentos personales han sido imprescindibles para la realización de este trabajo.

Quiero agradecer de una forma muy especial a mi esposa y mis hijos: Nube Blanca y Simón Ernesto, por el entendimiento y apoyo incondicional que me han brindado en la realización de esta nueva meta. Que los Dioses les bendigan.

También quiero expresar mi gratitud a mi vieja y mi querida familia, por estar siempre ahí, como siempre, sin desmayo.

A mis amigos, tanto los dejados temporalmente en Venezuela como los encontrados en esta etapa de mi vida. En especial a la Sra. Laura Guillén, su ayuda siempre ha sido un pilar fundamental; a la Familia Castelo Romero, su apoyo en Barcelona marcó la diferencia; a mis compañeros de Doctorado, gracias por su apoyo.

El soporte institucional recibido por la Universidad Politécnica de Cataluña, el departamento de Matemática Aplicada III y el Laboratorio de Cálculo Numérico (LaCaN).

Por último, y no por eso menos importante, a mi casa de estudios la **Universidad de Los Andes**. Su programa de becas doctorales me ha brindado esta oportunidad.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Discretización	4
1.2. Representación y estima a posteriori del error en cantidades de interés	5
1.2.1. Estima de la solución del problema dual	8
1.3. Unicidad y representación óptima del error	12
1.4. Adaptatividad	13
1.5. Objetivos	14
1.6. Estructura de la tesis	15
1.7. Pre-publicaciones	17
2. Estima de error en magnitudes de interés para problemas parabólicos	19
2.1. Introducción	19
2.2. Problema modelo, notación y formulación variacional	21
2.3. MEF Galerkin Discontinuo	23
2.3.1. Discretización espacial	23
2.3.2. Discretización en el tiempo	24
2.3.3. Solución exacta y de referencia	28

2.3.4.	Convergencia del MEF $cG(q)dG(r)$	29
	Problema local	31
2.4.	Cantidades de interés y problema dual asociado	33
2.5.	Representación del error	36
2.5.1.	Ecuación primal del error	36
2.5.2.	Usando z para determinar $J(e)$	37
2.6.	Estima a posteriori del error	38
2.6.1.	Estima usando recovery	39
	Recovery en la componente espacial	40
	Recovery en el tiempo	42
2.6.2.	Estima residual	44
2.6.3.	Análisis del recovery	45
2.7.	Experimentación Numérica	46
2.7.1.	Ejemplo 1. (caso 1D)	46
2.7.2.	Ejemplo 2. 2D	54
2.7.3.	Ejemplo 3. Efecto térmico	59
2.7.4.	Consideraciones finales	67
3.	Análisis de diferentes estimadores de error de postproceso para adaptatividad orientada al resultado	71
3.1.	Introducción	71
3.2.	Planteamiento del problema	73
3.2.1.	Problema modelo	73
3.2.2.	Ecuación del error y error de referencia	75
3.2.3.	Cantidad de interés y problema dual	75
3.3.	Representación del error	78

3.3.1.	Representación global	78
3.3.2.	Distribución espacial del error	79
3.3.3.	Aspectos computacionales	82
3.4.	Estima del error	82
3.4.1.	Estima usando suavizado de tensiones (SPR)	83
3.4.2.	Estima usando suavizado de desplazamientos	85
3.4.3.	Estimadores propuestos	88
3.4.4.	Análisis del estimador por postproceso de desplazamientos	89
3.5.	Experimentación numérica	90
3.5.1.	Ejemplo 1: problema térmico	91
3.5.2.	Ejemplo 2: problema mecánico elástico	94
3.5.3.	Conclusiones	99
4.	Criterios de remallado y representación correcta del error para adaptatividad orientada al resultado	101
4.1.	Introducción	101
4.2.	Planteamiento del problema	104
4.2.1.	Problema modelo	104
4.2.2.	Solución discreta y ecuación del error	104
4.2.3.	Cantidades de interés, problema dual y representación del error	105
4.2.4.	Distribución espacial del error	106
4.3.	Marco general para los criterios de remallado	106
4.3.1.	Notación y objetivos	106
4.3.2.	Hipótesis requeridas: orden de convergencia local, distribución óptima del error	108
4.3.3.	Derivación de los criterios de remallado	109

4.4. Optimalidad de la distribución uniforme del error	111
4.5. Representación apropiada para la distribución local del error . .	113
4.5.1. Producto de errores elementales	113
4.5.2. Selección óptima de $v_{\mathbb{H}}$	114
4.5.3. Factor de corrección	119
4.5.4. Distribución nodal del error	120
4.6. Experimentación numérica	122
4.6.1. Ejemplo térmico: Problema de Poisson	123
4.6.2. Ejemplo mecánico: Viga entallada	127
5. Conclusiones y perspectivas de futuro	139
5.1. Conclusiones y aportes originales	139
5.2. Continuación de la investigación	142
5.3. Otras líneas de investigación	144
Apéndice A: Formulación de los métodos de discontinuos Galerkin en tiempo	145
A.1. Métodos $cG(q)dG(0)$ y $cG(q)dG(1)$	145
A.2. Problema local	147
Apéndice B: Análisis de la exactitud asintótica de los métodos de suavizado	149
B.1. Planteamiento	149
B.2. Análisis	151
B.3. Experimentación numérica	155
Referencias	163

Capítulo 1

Introducción

El modelado de fenómenos difusivos transitorios se hace a través de EDPs parabólicas. Este es el caso de la ecuación del calor, que es extensamente usada para simular el comportamiento térmico de estructuras y dispositivos mecánicos. En la mayoría de los casos la solución exacta de los modelos matemáticos es desconocida, esto hace necesario recurrir a métodos numéricos para su aproximación; introduciendo así, un error de aproximación al sustituir la solución del modelo por la solución del método numérico. Es común, debido a su potencial y versatilidad, que el método de los elementos finitos (MEF) sea frecuentemente el más utilizado para obtener las soluciones aproximadas de estos problemas.

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

ver Brenner y Scott [1]).

La mayoría de los estimadores a posteriori buscan evaluar o aproximar el error en norma energética (error global). Sin embargo, en la actualidad, en muchas aplicaciones de las ciencias existe un interés particular en ciertas cantidades específicas de la solución (*cantidad de interés*) y no en la solución global. Éstas, en general, son de interés en el campo de la física o la ingeniería y suelen estar orientadas al diseño y optimización de un determinado problema. En estos casos, se prefiere que la medida del error sea en base a cantidades de interés (determinadas por el usuario) en vez de en base a la norma energética.

Dentro del contexto de problemas parabólicos los estimadores de error y algoritmos de adaptatividad siguen la misma tendencia: control del error de forma global y, en muchos de ellos, para problemas unidimensionales. En esta línea se pueden citar los trabajos de Babuška y colaboradores [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]; Berzins, Lawson y Dew [9]; Moore y Flaherty [10, 11, 12]; Flaherty, Adjerid y Wang [13]; Arroyo, Díez y Huerta [14]; Schötzau, Werder, Gerder y Schwab [15, 16]. Vale señalar que en la mayoría de estos artículos se evita analizar la interacción entre el error temporal y el error espacial, considerando que el error temporal es despreciable en comparación con el error cometido en la variable espacial.

Aunque los estimadores basados en un control global del error tienen algún éxito en el caso de cantidades de interés, generalmente ninguna crea mallas que sean eficientes para computar las cantidades de interés ni de dar de forma fiable estimas del error de la cantidad computada. Por ejemplo, para el caso de un problema elíptico, la Figura 1.1 muestra las mallas producidas al usar un proceso adaptativo a partir de la representación del error en la cantidad de interés (izquierda) y en norma de energía (derecha). En particular, para el ejemplo, se tiene interés en controlar la precisión de la solución aproximada en el punto $P = (0.6, 0.6)$ (los detalles de este ejemplo se pueden ver en el Capítulo 3, ejemplo 1). La malla dada en la Figura 1.1 (derecha) está diseñada para controlar el error en norma de energía; sin embargo, no resulta óptima para controlar el error en la cantidad de interés, $u(P)$. La malla diseñada a partir de la cantidad de interés (Figura 1.1 izquierda) resulta más apropiada,

en el sentido que con menos elementos obtiene un error relativo mejor.

En el presente, el diseño e implementación de MEF adaptativos y la computación de valores fiables para cantidades físicamente relevantes es uno de los principales retos en el campo computacional de las ecuaciones diferenciales parciales; de hecho, buena parte de lo que se publica sobre estima de error en el MEF se hace en este tema.

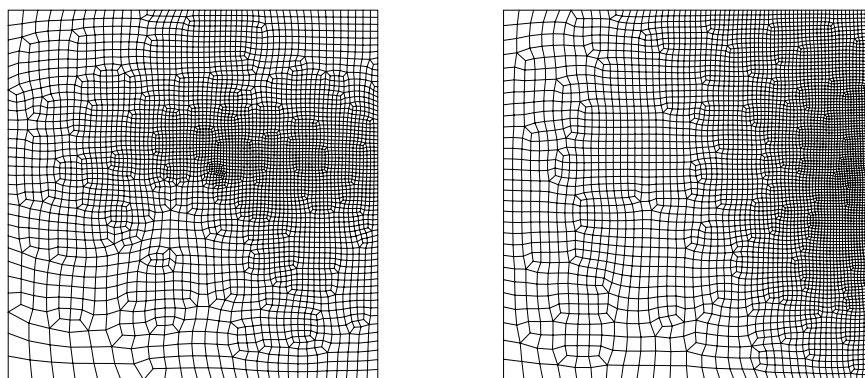


Figura 1.1: Ejemplo elíptico. Mallas construidas usando (a) representación del error en la cantidad de interés: 4148 elementos, error relativo en la cantidad de interés $\approx 8.0 \times 10^{-5}$, error en norma de energía ≈ 0.273 (b) representación del error en norma de energía: 4987 elementos, error relativo en la cantidad de interés $\approx 2.0 \times 10^{-4}$ error en norma de energía ≈ 0.140 . El error relativo viene dado por $(u(P) - u_H(P))/u(P)$, donde u y u_H definen las soluciones exacta y numérica respectivamente, P el nodo donde se quiere controlar el error.

Cantidades de interés comúnmente usadas en el campo de la física o la ingeniería suelen representar: flujo de calor a través de una porción de la frontera del dominio, gradientes de temperatura, velocidad, desplazamientos o tensiones en ciertas zonas, valor puntual o promedios de la solución en una parte del dominio, etc. Sin embargo, a lo largo de todo el trabajo, se asume, siempre y cuando no se diga lo contrario, que las cantidades de interés a ser utilizadas para el control del error se pueden caracterizar, desde un punto de vista matemático, por funcionales lineales, $J(u)$, de la solución, u .

Con lo dicho hasta el momento el objetivo a seguir se centra en crear e implementar un algoritmo adaptativo orientado al cálculo de la solución de problemas parabólicos tal que la evaluación de la cantidad de interés sea óptima. Además, este algoritmo debería de tomar en cuenta las contribuciones espacio-tiempo que existen en este tipo de problema. Por lo tanto, en lo que

sigue se presentan los avances alcanzados en esta dirección, para luego, en el apartado 1.5, proponer los objetivos a lograr, en la medida de lo posible, en esta tesis.

1.1. Discretización

Para efecto de la presentación de los resultados que existen en la literatura, la función incognita u define la solución de un problema general (estacionario o parabólico) que tiene una representación variacional de la forma: encontrar $u \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(u, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}, \quad (1.1)$$

donde B representa una forma bilineal y L un funcional lineal, ambas definidas en un espacio \mathbf{V} de funciones admisibles para el problema en cuestión (espacio de Hilbert). La solución exacta, u , es entonces aproximada por la solución de elementos finitos, u_{H} , definida en el espacio finito dimensional $\mathbf{V}_{\text{H}} \subset \mathbf{V}$ (para el caso parabólico, \mathbf{V}_{H} denota el espacio de elementos finitos generado por la discretización H , Δt del dominio *espacio-tiempo*). La solución de elementos finitos verifica

$$B(u_{\text{H}}, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\text{H}}. \quad (1.2)$$

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

$$B(e, v) = \mathcal{R}^{\text{P}}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}, \quad (1.3)$$

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

$$\mathcal{R}^{\text{P}}(v) := L(v) - B(u_{\text{H}}, v). \quad (1.4)$$

En problemas parabólicos, el cálculo de u_{H} mediante elementos finitos es habitual que se haga siguiendo un esquema de integración temporal basado en diferencias finitas (Regla del punto medio, Crank-Nicolson, etc.). En este trabajo se introduce un método *Galerkin discontinuo* para la discretización temporal de la solución numérica de problemas parabólicos. En particular se considera

el método $cG(q)dG(r)$, que está basado en una formulación de elementos finitos para las dos variables: espacio y tiempo. Para la discretización espacial se usan elementos finitos estándares (continuos) de grado q . La discretización temporal se hace usando polinomios, habitualmente de grado $r = 0$ o $r = 1$, en cada nivel de tiempo. La ventaja que se tiene en cuenta, al momento de usar este método, es el hecho de contar con una formulación variacional para la variable temporal, permitiendo un análisis del error de discretización en dicha variable. Otra ventaja que presenta el método al tomar $r \geq 1$ es la propiedad de *superconvergencia* de la solución en la variable temporal. Se desea explotar esta propiedad al momento de definir estimadores a posteriori del error. Se conoce como superconvergencia de la solución por elementos finitos a mejoras puntuales de las propiedades de convergencia de la solución.

Para ecuaciones diferenciales parciales parabólicas, el método $cG(q)dG(r)$ fue introducido por Jamet en [17]. Posteriormente, estimas a priori del error, estimas a posteriori y adaptatividad son deducidas y analizadas en Thomée [18]; Eriksson, Johnson y Thomée [19] y los artículos de Eriksson y Johnson [20, 21, 22, 23]. Además, versiones con h y hp adaptatividad del método $cG(q)dG(r)$ son propuestas y analizadas en detalle por Schwab, Werder, Gerder y Schötzau en [15, 16]. Las propiedades de estabilidad del método son dadas por Makridakis y Babuška en [24].

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

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

$$B(v, z) = J(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}. \quad (1.5)$$

En este problema adjunto el funcional lineal $J(\cdot)$ aparece al lado derecho de la ecuación débil y desempeña el papel de una carga externa. Esta función de

influencia explica cómo el residuo (se entiende por residuo la no verificación de la forma fuerte de la ecuación diferencial que se está resolviendo) en el problema primal influye sobre el error en la cantidad de interés. Es decir, ya que $e \in \mathbf{V}$, se tiene a partir de (1.3) y (1.5) la representación del error

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z). \quad (1.6)$$

En el caso de problemas parabólicos la definición del problema dual introduce una dificultad adicional al proceso de estima del error y adaptatividad, pues este problema debe ser resuelto hacia el pasado en el dominio temporal $[t_0, T)$. Es decir, la condición inicial del problema dual está dada en T .

Estas ideas de dualidad (para problemas estacionarios) fueron inicialmente desarrollados por Babuška y Miller en [25, 26, 27]. Contribuciones posteriores han sido dadas por Eriksson, Estep, Hansbo y Johnson [28] y los trabajos de Rannacher y colaboradores [29, 30, 31], recientemente agrupados en [32]. La idea de dualidad en problemas parabólicos es extensamente tratada en los trabajos reseñados anteriormente para el caso del método Galerkin discontinuo, $cG(q)dG(r)$.

Al mismo tiempo, debido a la propiedad de *ortogonalidad de Galerkin*, se tiene de (1.5) la representación del error

$$J(e) = B(e, z) = B(e, z - v_H) \quad \forall v_H \in \mathbf{V}_H. \quad (1.7)$$

Este hecho no altera el valor global del error, pero sí su distribución espacial (valores locales del error). De igual forma, a partir de (1.6) se obtiene

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z - v_H). \quad (1.8)$$

Aunque, de forma global, (1.7) y (1.8) resulten equivalentes, se tiene que la representación (1.8) sólo requiere conocer (estimar) la solución del problema dual en comparación con (1.7) que requiere conocer las soluciones de ambos problemas: primal y dual. No obstante, la representación local de (1.8) incluye saltos en las aristas de los elementos, y es aquí donde se presentará el mayor esfuerzo computacional.

Si z pudiera ser calculada exactamente, se podría determinar $J(e)$ directamente a partir de los datos, ya que usando (1.1) y (1.5) se tiene que $J(u) = L(z)$. Desafortunadamente, el problema dual (1.5) presenta las mismas dificultades de resolución que el problema primal (1.1).

Por otro lado, ya que la solución z del problema dual es usualmente desconocida puede suponerse deseable eliminarla de la representación del error (1.8) en lugar de estimarla; de hecho, empleando la desigualdades de Hölder y Cauchy-Schwarz, junto con resultados estándares de la teoría de aproximación, las contribuciones locales de \mathcal{R}^P , pueden ser acotados superiormente en función de las longitudes características de la discretización, H y Δt (sólo H en el caso de problemas estacionarios), y una seminorma de z . Por ejemplo, en problemas elípticos

$$|J(e)| \leq \sum_k \psi_k \omega_k \leq \left(\sum_k H_k^2 \psi_k^2 \right)^{1/2} \left(\sum_k H_k^{-2} \omega_k^2 \right)^{1/2}, \quad (1.9)$$

donde

$$\psi_k := \left(\|R_H\|_k^2 + H_k^{-1} \|r_H\|_{\partial k}^2 \right)^{1/2} \quad \text{y} \quad \omega_k := \left(\|z - v_H\|_k^2 + H_k \|z - v_H\|_{\partial k}^2 \right)^{1/2},$$

con R_H y r_H los residuos en el elemento k y la frontera de dicho elemento, respectivamente; v_H una función arbitraria en \mathbf{V}_H y H_k el tamaño del elemento. Haciendo uso de la desigualdad (ver, Brenner y Scott [1])

$$\inf_{v_H \in \mathbf{V}_H} \left(\sum_k H_k^{-2} \|z - v_H\|_k^2 + H_k^{-1} \|z - v_H\|_{\partial k}^2 \right)^{1/2} \leq C \|\nabla z\|,$$

y admitiendo la cota a priori trivial $\|\nabla z\| \leq 1$, z puede ser completamente eliminada de la estima a posteriori. Esto es,

$$|J(e)| \leq C \left(\sum_k H_k^2 \psi_k^2 \right)^{1/2}. \quad (1.10)$$

Así, la cota a posteriori del error en la cantidad de interés sólo depende de residuos en norma, el parámetro de discretización H y la constante de interpolación. Esta metodología está ampliamente recogida en los artículos de Eriksson y Johnson [20, 21, 22, 23] y Thomée [18]. Desde un enfoque aplicado,

especialmente en problemas estacionarios, se puede citar el libro de Rannacher y Bangerth [32], en este se plantean un sin fin de ejemplos en los cuales se obtienen cotas (que no dependen de z) para la representación a posteriori del error en la cantidad de interés.

Sin embargo, en la práctica, la eliminación del término de peso que involucra la solución dual z puede adversamente afectar la eficiencia del algoritmo de adaptatividad resultante, debido a una malla nada económica y a su dependencia de constantes que deben ser a su vez estimadas.

Por consiguiente, en este trabajo, se descartará en general la simplificación de la solución dual z de la cota del error a posteriori (1.8). En su lugar, la solución z del problema dual será aproximada numéricamente como parte del proceso de estima del error. Para esto, el costo de este cálculo adicional debe resultar “barato” en comparación con el costo de determinar la aproximación numérica del problema primal original.

1.2.1. Estima de la solución del problema dual

Si suponemos que la solución z del problema dual (1.5) es aproximada (estimada de alguna manera) se tiene que la representación del error (1.8) será entonces aproximada por

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z - v_H) \approx \mathcal{R}^P(\hat{z} - v_H), \quad (1.11)$$

donde \hat{z} denotará la estima de la solución z . En particular, teniendo en cuenta la propiedad de ortogonalidad, es claro que la aproximación \hat{z} , de z , no puede calcularse usando el mismo espacio de elementos finitos, \mathbf{V}_H , empleado para el cálculo del problema primal. Pues, de ser así, se tendría una estima trivial del error.

En la práctica, la estima de z en problemas parabólicos se realiza en dos etapas: en la primera se estima el valor de z para un tiempo fijo (estima en problemas estacionarios) y en una segunda parte se deja variar el tiempo. Así, en general, un proceso de estima en la componente espacial resulta equivalente tanto para problemas estacionarios como parabólicos.

Estima de z en problemas estacionarios

Para estimar el error (estima de z) existen dos alternativas que corresponden a dos grandes familias de métodos. En primer lugar los *estimadores de error de tipo residual* introducidos por Babuška y Rheinboldt [25]. La otra alternativa está basada en los *estimadores por postproceso o suavizado* (recovery¹) que se inspiran en el estimador introducido por Zienkiewicz y Zhu en [33], y posteriormente modificado por los mismos autores en [34, 35]. Estas dos familias de estimadores fueron originalmente propuestas para estimar el error de problemas estacionarios en norma energética. Sin embargo, hoy en día, se han aplicado estas ideas para desarrollar estimadores de error en cantidades de interés. Además, en el caso de una forma bilineal simétrica, la combinación de estimas de error en norma energética para los problemas primal y dual junto a la identidad del paralelogramo y la desigualdad triangular permiten estimar cotas superiores e inferiores del error en la cantidad de interés. Por ejemplo, se pueden citar, entre otros, los trabajos de Peraire, Paraschivoiu y Patera [36]; Paraschivoiu y Patera [37]; Peraire y Patera [38]; Oden y Prudhomme [39, 40]; Díez, Páres y Huerta [41]. Muchos de los resultados obtenidos en estos trabajos están recogidos por Ainsworth en [42].

Por otro lado, Rannacher y Bangerth [32] proponen acotaciones del error como la dada en (1.9) ($|J(e)| \leq \sum_k \psi_k \omega_k$), donde los errores locales están expresados en términos de los residuos dados por ψ_k (estos errores locales incluyen saltos en las aristas de los elementos) multiplicado por un peso, ω_k , que involucra la solución del problema dual. Resulta fácil ver, al aplicar la desigualdad de Cauchy-Schwarz al lado derecho de (1.8), que este tipo de acotaciones puede llevar a sobreestimar el error verdadero. Esto es debido a que el efecto de cancelación que ocurre en la representación del error (1.8) a través de la suma de los términos locales es suprimido. Larson y Niklasson en [43] concluyen, mediante una extensa experimentación numérica, que esta estima no rinde buenos resultados y en muchos casos su precisión llega a deteriorarse significativamente. Además, al no haber constantes desconocidas en la estima,

¹En muchas ocasiones a lo largo del presente trabajo se usará la nomenclatura anglosajona “recovery” para referirnos a la solución obtenida a partir de un suavizado.

la pérdida en la exactitud es sólo consecuencia de las estimas analíticas.

Para la estima de z en (1.11) o (1.9) Rannacher y Bangerth proponen: aproximaciones numéricas usando polinomios de interpolación de mayor orden o aproximaciones locales por postproceso. En lo sigue se explican con más detalle estas propuestas.

Aproximación por métodos de alto orden. Para ésta opción se resuelve el problema dual usando elementos finitos bicuadráticos en la malla gruesa \mathbf{H} , calculando una aproximación $z_{\mathbf{H}}^{(2)} \in \mathbf{V}_{\mathbf{H}}^{(2)}$ de z . La estima a posteriori para $J(e)$ queda dada por

$$J(e) \approx \mathcal{R}^P(z_{\mathbf{H}}^{(2)} - \Pi_{\mathbf{H}}^{(2)} z_{\mathbf{H}}^{(2)}), \quad (1.12)$$

donde $\Pi_{\mathbf{H}}^{(2)} : \mathbf{V}_{\mathbf{H}}^{(2)} \rightarrow \mathbf{V}_{\mathbf{H}}$ define el operador de interpolación natural.

Aproximación por postproceso o suavizado (recovery). Para bloques adyacentes de cuatro elementos lineales, los 9 valores nodales (para el caso de un problema 2D con mallas estructuradas) de $z_{\mathbf{H}}$ son usados para definir el operador de interpolación $\Pi_{\mathbf{H}}^h : \mathbf{V}_{\mathbf{H}} \rightarrow \mathbf{V}_h$ (con $\mathbf{V}_{\mathbf{H}} \subset \mathbf{V}_h$). Éste es entonces usado en la representación del error al usar $z^* := \Pi_{\mathbf{H}}^h z_{\mathbf{H}}$ en lugar de z . Así, resulta la estima a posteriori del error dada por

$$J(e) \approx \mathcal{R}^P(z^* - z_{\mathbf{H}}). \quad (1.13)$$

Antes de continuar es conveniente analizar las propuestas dadas por Rannacher y Bangerth [32]. Según estos autores, aproximar z , la solución del problema dual, por un método de mayor orden que el usado para aproximar $u_{\mathbf{H}}$ no es muy razonable y debería ser evitado en general. Usar z^* para aproximar z parece más atractivo. Los estimadores que usan este tipo de aproximación entran dentro de la familia de los *estimadores por postproceso o suavizado* y, como ya se dijo antes, se basan en el estimador original introducido por Zienkiewicz y Zhu en [33]. La idea de este estimador han sido ampliamente analizada y enriquecida, entre otros, por Wiberg y colaboradores en [44, 45, 46, 47, 48] y Aalto en [49, 50]. La idea principal de estos estimadores se basa en comparar el flujo (o tensiones) de la solución aproximada ($\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{H}}$ discontinuo) con un flujo suavizado ($\boldsymbol{\sigma}^*$ continuo) que sustituye a la solución exacta ($\boldsymbol{\sigma}$ también

continua). Este recovery tiene su base teórica en propiedades de superconvergencia de la solución (tensiones) en ciertos puntos de cada elemento del dominio que permite justificar que σ^* es una aproximación a σ mucho mejor que σ_H . Sin embargo, cuando se aplica una técnica similar para obtener un campo de desplazamientos (o la incógnita original) mejorado, la situación es muy distinta y no es claro que z^* sea mejor aproximación para z que z_H . Pues, en el caso de desplazamientos sólo se puede asegurar la existencia de puntos superconvergentes cuando se usan elementos cuadráticos o de orden superior (ver Krizek y Neittaanmaki [51], Wiberg y Li [52, 53] y las referencias que se citan en estos artículos).

Vale la pena señalar que Rannacher y Bangerth [32], aunque proponen las dos estrategias anteriores para la estima de z , se decantan por los estimadores que se definen a partir de cotas del estilo de (1.10).

La otra alternativa para la estima de z la presentan los estimadores de tipo residual (ver Babuška y Rheinboldt [25], además, entre otros, se pueden ver: Díez [54]; Díez, Egozcue y Huerta [55] y las referencias citadas en estos trabajos). Estos estimadores se basan en la resolución de problemas locales (uno en cada elemento del dominio). Sin embargo, para resolver estos problemas locales, es necesario determinar condiciones de contorno alrededor de cada elemento del dominio, y en nuestro caso (problemas parabólicos) será además necesario definir la condición inicial para cada problema local. Este tipo de estimadores tienen una sólida base teórica (ver, por ejemplo, Ainsworth [42]) pero, en la aplicación práctica, resultan ser menos eficaces que los estimadores de proyección de flujo.

Estima de z en problemas parabólicos

Para el caso de problemas parabólicos existen menos resultados disponibles en la literatura. El trabajo de Machiels [56] sigue la misma idea de los problemas elípticos, se dan acotaciones para la representación del error en cantidades de interés pero se descuida el error introducido en la discretización temporal. Por otro lado, en [32], Rannacher y Bangerth definen representaciones del error que, en principio, requieren la evaluación, z , del problema dual. Ahora, de-

bido a que la representación del error queda desacoplada en cada intervalo de tiempo (método $cG(q)dG(r)$), proponen estrategias análogas a las usadas para el caso de problemas estacionarios: aproximaciones por postproceso locales o aproximaciones numéricas usando polinomios de interpolación de mayor orden. Aunque, estos autores, toman en cuenta el efecto producido por el error temporal, dicho error se mantiene constante a lo largo de cada intervalo de tiempo.

En otras palabras, Rannacher y Bangerth enriquecen la solución sólo en la variable espacial, restando importancia a la variable temporal en la definición de la estima e ignorando, en general, la propiedad de superconvergencia del método $cG(q)dG(r)$. Este hecho se pone en evidencia al deducir estimas a posteriori basadas en un $cG(q)dG(0)$, cuya solución es constante en cada paso del tiempo. Sin embargo, usando un orden cero para la interpolación en el tiempo logran promediar separadamente las contribuciones al error de las variables espacio-tiempo, lo cual resulta de suma importancia para la definición de un proceso adaptativo. No obstante, para lograr separar las contribuciones del error, deben hacer uso de una acotación como la obtenida en (1.10), lo cual puede conducir a las mismas conclusiones de Larson y Niklasson [43]. Todo lo anteriormente dicho, puede traer como consecuencia una supervaloración de la estima, afectando el desempeño de la misma en el proceso adaptativo.

1.3. Unicidad y representación óptima del error

La representación del error en la cantidad de interés involucra las soluciones del problema primal y del problema dual asociado, las cuales se pueden combinar de diferentes maneras. En otras palabras, la representación del error no es única (ver, por ejemplo, las ecuaciones (1.7) y (1.8)) y en muchos casos puede depender del problema a tratar. Por otro lado, aunque es habitual que las representaciones locales del error se expresen a través de los elementos de discretización que conforman el dominio, se pueden definir representaciones locales usando los nodos de discretización (ver, por ejemplo, los trabajos de

Morin, Nochetto y Siebert [57]; Páres, Díez y Huerta [58], para el caso de problemas estacionarios) agregando así nuevas posibilidades para la representación del error. Este hecho, además, simplifica el cálculo y la implementación ya que elimina el salto de flujos de la solución aproximada en la frontera de los elementos de aquellas representaciones definidas a partir del residuo fuerte del error.

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

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

1.4. Adaptatividad

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

En el contexto de adaptatividad basada en la norma de energía, la atención se ha dedicado a los criterios de remallado que definen el tamaño del elemento como una función del error local denominados *tipo h*. Entre otros, se pueden

citar, los trabajos de Li y colaboradores [59, 60]; Zienkiewicz y Zhu [33]; Oñate y Bugeda [61]; Díez y Huerta [62]. En el marco de adaptatividad orientada al resultado, donde el objetivo es el control del error en una cierta cantidad de interés en lugar de la norma de energía, cada autor sigue su propia receta, basada a menudo en consideraciones heurísticas y sin ninguna exigencia en el diseño y optimalidad de la malla, ni en la representación del error utilizada (Prudhomme y Oden [39]; Peraire [63]; Parés y colaboradores [64]), y esto suele ser peor si se trata de problemas parabólicos.

Las particularidades asociadas a los criterios de remallado en cantidades de interés se relacionan especialmente con dos factores: que las contribuciones locales del error presentan en general signos opuestos y el hecho que la representación del error no es única. Sin embargo, una estrategia general que defina e implemente criterios de remallado para adaptatividad orientada al resultado, donde se analicen estos dos factores no se encuentra en la literatura ni para problemas elípticos ni mucho menos para problemas parabólicos.

1.5. Objetivos

Como ya se dijo antes, el objetivo final que se quiere alcanzar es el de crear e implementar un algoritmo adaptativo orientado al cálculo de la solución de problemas parabólicos tal que la evaluación de la cantidad de interés sea óptima; este algoritmo debería de tomar en cuenta las contribuciones espacio-tiempo que existen en este tipo de problema. A partir de esto, dos problemas generales deben ser resueltos:

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

Sin embargo, con todo lo dicho en los apartados anteriores, si se pretenden alcanzar estas metas, se deben plantear los siguiente objetivos:

1. Definir estimas para los problemas parabólicos primal y dual usando estimadores de tipo residual o de postproceso (desplazamientos en lugar de tensiones).
2. Analizar las distintas representaciones del error, evaluadas con las estimas propuestas en el item anterior. Este análisis debe incluir aspectos de implementación y metodología, así como su uso en procesos de remallado (adaptatividad).
3. Definir criterios de remallado en cantidades de interés para la implementación de un proceso de adaptatividad.
4. Implementar algoritmos donde la función v_H (dada en (1.7)) sea definida tal que la representación del error resulte óptima. En otras palabras, lograr construir la malla de discretización, con el menor número posible de grados de libertad, donde se alcance la tolerancia de error prescritas.
5. Para el proceso adaptativo de problemas parabólicos, resulta conveniente definir la representación del error tal que se puedan separar las contribuciones locales del error: espacio y tiempo.

1.6. Estructura de la tesis

La tesis trata de cubrir en la medida de lo posible los objetivos planteados. Sin embargo, la definición de una representación del error que separe las contribuciones locales espacio-tiempo y así llevar a cabo el proceso adaptativo en problemas parabólicos quedo fuera del alcance de este trabajo. Resulta apropiado señalar que este objetivo, y debido a que representa el paso final del algoritmo, se pretende abordar de forma inmediata como trabajo de continuación a esta tesis.

El primer objetivo se desarrolla a lo largo del capítulo 2. En este capítulo, queda en evidencia las dificultades que un proceso adaptativo posee en el caso de cantidades de interés en problemas parabólicos. No obstante, y como se concluirá de la experimentación numérica, una buena representación y estima a posteriori del error serán de extrema utilidad al momento de definir un proceso adaptativo en problemas parabólicos.

Para alcanzar los objetivos 2, 3 y 4, en los capítulos 3 y 4 se trabaja con problemas elípticos y mecánicos. Este hecho, aunque no altera la validez de los resultados presentados, ayuda a aclarar y simplificar el análisis que pudiera resultar tedioso hacerlo de forma directa en problemas parabólicos.

El contexto del trabajo se desarrolla de la forma siguiente: en el siguiente capítulo se introduce y analiza el método de elementos finitos que será empleado para resolver problemas de tipo parabólico; en particular se considera el método Galerkin discontinuo, $cG(1)dG(1)$. Se define la representación del error y se deducen las estimas a utilizar. Dos aproximaciones diferentes (para la componente espacial) son consideradas: en la primera, una aproximación de z es obtenida por un postproceso sobre la solución aproximada, z_H , del problema dual. Para el postproceso se siguen las ideas de Wiberg y colaboradores [46, 53]. La segunda aproximación, basada en la filosofía de los estimadores residuales, construye una solución suavizada resolviendo problemas locales de valor inicial. Por otro lado, en la componente temporal se utiliza un postproceso (suavizado) pero tomando en cuenta la propiedad de superconvergencia del método $cG(1)dG(1)$. La validación de las estimas se hace a través de un test de cantidades de interés entre las que destaca el *gradiente de temperatura* para puentes de hormigón estudiada por Mirambell, Aguado y Díez en [65]. Los resultados obtenidos para las estimas propuestas son comparados a la vez con la solución exacta (si se conoce) y una solución de referencia.

En el capítulo 3 se analizan tres representaciones del error, usando diferentes estimadores por postproceso para su evaluación. En una de estas representaciones la estima se hace en tensiones mientras en las otras es necesario contar con la aproximación de la solución (prima o dual) en desplazamientos. Además, se analiza las representaciones del error expresadas a través de los

nodos de discretización. Se discuten aspectos de implementación y metodología y su uso en procesos de mallado adaptativo. Igualmente, se finaliza el capítulo con la experimentación numérica y sus conclusiones.

El capítulo 4 cubre los objetivos 3 y 4 dados anteriormente. Dos criterios de optimalidad son propuestos para definir los criterios de remallado a usar en el proceso adaptativo orientado al control del error en la cantidad de interés. El primero, basado en una distribución uniforme del error, sigue las ideas de Li y Bettess [59, 60] dadas para el caso de norma energética. El segundo está inspirado en el trabajo de Oñate y Bugeda [61] y se basa en una equidistribución del error. Además de sus versiones para distribuciones elementales del error, se definen y analizan versiones de estos criterios para el caso de contar con distribuciones nodales del error. Se definen distintas representaciones de v_H y se analiza la modificación de la distribución espacial del error mediante un factor de corrección. Se demuestra la optimalidad del primer criterio propuesto. Se finaliza el capítulo con la experimentación numérica en problemas térmicos y mecánicos elásticos.

Finalmente, en el capítulo 5 se detallan las aportaciones que se han hecho junto a las consideraciones finales del trabajo. Además, se dan los planteamientos a seguir, inmediatamente, en el proceso de adaptatividad de problemas parabólicos; así como la línea a seguir a futuro en el área de estima de error orientada al resultado en el MEF.

Para facilitar la lectura y la presentación de las ideas propuestas en este trabajo se ha dejado para el final del mismo (Apéndices) los resultados teóricos del MEF junto a las demostraciones que pudieran resultar tediosas. Por último, las referencias dadas a lo largo del trabajo.

1.7. Pre-publicaciones

Algunos de los resultados presentados en este trabajo ya fueron publicados o se encuentran sometidos a revisión.

► Las contribuciones del Capítulo 2 se recogen parcialmente en:

- [] P. Díez and G. Calderón, *Goal Oriented Adaptivity for the Transient Heat Equation*. ECCOMAS 2004, proceedings 4th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering. Jyväskylä, Finland, July 2004.
- [] P. Díez and G. Calderón, *Goal-oriented error estimation for transient parabolic problems*. Sometido a revisión en *Computational Mechanics*.

► Las contribuciones del Capítulo 3 se han publicado en:

- [] G. Calderón y P. Díez, *Estima de Error Orientada al Resultado: SPR versus Técnicas de Recovery en Desplazamientos*. SEMNI 2005, proceedings VII Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería. Granada, España, Julio 2005.
- [] G. Calderón y P. Díez, *Análisis de Diferentes Estimadores de Error de Postproceso para Adaptatividad Orientada al Resultado*. Aceptado para su publicación en la *Revista internacional de Métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería*.

► Las contribuciones del Capítulo 4

- [] P. Díez and G. Calderón, *Remeshing criteria and proper error representations for goal oriented h-adaptivity*. Sometido a revisión en *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.

Capítulo 2

Estima de error en magnitudes de interés para problemas parabólicos

2.1. Introducción

El modelado de fenómenos difusivos transitorios conduce al de EDPs parabólicas. Este es el caso de la ecuación del calor, que es extensamente usada para simular el comportamiento térmico de dispositivos mecánicos y estructuras. Sin embargo, para la mayoría de los modelos parabólicos usados en la simulación de aplicaciones de la ciencia o la ingeniería no se tiene una solución exacta a la mano. La solución numérica de estos problemas se obtiene, frecuentemente, a través del MEF. En particular, en este trabajo se considera el método *Galerkin discontinuo*, $cG(1)dG(1)$, el cual está basado en una formulación de elementos finitos para las dos variables, espacio-tiempo (ver, entre otros, la monografía de Thomée [18]).

Cuando un ingeniero usa este tipo de modelo se interesa en magnitudes específicas, a menudo localizadas. Por ejemplo, en el contexto de diseño de puentes, la carga inducida por el efecto térmico puede ser la causa de una disminución significativa en el tiempo de vida útil de la estructura. Desde un punto de vista práctico, la carga térmica es caracterizada por el *gradiente de temperatura* (ver Mirambell, Aguado y Díez [65]) en una sección transversal

característica del puente. El gradiente de temperatura es un postproceso simple de la distribución de temperatura, $u(\boldsymbol{x}, T)$, en la sección transversal para un instante de tiempo T . Así, en este caso, la cantidad de interés puede ser descrita por medio de un funcional lineal $J(u)$, que depende del campo de temperaturas, u .

Debido a la resolución numérica del problema se requiere controlar la calidad de la aproximación numérica u_{H} . Esta calidad se medirá mediante el funcional lineal $J(u)$ que representa la cantidad de interés. Es decir, se quiere

$$J(e) \leq \text{TOL},$$

donde TOL es la tolerancia prescrita para el error. Este control puede lograrse mediante un proceso de adaptatividad de la malla para aproximar eficientemente esta cantidad, y el mismo se puede basar en una estimación a posteriori del error en la cantidad de interés.

La valoración del error en la cantidad de interés se realiza introduciendo un problema dual asociado al funcional lineal $J(u)$, ecuaciones (1.7) y (1.8). Estas ecuaciones dependen explícitamente de z , que representa la solución del problema dual, que es también desconocida. Así, el éxito del método depende de la exactitud con que se aproxime la solución z del problema dual.

En este capítulo se van a introducir dos enfoques (para la componente espacial) que llevarán a la definición de estimas a posteriori del error en la cantidad de interés de problemas parabólicos. En el primero, una aproximación de z es dada por un postproceso sobre la solución aproximada, z_{H} , del problema dual en la malla gruesa. Para el postproceso se siguen las ideas de Wiberg y colaboradores [46, 53]. La segunda aproximación, basada en la filosofía de los estimadores residuales, construye una solución suavizada resolviendo problemas locales de valor inicial (para problemas estacionarios ver: Ladevèze, Pelle y Rougeot [66], Díez [54] y las referencias que se citan en este trabajo). Por otro lado, en la componente temporal se utiliza un postproceso (siguiendo la idea dadas para el suavizado en la componente espacial) que toma en cuenta la propiedad de superconvergencia del método cG(1)dG(1).

El resto del capítulo se estructura de la manera siguiente: en el apartado

2.2 se introduce el problema modelo junto a su formulación variacional y la notación matemática empleada. El apartado 2.3 se dedica a desarrollar y analizar el método de elementos finitos que será empleado para resolver problemas no estacionarios de tipo parabólico (cG(q)dG(r)). En el apartado 2.4 se estudian las cantidades de interés y su problema dual asociado. La representación del error y las estimas a posteriori del mismo son dadas en la apartado 2.5 y 2.6 respectivamente. En el último apartado, se da la experimentación numérica respectiva que deja en evidencia la eficacia de las estimas propuestas en problemas transitorios.

2.2. Problema modelo, notación y formulación variacional

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \geq 1$, un dominio abierto con frontera suave $\partial\Omega$. El problema parabólico a considerar queda definido como sigue: Encontrar una función $u = u(\mathbf{x}, t)$, con $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$ y $t \in I = (0, T)$ tal que:

$$c \partial_t u(\mathbf{x}, t) - \nabla \cdot (\alpha \nabla u) = f \quad \text{en } \Omega \times I \quad (2.1a)$$

$$u(\mathbf{x}, t = 0) = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{para } \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.1b)$$

$$u(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{parar } \mathbf{x} \in \partial\Omega, t \in I \quad (2.1c)$$

donde el término fuente $f : \Omega \times I \rightarrow \mathbb{R}$ y el valor inicial u_0 son funciones suaves y conocidas, α representa la conductividad térmica del medio y c su capacidad calorífica; $\partial_t u$ denota $\partial u / \partial t$. En (2.1c) se toma una condición de frontera homogénea de Dirichlet para facilitar la presentación. Condiciones de contorno de diferente tipos como Dirichlet no-homogéneas, Neumann o Robin, no introducen dificultades adicionales al problema. De hecho, en uno de los ejemplos se trabaja con condiciones de contorno de Robin. El modelo (2.1), conocido como *ecuación del calor*, describe la evolución en el tiempo de la temperatura u de un medio homogéneo e isótropo contenido en $\bar{\Omega}$ y bajo una fuente externa de calor f . En cuanto a la existencia, unicidad y comportamiento cualitativo de la solución de (2.1) se puede ver, entre otros, Henry [67].

Para fijar la nomenclatura usada en la formulación variacional de ecuaciones diferenciales se definen, siguiendo la notación estándar, los espacios de Hilbert

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^2(\Omega) &:= \left\{ \varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ tal que } \varphi \text{ es medible y } \int_{\Omega} |\varphi|^2 dx < \infty \right\}, \\ \mathbf{H}^1(\Omega) &:= \left\{ \varphi \in \mathbf{L}^2(\Omega) : \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \in \mathbf{L}^2(\Omega), \quad i = 1, \dots, d \right\},\end{aligned}$$

dotados del correspondiente producto interno y norma

$$\begin{aligned}(u, v)_{\mathbf{L}^2(\Omega)} &:= \int_{\Omega} uv d\Omega & \|\cdot\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} &:= (\cdot, \cdot)_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^{1/2} \\ (u, v)_{\mathbf{H}^1(\Omega)} &:= \int_{\Omega} [uv + \nabla u \cdot \nabla v] d\Omega & \|\cdot\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)} &:= (\cdot, \cdot)_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^{1/2}.\end{aligned}$$

Además, se define el espacio

$$\mathbf{H}_0^1(\Omega) := \left\{ \varphi \in \mathbf{H}^1(\Omega) : \varphi = 0 \text{ en } \partial\Omega \right\},$$

que se dota del mismo producto interno y norma que $\mathbf{H}^1(\Omega)$. Para evitar sobrecargar la notación, siempre y cuando no se lleve a confusión, se utilizará la notación (\cdot, \cdot) y $\|\cdot\|$ en lugar de $(\cdot, \cdot)_{\mathbf{L}^2(\Omega)}$ y $\|\cdot\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}$. De forma análoga, $(\cdot, \cdot)_1$ y $\|\cdot\|_1$ serán usados para denotar $(\cdot, \cdot)_{\mathbf{H}^1(\Omega)}$ y $\|\cdot\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}$ respectivamente.

Para dar la formulación variacional o forma débil asociada al problema (2.1) se define, a partir de estos espacios, el espacio

$$\mathbf{V} := \left\{ v : \Omega \times I \rightarrow \mathbb{R} \mid \forall t \in I \quad v(\cdot, t) \in \mathbf{H}_0^1(\Omega) \text{ y } \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad v(\mathbf{x}, \cdot) \in \mathbf{L}^2(I) \right\}.$$

Así, al multiplicar (2.1) por una función $v \in \mathbf{V}$ e integrando sobre la región espacio-tiempo $S := \Omega \times I$ se tiene

$$c \int_I (u_t, v) dt + \alpha \int_I (\nabla u, \nabla v) dt = \int_I (f, v) dt \quad \forall v \in \mathbf{V}, \quad (2.2)$$

donde $u_t \stackrel{not}{=} \dot{u} \stackrel{not}{=} \partial_t u$ y para simplificar la escritura se ha supuesto que c y α son independientes de x y t (salen fuera de la integral). Integrando por partes la primera integral del lado izquierdo de (2.2), resulta la *forma débil o formulación variacional* de (2.1) dada por

$$\begin{aligned}
(u(\cdot, T), v(\cdot, T)) - \int_0^T (u, v_t) dt + \alpha_1 \int_0^T (\nabla u, \nabla v) dt = \\
c^{-1} \int_0^T (f, v) dt + (u_0, v^0), \quad \forall v \in \mathbf{V},
\end{aligned} \tag{2.3}$$

donde $\alpha_1 = \alpha/c$ y $u_0 \stackrel{\text{not}}{=} u^0 = u(\cdot, 0)$ (condición inicial de (2.1)).

2.3. MEF Galerkin Discontinuo (en tiempo)

En esta sección se deduce el método de elementos finitos *Galerkin discontinuo* $cG(q)dG(r)$, para la formulación variacional (2.3) del problema parabólico (2.1). El mismo está basado en una formulación de elementos finitos para la discretización de las variables espacial y temporal. La notación $cG(q)dG(r)$ viene del hecho que el método resulta continuo (MEF estándar) y de orden q en la componente espacial “ $cG(q)$ ” mientras en la componente temporal puede ser discontinuo y de orden r “ $dG(r)$ ”.

2.3.1. Discretización espacial

La parte espacial del problema (2.1) es discretizada usando la teoría habitual del MEF. La discretización está asociada con una malla de tamaño característico H , que induce el espacio funcional finito $\mathbf{V}_H \subset \mathbf{H}_0^1(\Omega)$. La dependencia en el tiempo queda dada por los coeficientes (incógnitas nodales) de u_H en la base asociada a la discretización espacial:

$$u(\mathbf{x}, t) \approx u_H(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} u_i(t) N_i(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^T \mathbf{N}, \tag{2.4}$$

siendo n_{poin} el número de nodos en la malla de EF para la discretización de Ω , $\mathbf{u} := [u_1(t) \ u_2(t) \ \cdots \ u_{n_{\text{poin}}}(t)]^T$ y $\mathbf{N} := [N_1(\mathbf{x}) \ N_2(\mathbf{x}) \ \cdots \ N_{n_{\text{poin}}}(\mathbf{x})]^T$.

Así, una forma semidiscreta es obtenida: para cada instante t encontrar

$u_{\text{H}}(t) \in \mathbf{V}_{\text{H}}$ tal que

$$\begin{aligned} c(\dot{u}_{\text{H}}(t), v) + a(u_{\text{H}}(t), v) &= L(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\text{H}} \\ (u_{\text{H}}(0), v) &= (u_0, v), \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde

$$a(u, v) := \int_{\Omega} \alpha \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega \quad L(v) := \int_{\Omega} f v \, d\Omega$$

El sistema de EDOs (2.5) es un problema de valor inicial (PVI) para la variable temporal. La ecuación (2.5) puede ser escrita en forma matricial como:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad (2.6)$$

donde \mathbf{M} es una matriz de masa o capacidad, que representa la forma discreta del producto interno (\cdot, \cdot) en la base de \mathbf{V}_{H} , \mathbf{K} es la matriz de rigidez o conductividad discretizando $a(\cdot, \cdot)$ y \mathbf{f} es un vector de fuerza, que es la representación discreta de $L(v)$.

La forma más común de resolver (2.5) ó (2.6) consiste en introducir una discretización en el tiempo $\{t_0, t_1, \dots, t_N\}$ y usar cualquier esquema de integración, por ejemplo mediante el método de Crank-Nicolson o la Regla del Punto Medio Generalizada, para obtener la aproximación de $\mathbf{u}(t_n) \approx \mathbf{u}^n$ en $n = 0, 1, \dots, N$. Sin embargo, esta forma de integración presenta la dificultad de no contar con una representación variacional del problema en la variable temporal. Pues, para introducir correctamente el error en la cantidad de interés, la discretización en el tiempo debe ser derivada a partir de una forma variacional. En este tipo de problema es el Método de Galerkin discontinuo el que se adopta normalmente para satisfacer estos requerimientos.

2.3.2. Discretización en el tiempo

Para la discretización total de (2.3) supongamos que $\Omega \subset \mathbb{R}$ (es decir, $d = 1$) y $t \in I = [0, T]$. Sea $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$ una partición de I en N subintervalos $\{I_n := (t_{n-1}, t_n]\}_{n=1}^N$ de longitud $\Delta t_n := t_n - t_{n-1}$ (pasos de tiempo) no necesariamente homogénea; es más, $\Delta t := \max_n \Delta t_n$ denotará el paso de tiempo característico de la malla temporal y, el rectángulo $S^n := \Omega \times I_n$

será llamado *nivel n* espacio-tiempo. En cada nivel S^n se considera la partición $\mathbb{T}_{H,\Delta t_n}$ de Ω en $m(n)$ subintervalos (elementos) $K_j^n = [x_j^n, x_{j+1}^n]$, con $j = 0, \dots, m(n) - 1$. Se denota con $H_j^n = x_{j+1}^n - x_j^n$ y $H^n = \max_j H_j^n$ el tamaño de elemento y el tamaño característico en el nivel S^n , y por $H = \max_n H^n$; para $d > 1$, K_j^n es un elemento y H_j^n su tamaño (diámetro).

Se asocia ahora con S^n una partición espacio-tiempo $S^n = \cup_{j=1}^{m^n} S_j^n$ donde $S_j^n = K_j^n \times I_n$ y $K_j^n \in \mathbb{T}_{H,\Delta t_n}$ (ver Figura 2.1). Para cada nivel S^n se introduce

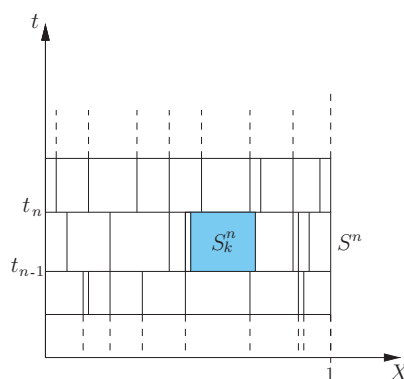


Figura 2.1: Discretización espacio-tiempo

el espacio de elementos finitos espacio-tiempo

$$\mathcal{P}_{qr}(S^n) := \left\{ v \in C^0(S^n) : v \Big|_{S_j^n} \in \mathbb{P}_q(K_j^n) \times \mathbb{P}_r(I_n), \quad j = 0, \dots, m^n - 1 \right\}$$

donde, usualmente $q = 1, 2$; $r = 0, 1$ y \mathbb{P}_p denota el espacio de todos los polinomios de grado $\leq p$. Entonces el espacio de elementos finitos espacio-tiempo sobre $\Omega \times I$ se define como sigue

$$\mathbf{V}_{H,\Delta t} := \left\{ v : \Omega \times I \rightarrow \mathbb{R} : v \Big|_{S^n} \in \mathcal{P}_{qr}(S^n) \text{ y } v \Big|_{\partial\Omega} = 0 \quad \forall t \in I_n, \quad n = 1 : N \right\}.$$

Desde un punto de vista práctico, tomar $u_H \in \mathbf{V}_{H,\Delta t}$ es equivalente a seleccionar los coeficientes u_i de la ecuación (2.4).

El número de grados de libertad de $\mathbf{V}_{H,\Delta t}$ es igual a $(q+1)(r+1)(m(n)-1)$. Las funciones en $\mathbf{V}_{H,\Delta t}$ son de orden q y continuas en espacio, mientras en el tiempo son polinomios de grado r y no necesariamente continuas. En general, estas funciones son discontinuas a saltos en cada nivel de tiempo t_n

y la partición $\mathbb{T}_{\mathbf{H},\Delta t_n}$ puede no ser igual en cada nivel de tiempo (ver Figura (2.1)). Para considerar esta característica se introduce la notación

$$u_{\mathbf{H}}^{n+} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_{\mathbf{H}}(\cdot, t_n + |\varepsilon|), \quad u_{\mathbf{H}}^{n-} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_{\mathbf{H}}(\cdot, t_n - |\varepsilon|), \quad \llbracket u_{\mathbf{H}} \rrbracket_n := u_{\mathbf{H}}^{n+} - u_{\mathbf{H}}^{n-},$$

donde $\llbracket u_{\mathbf{H}} \rrbracket_n$ denota el salto de $u_{\mathbf{H}}$ en t_n . Para $n = 0$, el valor de $u_{\mathbf{H}}$ en t_{0-} es reemplazado por la condición inicial dada en (2.1b). Además, siempre y cuando no conduzca a ninguna contradicción, se usará la notación $u_{\mathbf{H}}(\cdot, \cdot)$ (en lugar de $u_{\mathbf{H},\Delta t}(\cdot, \cdot)$) para definir la solución de elementos finitos en el espacio $\mathbf{V}_{\mathbf{H},\Delta t}$, y $u_{\mathbf{H}}^n = u_{\mathbf{H}}^{n-} := u_{\mathbf{H},\Delta t}(\mathbf{x}, t_n)$ denotará la solución en el nodo temporal n .

Reemplazando u en la formulación débil (2.3) por una función $u_{\mathbf{H}} \in \mathbf{V}_{\mathbf{H},\Delta t}$ e integrando por partes, en cada I_n , la primera integral de (2.3), se obtiene

$$\begin{aligned} (u_{\mathbf{H}}^N, v^N) - \int_{\Omega} \sum_{n=1}^N \left[u_{\mathbf{H}}^{n-} v^n - u_{\mathbf{H}}^{(n-1)+} v^{(n-1)} - \int_{t_{n-1}+}^{t_n} \dot{u}_{\mathbf{H}} v dt \right] d\Omega \\ + \alpha_1 \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}+}^{t_n} (\nabla u_{\mathbf{H}}, \nabla v) dt = (u_0, v^0) + c^{-1} \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}+}^{t_n} (f, v) dt. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Los dos primeros términos de la integración por partes en (2.7) se puede simplificar

$$\sum_{n=1}^N \left[u_{\mathbf{H}}^{n-} v^n - u_{\mathbf{H}}^{(n-1)+} v^{(n-1)} \right] = u_{\mathbf{H}}^{N-} v^N - u_{\mathbf{H}}^{0+} v^0 - \sum_{n=2}^N \llbracket u_{\mathbf{H}} \rrbracket_{n-1} v^{n-1}.$$

Así pues, observando que $u_{\mathbf{H}}^{N-} = u_{\mathbf{H}}^N$ y $u_0 = u_{\mathbf{H}}^{0-}$, el método cG(q)dG(r) para (2.3) puede ahora ser formulado a partir de (2.7) como sigue:

$$\begin{aligned} \text{Encontrar } u_{\mathbf{H}} \in \mathbf{V}_{\mathbf{H},\Delta t} \text{ tal que} \\ B_N(u_{\mathbf{H}}, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\mathbf{H},\Delta t}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde la forma bilineal $B_N : \mathbf{V}_{\mathbf{H},\Delta t} \times \mathbf{V}_{\mathbf{H},\Delta t} \longrightarrow \mathbb{R}$ y la forma lineal $L : \mathbf{V}_{\mathbf{H},\Delta t} \longrightarrow \mathbb{R}$ quedan definidas por:

$$\begin{aligned} B_N(u_{\mathbf{H}}, v) := \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}+}^{t_n} \left\{ (\dot{u}_{\mathbf{H}}, v) + \alpha_1 (\nabla u_{\mathbf{H}}, \nabla v) \right\} dt + \\ \sum_{n=2}^N (\llbracket u_{\mathbf{H}} \rrbracket_{n-1}, v^{(n-1)+}) + (u_{\mathbf{H}}^{0+}, v^{0+}), \end{aligned} \quad (2.9)$$

y

$$L(v) := (u_0, v^{0+}) + c^{-1} \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, v) dt. \quad (2.10)$$

La característica de espacio roto de $\mathbf{V}_{H, \Delta t}$ (discontinuo en todo t_n) permite desacoplar el cálculo de u_H en cada nivel de tiempo. Una vez que u_H es conocido en t_{n-1}^- , este valor se toma como condición inicial para el nivel de tiempo S^n y pidiendo que v se anule fuera del nivel S^n la ecuación (2.8) se formula como sigue:

Para $n = 1, 2, \dots, N$, dado $u_H^{(n-1)-}$, encontrar $u_H|_{S^n} \in \mathcal{P}_{qr}(S^n)$
tal que $\forall v \in \mathcal{P}_{qr}(S^n)$

$$\int_{t_{n-1}^+}^{t_n} \left\{ (\dot{u}_H, v) + \alpha_1 (\nabla u_H, \nabla v) \right\} dt + (u_H^{(n-1)+}, v^{(n-1)+}) \quad (2.11)$$

$$= (u_H^{(n-1)-}, v^{(n-1)+}) + c^{-1} \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, v) dt$$

$$u_H^{0-} = u_0 \quad \text{condición inicial.}$$

Para construir la ecuación algebraica para la solución u_H es necesario expandir (2.11) sobre una base espacio-tiempo. La función base espacio-tiempo $\varphi_{jl}^n(x, t)$ puede escribirse como

$$\varphi_{jl}^n(x, t) := \varphi_j^n(x) \psi_l(t), \quad j = 1, \dots, m^n - 1, \quad l = 0, \dots, r,$$

donde φ_j^n son las funciones base usuales de problemas estacionarios y ψ_l las l funciones base de $\mathbb{P}_r(I_n)$.

Observación 1 MEF $cG(q)dG(1)$. En el caso de $r = 1$, la solución es lineal a trozos en el tiempo. Para cada S^n , se define

$$u_H(\cdot, t) := U_0 + \left(\frac{t - t_{n-1}}{k_n} \right) U_1, \quad \text{con } U_0, U_1 \in \mathbf{V}_H.$$

Así, para cada nivel S^n el método $cG(q)dG(1)$ requiere resolver el sistema lineal por bloques

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_n + \Delta t_n \mathbf{A}_n & \mathbf{M}_n + \frac{1}{2} \Delta t_n \mathbf{A}_n \\ \frac{1}{2} \Delta t_n \mathbf{A}_n & \frac{1}{2} \mathbf{M}_n + \frac{1}{3} \Delta t_n \mathbf{A}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_0 \\ \mathbf{U}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{n-1,n} u_H^{(n-1)-} + \mathbf{F}_n \\ \frac{1}{\Delta t_n} \mathbf{G}_n \end{bmatrix},$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_n &= (a_{ij}) = \alpha_1 \int_{\Omega} \nabla \varphi_i^n \cdot \nabla \varphi_j^n \, d\Omega & \mathbf{M}_n &= (m_{ij}) = \int_{\Omega} \varphi_i^n \varphi_j^n \, d\Omega \\ \mathbf{F}_n &= (F_i) = c^{-1} \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, \varphi_i^n) dt & \mathbf{B}_{n-1,n} &= (b_{ij}) = \int_{\Omega} \varphi_i^{n-1} \varphi_j^n \, d\Omega \\ \mathbf{G}_n &= (G_i(t)) = c^{-1} \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (t - t_{n-1}) (f(\cdot, t), \varphi_j^n) dt, \end{aligned}$$

■

Observación 2 Una deducción detallada del MEF $cG(q)dG(0)$ y $cG(q)dG(1)$ se encuentra en el **Apéndice A** de este trabajo. ■

2.3.3. Solución exacta y de referencia

La solución exacta u es continua a lo largo del tiempo y por lo tanto el término de salto en el tiempo se anula. Consecuentemente, la forma bilineal $B_N(\cdot, \cdot)$ es la versión discreta de

$$B := (u^T, v^T) - \int_0^T (u, \dot{v}) dt + \alpha_1 \int_0^T (\nabla u, \nabla v) dt, \quad \forall v \in \mathbf{V}.$$

y (2.8) es la versión discreta de

$$B(u, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}. \quad (2.12)$$

Debido a esto, se tiene para el error $e := u - u_H$ la propiedad de *ortogonalidad de Galerkin*

$$B_N(e, v) = 0 \quad \forall v \in \mathbf{V}_{H, \Delta t}. \quad (2.13)$$

Desde un punto de vista práctico, los planteamientos de estima de error son formulados en la base de una solución de referencia, mucho más cerca de u que la solución aproximada u_H . En lo que resta de este trabajo se utiliza una solución de referencia u_h asociada a una malla fina, caracterizada en el espacio con un tamaño de elemento h y un paso δt en el tiempo. Se asume que $h \ll H$ y $\delta t \ll \Delta t$. La malla de referencia es denotada como $0 = \hat{t}_0 < \hat{t}_1 < \dots < \hat{t}_n < \dots < \hat{t}_{\hat{N}} = T$ con subintervalos $\{\hat{I}_n := (\hat{t}_{n-1}, \hat{t}_n)\}_{n=1}^{\hat{N}}$ de longitud

$\delta t_n = \hat{t}_n - \hat{t}_{n-1}$. El correspondiente espacio de funciones será denotado con $\mathbf{V}_{h,\delta t}$. Así, la solución de referencia $u_h \in \mathbf{V}_{h,\delta t}$ es tal que

$$B_{\hat{N}}(u_h, v) = L(v) \quad \forall v \in \mathbf{V}_{h,\delta t}. \quad (2.14)$$

donde la definición de $B_{\hat{N}}(\cdot, \cdot)$ debe ser adaptada a la nueva discretización

$$B_{\hat{N}}(u_h, v) := \sum_{n=1}^{\hat{N}} \int_{\hat{I}_n} \left\{ (\dot{u}_h, v) + \alpha_1(\nabla u_h, \nabla v) \right\} dt + \sum_{n=2}^{\hat{N}} (\llbracket u_h \rrbracket_{n-1}, v^{(n-1)+}) + (u_h^{0+}, v^{0+}), \quad (2.15)$$

Usualmente, la malla de referencia en el tiempo, es tomada como un refinamiento de la malla de tiempo original. Esto es, para todo $n = 0, 1, 2, \dots, N$ existe un \hat{n} tal que $t_n = \hat{t}_{\hat{n}}$. En este caso, la definición de $B_{\hat{N}}(\cdot, \cdot)$ introducida en (2.9) es un caso particular de la definida en (2.15) (coinciden para cualquier función de $\mathbf{V}_{H,\Delta t}$, puesto que todos los saltos de la malla grosera están también en la malla fina).

2.3.4. Convergencia del MEF cG(q)dG(r).

Este apartado está dedicado a la propiedad de convergencia del MEF cG(q)dG(r). Sin embargo, no nos detendremos en el desarrollo de las demostraciones y se remite al lector a las referencias dadas. Llevar a cabo dichas demostraciones hacen necesaria la presentación de un gran volumen de herramientas y resultados matemáticos que nos desviarían, sin lugar a duda, del objetivo en cuestión. No obstante, los resultados obtenidos de dichos teoremas serán de vital importancia al momento de formular las estimas a posteriori del error que se presentan en este capítulo.

Los resultados que se enuncian usan la notación:

$$\|\varphi\|_{0,I_n} = \sup_{t \in I_n} \|\varphi\| \quad \|\varphi\|_{q,I_n} = \sup_{t \in I_n} \|\varphi\|_q,$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma en \mathbf{L}^2 definida previamente y $\|\cdot\|_q$ es la norma de $\mathbf{H}^q = \mathbf{H}^q(\Omega)$.

Teorema 1 Sea $\Delta t_{n+1}/\Delta t_n \geq c > 0$ para $n \geq 0$, $r = 0, 1$ y $u_0 = \Pi_{\mathbb{H}}u_0$ en el discreto. Entonces se tiene para las soluciones de (2.1) y (2.8) que

$$\|u_{\mathbb{H}}^N - u(\cdot, t_N)\| \leq CL_N \max_{n \leq N} (h^q \|u\|_{q, I_n} + \Delta t_n^{2r+1} \|u^{(r+1)}\|_{2r, I_n}),$$

donde $L_N := \left(\log \frac{t_N}{\Delta t_N}\right)^{1/2} + 1$ y $u^{(l)} := \left(\frac{d}{dt}\right)^l u$

Prueba: Se sigue a partir de las pruebas dadas para los teoremas 12.6 y 12.7 del capítulo 12 de en [18]. ■

Para el caso de la variable temporal, el resultado anterior sólo concierne al error en los valores nodales de la malla temporal. Se pueden derivar resultados para tomar el interior de I_n , como se sigue en el siguiente teorema.

Teorema 2 Se tiene para las soluciones de (2.1) y (2.8), con $r \geq 0$ y $1 \leq n \leq N$, que:

$$\|u_{\mathbb{H}} - u\|_{0, I_n} \leq \|u_{\mathbb{H}}^n - u(\cdot, t_n)\| + C \|u_{\mathbb{H}}^{n-1} - u(\cdot, t_{n-1})\| + C \Delta t_n^{r+1} \|u^{(r+1)}\|_{0, I_n}.$$

Prueba: Teorema 12.2 de en [18]. ■

De los resultados anteriores se puede concluir:

- En la variable espacial el orden de convergencia (elementos lineales) es $\mathcal{O}(H^2)$.
- La convergencia global en t es $\mathcal{O}(\Delta t)$ para el $\text{cG}(q)\text{dG}(0)$ y de orden $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ para el $\text{cG}(q)\text{dG}(1)$.
- En los valores nodales de la variable temporal el $\text{cG}(q)\text{dG}(1)$ presenta la propiedad de superconvergencia, orden $\mathcal{O}(\Delta t^3)$, mientras el $\text{cG}(q)\text{dG}(0)$ sigue manteniendo el orden uno.

Para ilustrar las propiedades de convergencia del $\text{cG}(q)\text{dG}(r)$ se define para el problema modelo (2.1) el siguiente ejemplo: para $\Omega = (0, 1)$; $I = (0, 0.5]$ y $\alpha = c = 1$ se toma el término fuente f tal que la solución exacta esté

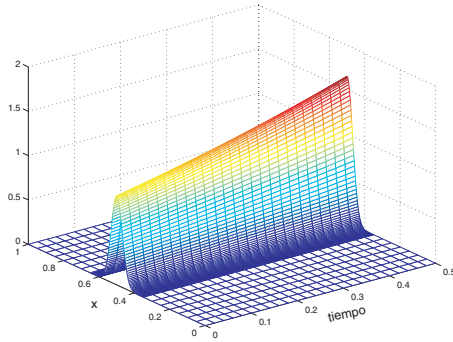


Figura A

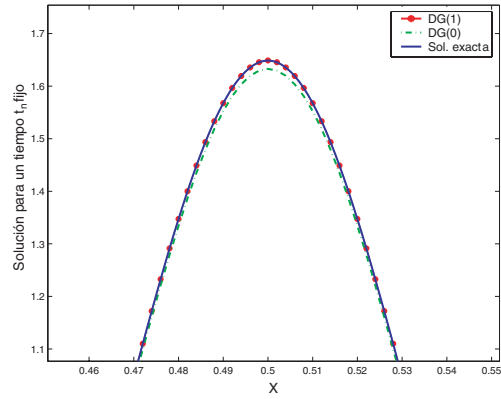


Figura B

Figura 2.2: La Figura A muestra la solución numérica del ejemplo usando cG(1)dG(1) con una malla no uniforme de 164 elementos y un paso temporal constante $\Delta t_n = 0.02$. La ampliación de la solución dada en la Figura B para el tiempo final $t_N = 0.5$ deja ver la mejor convergencia para el cG(1)dG(1) sobre el cG(1)dG(0).

dada por $u(x, t) = \exp(-500(x - 0.5)^2 + t) \sin(\pi x)$. En la Figura 2.2.A se da la solución numérica u_H para una malla espacial no homogénea de 164 elementos y Δt uniforme. La Figura 2.2.B es una ampliación de la solución, para cG(1)dG(0) y cG(1)dG(1), alrededor de la coordenada $x_m = 0.5$ y para el tiempo final $t_N = 0.5$. La Figura (2.3A) contiene la gráfica del logaritmo de error, $\log_{10} \|\text{error}\|_{L^2}$, como función de h para cG(1)dG(0) y cG(1)dG(1) aplicados al problema test. De forma análoga la Figura (2.3B) muestra la gráfica del logaritmo de error como función de t . En el caso de cG(1)dG(1) se tiene una tasa de convergencia cúbica (superconvergencia) en el tiempo, como se esperaba a partir de los resultados teóricos.

Problema local

Una propiedad que reviste interés para el cálculo de estimas, es la precisión de la solución numérica u_H en el nodo final de $I_n = (t_{n-1}, t_n]$ (ver Figura 2.4 y Teorema 1). Pues, al suponer que la solución u_H^{n-1-} , en I_{n-1} , es “exacta” se puede definir un problema local para (2.1) en el intervalo I_n usando u_H^{n-1-} como condición inicial. Este hecho será aplicado al momento de definir una es-

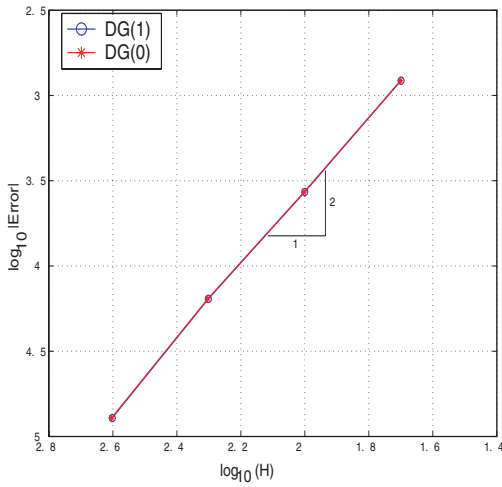


Figura A

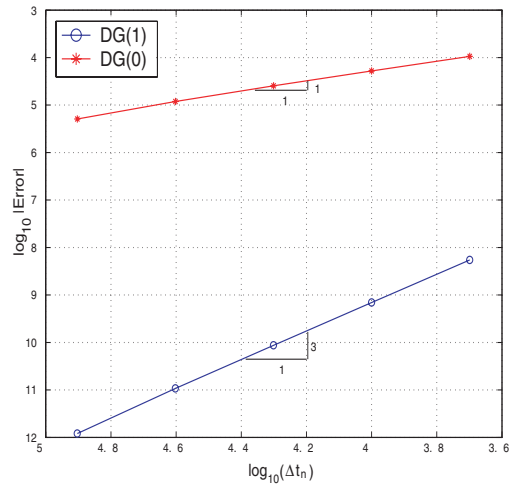


Figura B

Figura 2.3: Gráficas del $\log_{10} \|\text{error}\|_{L^2}$ como función de H y Δt para el problema test. Figura A: Convergencia para $cG(1)dG(r)$ con Δt_n constante y $H \rightarrow 0$. Figura B: Convergencia para $cG(1)dG(r)$ con H constante y $\Delta t_n \rightarrow 0$

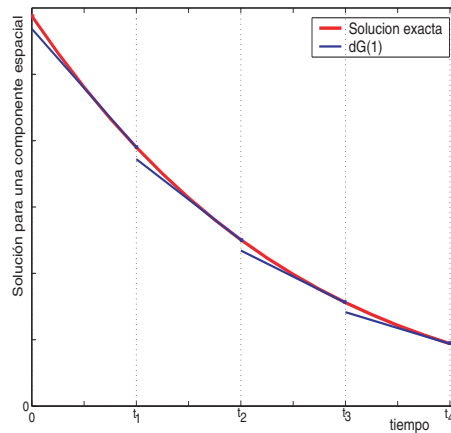


Figura 2.4: Comportamiento de la solución numérica calculada con $cG(1)dG(1)$ para una componente espacial.

tima tipo residual para la aproximación del problema dual, z . Una justificación más detallada de esta propiedad está dada en el **Apéndice A**.

2.4. Cantidades de interés y problema dual asociado

Nuestra meta es determinar el error en una cierta cantidad de interés. Nos restringiremos a las salidas funcionales de la forma

$$J(u) = (j, u(\cdot, T)), \quad (2.16)$$

es decir, se tiene interés en una cantidad que depende de la solución en el último instante de tiempo, $t = T$. La función j en (2.16) pertenece a $\mathbf{L}^2(\Omega)$ y está dada por la representación de Riesz de funcionales lineales.

Alternativamente, es posible considerar una cantidad de interés que necesite información de la solución a lo largo del tiempo, normalmente puede estar dada por:

$$J(u) = \int_I w(t)(j, u(\cdot, t)) dt, \quad (2.17)$$

donde $w(t)$ es una función de peso que promedia las contribuciones de cada instante a la cantidad de interés. En este trabajo, se consideran cantidades de interés como la descrita en (2.16). Sin embargo, la generalización dada por (2.17) no introduce ninguna dificultad adicional.

Así, con el fin de estudiar estimadores de error a posteriori orientados a controlar el error cometido al evaluar un funcional lineal de interés $J(\cdot)$, en la solución de elementos finitos u_H , se define el *problema dual o adjunto*:

<p>Encontrar $z \in \mathbf{V}$ tal que</p> $B(\varphi, z) = J(\varphi) \quad \forall \varphi \in \mathbf{V},$	(2.18)
---	--------

donde $B(\varphi, z)$ es definida por el término de la izquierda de (2.3)

$$B(\varphi, z) := (\varphi^N, z^N) - \int_0^{t_N} (\varphi, \dot{z}) dt + \alpha_1 \int_0^{t_N} (\nabla \varphi, \nabla z) dt. \quad (2.19)$$

Al definir $J(\varphi) := (\varphi^N, j)$ es fácil ver que la forma fuerte del problema débil (2.18) está dada por:

$$c \partial_t z(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot (\alpha \nabla z) = 0 \quad \text{en } \Omega \times I \quad (2.20a)$$

$$z(\mathbf{x}, t = T) = j(\mathbf{x}) \quad \text{para } \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.20b)$$

$$z(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{parar } \mathbf{x} \in \partial\Omega, t \in I \quad (2.20c)$$

La condición inicial (2.20b) del problema dual está dada en $t = T$. La integración en el tiempo debe realizarse por consiguiente hacia atrás. Sin embargo, el problema resulta física y matemáticamente legítimo debido a que el signo del término de difusión, $\nabla \cdot (\alpha \nabla z)$, ha cambiado con respecto al problema original (2.1).

Observación 3 *El costo computacional de aproximar z es el mismo que el de aproximar (2.1). Pues, al definir el cambio de variable $t = -t$ en (2.20) se obtiene un problema del mismo tipo del problema primal.* ■

Al aplicar integración por partes en (2.9) se obtiene que la forma bilineal $B_N(u_H, \varphi)$ puede representarse como

$$B_N(u_H, v) := \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} \left\{ -(u_H, \dot{v}) + \alpha_1 (\nabla u_H, \nabla v) \right\} dt - \sum_{n=2}^N (u_H, \llbracket v \rrbracket_{n-1}) + (u_H^N, v^N). \quad (2.21)$$

Como resultado de esto está claro que el análogo discreto de (2.18) ó (2.20) puede definirse como:

Encontrar $z_H \in \mathbf{V}_{H, \Delta t}$ tal que

$$B_N(\varphi, z_H) = (\varphi^N, j) \quad \forall \varphi \in \mathbf{V}_{H, \Delta t},$$

(2.22)

De lo cual se puede concluir, nuevamente, la propiedad de ortogonalidad de Galerkin

$$B_N(\varphi, \varepsilon) = 0 \quad \forall \varphi \in \mathbf{V}_{H, \Delta t},$$

con $\varepsilon := z - z_{\text{H}}$ el error en el problema dual.

Ejemplos de cantidades de interés y de problemas duales bien planteados. En general, se supone que el problema dual (2.18) está bien planteado y posee una única solución. En lo que sigue, se dan, en forma de ejemplo, funcionales para los que el problema dual resulta bien planteado, o en su contrario se puede hacer una regularización de la función j (ver (2.16)) para eliminar las singularidades que puede presentar la solución del problema dual resultante:

1. *Valor medio:* Sea ψ una función de peso en $\mathbf{L}^2(\Omega)$. Se considera

$$J(u) := \int_{\Omega} u(\cdot, t_N) \psi d\Omega.$$

En este caso, z es la solución del problema dual (2.20) con $j(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x})$.

2. *Valor puntual:* Se considera la cantidad dada por el funcional

$$J(u) := u(\mathbf{x}_0, t_N),$$

que representa el valor (desplazamiento / temperatura) de la solución en un punto \mathbf{x}_0 del dominio Ω ; queda claro que $j(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ denota una δ -distribución en el punto \mathbf{x}_0 con la propiedad

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

Para que la solución del problema dual no presente singularidades, se suaviza la función j . Esto significa que en lugar del valor de u en \mathbf{x}_0 , se toma un promedio local de la solución alrededor de \mathbf{x}_0 . Esto es:

$$J(u) := \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, t_N) \omega_{\varepsilon}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) d\Omega.$$

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

$$\omega_{\varepsilon}(\mathbf{x}) := \begin{cases} C \exp\left(\frac{-\varepsilon^2}{\varepsilon^2 - |\mathbf{x}|^2}\right) & \text{si } |\mathbf{x}| < \varepsilon, \\ 0 & \text{si } |\mathbf{x}| \geq \varepsilon, \end{cases}$$

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

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

2.5. Representación del error

El objetivo de esta sección es el de definir la representación del error que surge a partir de la cantidad de interés y su problema dual asociado.

2.5.1. Ecuación primal del error

Al sustituir u por $e + u_{\text{H}}$ en (2.12), resulta la siguiente ecuación débil para el error: encontrar $e \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(e, v) = L(v) - B_N(u_{\text{H}}, v) =: \mathcal{R}^{\text{P}}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}, \quad (2.23)$$

donde $\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)$ se define como el *residuo débil* asociado a la solución u_{H} del problema primal. Usando (2.9) y (2.10) se deduce la siguiente expresión para $\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\text{P}}(v) = \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} \left\{ (c^{-1}f - \dot{u}_{\text{H}}, v) - \alpha_1(\nabla u_{\text{H}}, \nabla v) \right\} dt + \\ + (\llbracket u_{\text{H}} \rrbracket_{n-1}, v^{(n-1)}), \end{aligned} \quad (2.24)$$

donde, para cualquier $v \in \mathbf{V}$, $\mathcal{R}^{\text{P}}(v)$ se puede calcular explícitamente ya que u_{H} es conocida.

Del resultado de ortogonalidad de Galerkin dado por (2.13) se sigue que

$$B_N(e, v) = \mathcal{R}^{\text{P}}(v) = 0, \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\text{H}, \Delta t}. \quad (2.25)$$

Por otro lado, el *error de referencia* $e^{\text{ref}} := u_{\text{h}} - u_{\text{H}}$ es la solución de la contraparte discreta de (2.23)

$$B_N(e^{\text{ref}}, v) = \mathcal{R}^{\text{P}}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\text{h}, \delta t}, \quad (2.26)$$

Es más, la condición de ortogonalidad dada en (2.25) también se verifica para e^{ref} pues $\mathbf{V}_{\text{H}, \Delta t} \subset \mathbf{V}_{\text{h}, \delta t} \subset \mathbf{V}$.

El error global (2.23) o su forma discreta (2.26) son computacionalmente inabordables. Las estrategias de estimar el error basadas en resolver estas ecuaciones localmente (restringido a un elemento o a un patch de elementos) producen aproximaciones locales de e (o e^{ref}) que pueden ser usadas para evaluar

cantidades energéticas. Generalmente, para evaluar $J(e)$, la aproximación de e que resulta de las estimaciones habituales son insuficiente. Sin embargo, una combinación apropiada de estimas energéticas en los problemas primal y dual permite determinar el error en la cantidad de interés, $J(e)$ o $J(e^{\text{ref}})$.

2.5.2. Usando z para determinar $J(e)$

La solución, z , del problema dual dado por (2.18) y (2.20) permite representar el error en la cantidad de interés usando el residuo. Pues, dado que $z \in \mathbf{V}$ se puede reemplazar v por z en (2.23) y obtener

$$B(e, z) = \mathcal{R}^P(z). \quad (2.27)$$

Por otra parte, $e \in \mathbf{V}$ y por consiguiente v puede ser reemplazada por e en (2.18), esto es,

$$B(e, z) = J(e). \quad (2.28)$$

Una representación del error se sigue de (2.27) y (2.28):

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z). \quad (2.29)$$

Esta representación nos da el error en la cantidad de interés, $J(e)$, como una función explícita de z y u_{H} . Recuerde que el residuo $\mathcal{R}^P(\cdot)$ depende de u_{H} , ver (2.24). El residuo es definido por integrales sobre $\Omega \times I$. Así, usando la representación (2.29), el error en la cantidad de interés se puede dividir fácilmente en contribuciones locales dadas para cada S_j^n (elemento espacio-tiempo).

Usando la propiedad de ortogonalidad dada por (2.25), las contribuciones locales de (2.29) pueden ser modificadas restando cualquier función de $\mathbf{V}_{\text{H},\Delta t}$, esto es

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z - v_{\text{H}}). \quad (2.30)$$

En lo que resta de este capítulo se tiene interés en usar $v_{\text{H}} = z_{\text{H}}$ o $v_{\text{H}} = \Pi_{\text{H}}z$, donde z_{H} es la aproximación de z en $\mathbf{V}_{\text{H},\Delta t}$, usando el método cG(q)dG(r), y $\Pi_{\text{H}}z$ la interpolación nodal de z en $\mathbf{V}_{\text{H},\Delta t}$. Obviamente, z y $\Pi_{\text{H}}z$ no son conocidas pero z_{H} puede ser calculada de la misma manera que u_{H} . No obstante,

una vez que z_{H} es calculada, una estimación estándar del error puede ser usada para aproximar $\varepsilon := z - z_{\text{H}}$. Se supone que la estima de ε aproximará \mathcal{R}^{P} apropiadamente ya que el cálculo de \mathcal{R}^{P} involucra sólo cantidades energéticas.

Así, la representación (2.30) del error sugiere usar un estimador de error implícito para el dual y obtener una aproximación apropiada para ε , o eventualmente, para $z - \Pi_{\text{H}}z$. Una vez, que ε o $z - \Pi_{\text{H}}z$ sean correctamente aproximados, la evaluación del error para la cantidad de interés es puramente explícita, ver (2.24) y (2.30).

El mismo análisis se aplica si la solución de referencia z_{h} , en el espacio de referencia $\mathbf{V}_{\text{h},\delta t}$, es considerada en vez de la solución z . En este caso el error a ser evaluado (en la cantidad de interés) es e^{ref} , representado por

$$J(e^{\text{ref}}) = \mathcal{R}^{\text{P}}(z_{\text{h}} - v_{\text{H}}) \quad \forall v_{\text{H}} \in \mathbf{V}_{\text{H},\Delta t}. \quad (2.31)$$

Entonces, el error de referencia, $J(e^{\text{ref}})$ es evaluado como una función de $\varepsilon^{\text{ref}} := z_{\text{h}} - z_{\text{H}}$ o $z_{\text{h}} - \Pi_{\text{H}}z_{\text{h}}$. En la siguiente sección se introducen estrategias para la estimación del error ε^{ref} y $z_{\text{h}} - \Pi_{\text{H}}z_{\text{h}}$.

2.6. Estima a posteriori del error

Según lo visto, el objetivo que se quiere es aproximar la solución del problema dual. Desde un punto de vista práctico, se desea aproximar la solución de referencia z_{h} en lugar de la solución exacta z . Obviamente, calcular z_{h} es equivalente a calcular el error de referencia, $\varepsilon^{\text{ref}} = z_{\text{h}} - z_{\text{H}}$.

El cálculo global de z_{h} para resolver la ecuación (2.18) en $\mathbf{V}_{\text{h},\delta t}$ conlleva un costo computacional prohibitivo. Los procesos de estima de error presentados en esta sección proporcionan una aproximación z^* de z , obtenida realizando cálculos locales o mediante un postproceso sobre la solución grosera z_{H} .

En esta sección se proponen dos estrategias para obtener z^* (o de forma equivalente $\varepsilon^* := z^* - z_{\text{H}}$). En la primera, z^* es obtenida por un postproceso simple de z_{H} . Un proceso de recovery es usado siguiendo las ideas de Wiberg y colaboradores [46, 53]. La segunda aproximación propuesta, está basada en

la filosofía de los estimadores tipo residual tomando condiciones de contorno locales simples (ver Díez [55]).

Realmente, debido a las suposiciones locales necesarias para el cálculo de z^* , la aproximación $z^* \approx z$ (o equivalentemente $\varepsilon^* \approx \varepsilon^{\text{ref}}$) no está satisfecha correctamente. Es decir, el error estimado no es una buena aproximación para ε^{ref} ($\varepsilon^* \not\approx \varepsilon^{\text{ref}}$). Sin embargo, en estos casos podemos garantizar que ε^* es una aproximación apropiada para $z_h - \Pi_H z_h$, es decir $z^* \approx z_h - \Pi_H z_h + z_H$. Y, esto es bastante para obtener una buena estimación para $J(\varepsilon^{\text{ref}})$.

La calidad de la estima, $\mathcal{R}^P(z^* - z_H)$, hecha sobre $J(e)$, es medida usando el cociente

$$I^{\text{eff}} := \frac{\mathcal{R}^P(z^* - z_H)}{J(e)} \times 100, \quad (2.32)$$

llamado *índice de efectividad global* o *índice de efectividad local*, en el caso que se mida sobre un elemento específico. Estos índices pueden ser usados para medir la calidad del estimador, $\mathcal{R}^P(\cdot)$, cuando se conoce el error exacto en el funcional J o una buena aproximación de éste es conocida. En la práctica, para medir I^{eff} se usa el error de referencia e^{ref} en lugar de e (es decir, en (2.32) $J(e)$ es sustituido por $J(e^{\text{ref}})$) y sobre una malla fina $h\delta t$ que en general puede estar dada con $h = H/\mathbf{n}_{\text{ref}}$ y $\delta t = \Delta t/\mathbf{n}_{\text{ref}}$, con $\mathbf{n}_{\text{ref}} = 2, 3, 4, \dots$

2.6.1. Estima usando recovery

La primera idea es construir una solución z^* en $\mathbf{V}_{h,\delta t}$ mediante un proceso de suavizado a partir de z_H y basado sólo en cálculos locales. La meta es obtener z^* tal que $z^* \approx z_h$, realce la calidad de la solución z_H .

Dado que z^* será usada para evaluar $\mathcal{R}^P(z^*)$, ver (2.24), ésta debe ser vista como un argumento del producto interno en \mathbf{L}^2 , (\cdot, \cdot) . Es decir, el recovery de flujos no es suficiente. Desde el punto de vista de la mecánica, no basta con tener el error en tensiones, es necesario contar con una aproximación de los errores en desplazamientos.

Trabajos previos sobre *recovery de desplazamientos* son dados por Wiberg y colaboradores [46, 53], donde la solución recovery se obtiene en un espacio

de elementos finitos enriquecido al usar en $\mathbf{V}_{H,\Delta t}$ un proceso de suavizado a partir de aproximaciones por mínimos cuadrados.

En este trabajo se adopta esta misma filosofía. Sin embargo, algunas particularidades del recovery presentado deben ser precisadas:

- Se asume que el espacio de referencia seleccionado es “h-refinado” en espacio y tiempo. Es decir, hay un cierto factor de refinamiento \mathbf{n}_{ref} ($\mathbf{n}_{\text{ref}} = 2, 3, 4, \dots$) tal que $h = H/\mathbf{n}_{\text{ref}}$ y $\delta t = \Delta t/\mathbf{n}_{\text{ref}}$. No se está considerando, por el momento, la posibilidad de enriquecer el espacio de referencia usando aproximaciones tipo “p”, es decir, aumentando el orden de la interpolación.
- El recovery en espacio y tiempo son procesos que se realizan de forma independiente. Sin embargo, los mismos siguen un proceso de composición. Es decir, si Φ_x define el operador de recovery en la componente espacial y Φ_t el operador recovery en la componente temporal, entonces

$$\Phi := \Phi_t \circ \Phi_x$$

definirá el recovery total espacio-tiempo.

- El recovery del espacio se realiza localmente, en parcelas de elementos (patch) centradas en cada elemento de la malla. Los valores de z_H en los nodos de la malla H son usados como entrada para definir un polinomio de mayor orden (mínimos cuadrados). Este polinomio es evaluado en los nodos de la malla de referencia, h , para definir z^* en la variable espacial.
- El recovery del tiempo también se realiza localmente, usando un patch de tres niveles de tiempo. Es decir, para determinar z^* en I_n se usa z_H en $I_{n-1} \cup I_n \cup I_{n+1}$.

Recovery en la componente espacial

El proceso de recovery en el espacio se define para una solución fija en un tiempo $t \in I$. Este proceso es usado para encontrar una aproximación $z^* \in \mathbf{V}_h$

de $z_H(\cdot, t)$. La dependencia de t se omite en lo que sigue para simplificar la presentación. Así, la idea principal, siguiendo a Wiberg [46, 53], es suavizar z_H localmente (en algún patch de elementos). Todo elemento, Ω_k , de la malla generada por $\mathbf{V}_{H,\Delta t}$ tiene asociado un patch, ω_k , de elementos formado por todos los elementos que lo rodean (ver figuras 2.5 y 3.3). El suavizado se realiza localmente, en cada patch de elementos, centrado en cada elemento de la malla.

En el caso simple del espacio 1D representado en figura 2.5, el patch de elementos involucra 4 nodos de la malla H (para el caso de elementos de frontera el patch queda dado por el elemento de frontera y los dos consecutivos a éste). En este caso un polinomio cúbico es interpolado usando los cuatro valores de z_H . Dicho polinomio es usado para fijar los valores de z^* en la malla de referencia h .

En el caso 2D, y debido a que el patch de los elementos de frontera sólo cuenta con 9 nodos, se ha decidido, por el momento, definir un polinomio cuadrático para ajustar los valores nodales de z_H en ω_k usando un criterio de mínimos cuadrados. Siguiendo la Figura 3.3, se usan los valores de z_H en los 16 nodos de ω_k (marcados con \circ) para definir un polinomio cuadrático (6 d.o.f en 2D). Una vez se tiene fijado este polinomio, se evalúa en los nodos de la malla de referencia, contenidos en Ω_k , para definir los valores nodales de z^* (nodos marcados con \bullet en la Figura 3.3). El promedio de todos los valores computados se utiliza para los nodos de la malla h implicado en diferentes patch.

Observación 4 *Para el caso 1D, los polinomios que se obtienen quedan acoplados entre sí en los nodos que definen la frontera de cada patch. En otras palabras, no es necesario promediar en los nodos de intersección de los patch. Así, en lugar de definir los valores de z^* en la malla h , se pueden definir directamente los puntos de Gauss (necesarios para la integración) de z^* en h . Esto mejora significativamente la precisión de la estima al evitar los errores de integración (ver Ejemplo 1 en la experimentación numérica). ■*

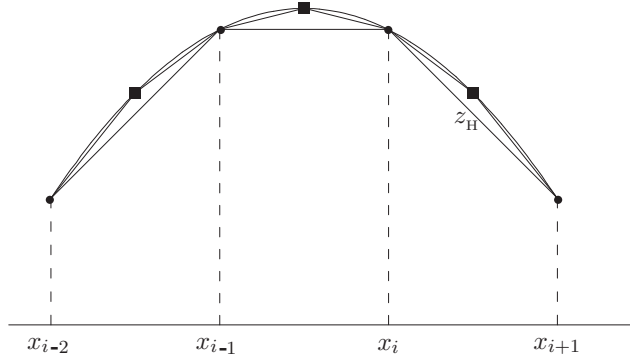


Figura 2.5: Ilustración del procedimiento de recovery del espacio en 1D. Cada elemento de la malla $]x_{i-1}, x_i[$ es asociado con un patch $]x_{i-2}, x_{i+1}[$ y los correspondientes nodos de la malla H (marcados con ●). Se hace pasar un polinomio por estos valores (nodos ●). Este polinomio se evalúa para obtener los valores realizados en la malla de referencia h (nodos marcados con ■).

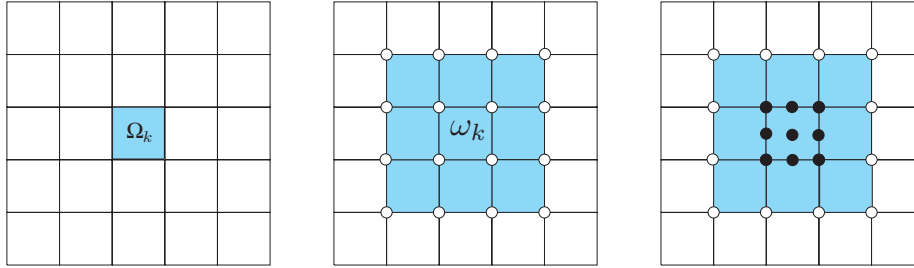


Figura 2.6: Ilustración del proceso recovery en 2D. Cada elemento de la malla Ω_k (gráfica de la izquierda) es asociado con un patch ω_k (sombreado en la gráfica del centro) y los nodos correspondientes de la malla H (marcados con ○). Un polinomio es ajustado a los valores de los nodos-○ usando un criterio de mínimos cuadrados. Este polinomio se evalúa para obtener los valores mejorados en la malla de referencia h (nodos marcados con ● en la gráfica de la derecha).

Recovery en el tiempo

El procedimiento de recovery en el tiempo se define a partir de la restricción de la solución z_H a un \mathbf{x} (fijo) del dominio espacial Ω . Consiste en construir una aproximación $z^*(\mathbf{x}, \cdot)$ en $\mathbf{V}_{h,\delta t}$ de $z_H(\mathbf{x}, \cdot)$. En lo que sigue, la dependencia de \mathbf{x} es omitida para simplificar la presentación.

La estrategia del recovery en el tiempo propuesta aquí, explota la propiedad de superconvergencia (Teoremas 1 y 2) del esquema $cG(q)dG(1)$. En las aproximaciones por $cG(q)dG(1)$ se tiene, para el nivel I_n , que la aproximación en t_{n-1+} es mucho mejor que la aproximación en t_{n-1-} (para el caso de integración hacia el pasado: problema dual). Esto es ilustrado en la Figura 2.7 (derecha).

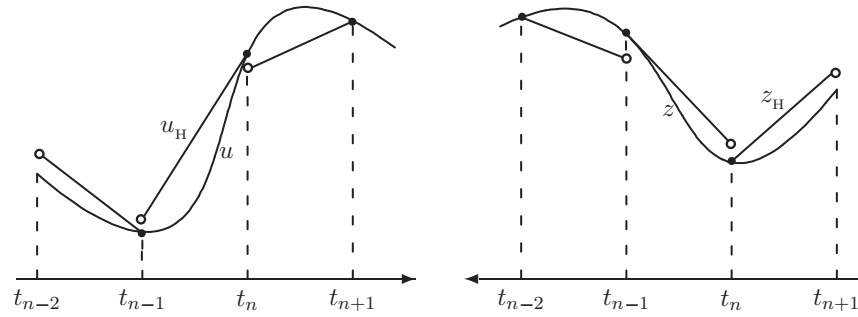


Figura 2.7: Ilustración de la propiedad de superconvergencia del cG(1)dG(1). Integración hacia adelante del problema primal (izquierda) e integración hacia el pasado del problema dual (derecha).

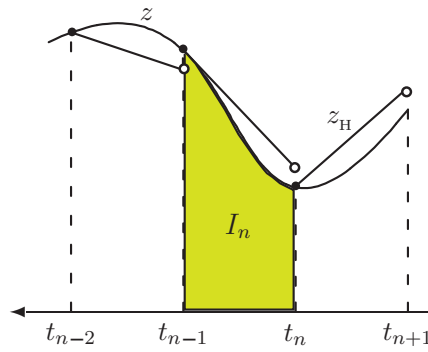


Figura 2.8: Ilustración del procedimiento de recovery para el tiempo. Para todo nivel de tiempo I_n , el nivel anterior y el nivel superior son considerados para realizar una interpolación cúbica usando los cuatro valores (en t_{n-2} , t_{n-1} , t_n y t_{n+1}) que son más exactos (para la integración hacia atrás, el límite de la izquierda).

Así, usando este hecho, la función suavizada z^* para el nivel I_n es obtenida por un procedimiento similar al usado en el caso del recovery espacial 1D. Este proceso es ilustrado en la Figura 2.8. Un polinomio cúbico es dado, interpolando los valores de z_H en los instantes t_{n-2} , t_{n-1} , t_n , t_{n+1} . Una vez que el polinomio es determinado, este es evaluado en los instantes del refinamiento temporal para I_n , quedando definida z^* en I_n .

2.6.2. Estima residual

El error de referencia en el problema dual $\varepsilon^{\text{ref}} := z_h - z_H$ es la solución de la ecuación residual discreta, análoga a (2.26),

$$B(v, \varepsilon^{\text{ref}}) = \mathcal{R}^D(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_{h,\delta t}, \quad (2.33)$$

donde el residuo en el problema dual es definido de la misma manera que para $\mathcal{R}^P(\cdot)$:

$$\mathcal{R}^D(v) := J(v) - B(v, z_H).$$

Un acercamiento alternativo para construir una aproximación apropiada de ε^{ref} es solucionar localmente la ecuación residual (2.33).

La dificultad principal de esta clase de estimaciones es fijar las condiciones de contorno apropiadas en los problemas locales.

En este trabajo, se presenta una forma simple basada en resolver la ecuación (2.33) en cada elemento espacio-tiempo de la malla, esto es, en cada $\Omega_k \times I_n$ para $k = 1, 2, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}}$ y $n = 1, 2, \dots, N$.

En este caso se necesitan *condiciones iniciales* en $\Omega_k \times \{t_n\}$ (recuerde que para z la integración en el tiempo está realizada hacia atrás) y *condiciones de contorno* en $\partial\Omega_k \times I_n$. Aquí se han adoptado las condiciones siguientes:

- **Condición inicial en $\Omega_k \times \{t_n\}$.** Se asume, como en el caso del recovery en el tiempo, que en $t = t_n$, $z_H(\cdot, t_{n+})$ tiene mucha mejor precisión que $z_H(\cdot, t_{n-})$. Así se recupera una aproximación $z_0^*(\mathbf{x})$ de $z_H(\cdot, t_{n+})$ usando exactamente el mismo proceso descrito en el apartado de recovery espacial ($z_0^* = \Phi_x z_H(\cdot, t_{n+})$). $z_0^*(\mathbf{x})$ es usado como *condición inicial* del problema local (ver Figura 2.9).
- **Condiciones de contorno en $\partial\Omega_k \times I_n$.** Por simplicidad se fijan condiciones de contorno del tipo de Dirichlet. Éstas, también se extraen de un proceso de recovery. Pues, para cada nodo en la $\partial\Omega_k$ y en el interior de I_n , necesario a lo largo del cálculo (de t_n a t_{n-1}) son definidos usando la estrategia del recovery descrito para el caso del tiempo (ver Figura 2.9).

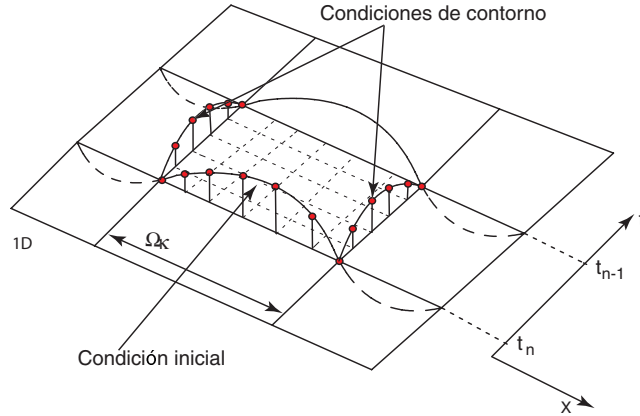


Figura 2.9: Condición inicial y de contorno en el elemento Ω_k (caso 1D) al aplicar la estima residual.

Observe que esto se puede hacer usando z^* o ε^* como incógnitas. Esto es porque la ecuación para z_n y ε^{ref} son respectivamente (2.26) y (2.33). Recuerde que tanto z^* y ε^* pueden ser usadas como entrada de $\mathcal{R}^P(\cdot)$ y la misma estima para $J(e)$ es obtenida.

2.6.3. Análisis del recovery

Al hacer la aproximación de z por el recovery z^* surge la pregunta:

¿por qué z^* debe ser una mejor aproximación de z que z_H ?

Esta pregunta es aún más evidente si nos situamos en el recovery hecho en la variable espacial. Pues, en el caso temporal, suponiendo que los valores nodales en los t_n , con $n = 0 : N$, son exactos, se tiene que el error de interpolación está dado por

$$E_m(\cdot, t) := z(\cdot, t) - \Pi_m z(\cdot, t) = \frac{z^{(m+1)}(\cdot, \xi)}{(m+1)!} \Theta_{m+1}(t),$$

con $\xi \in \bigcup_{j=-1}^1 I_{n+j}$ y $\Theta_{m+1}(t) := \prod_{i=0}^m (t - t_i)$ el polinomio nodal de grado $m+1$.

Resultados teóricos y numéricos para la convergencia del recovery en desplazamientos (problemas elípticos) son dados por Wiberg y Li en [52, 53] junto

a Krizek y Neittaanmaki [51]. En estos trabajos, para el caso de elementos cuadráticos o de orden superior, prueban la convergencia de z^* con un orden mayor que z_H . Esta superconvergencia de z^* es debido a su construcción a partir de los puntos superconvergentes de los elementos. Sin embargo, esta propiedad no se presenta en los elementos bilineales.

Para el caso de problemas elípticos, en el Apéndice B, se prueba una propiedad de aproximación más débil para el recovery z^*

$$|\mathcal{R}^P(z - z^*)| \ll |\mathcal{R}^P(z - z_H)|,$$

que esta pensada como una propiedad global de superconvergencia. Sin embargo, para la prueba de este resultado es necesario pedir soluciones suaves del problema dual, lo cual excluye una parte significativa de aplicaciones de interés. Otra petición restrictiva en la prueba es la necesidad de trabajar en mallas uniformes lo cual entra en conflicto con el propósito final de adaptatividad de la malla. Ahora bien, la experimentación numérica llevada a cabo para casos críticos nos lleva a concluir que las condiciones exigidas son de carácter suficiente pero no necesarias para la demostración del resultado.

2.7. Experimentación Numérica

Para la validación numérica de las estimas propuestas se presenta un grupo de ejemplos en 1D y 2D. Los dos primeros ejemplos son de carácter académico y sus cantidades de interés se han definido tal que la solución, z , del problema dual resulte suave en todo el dominio Ω . El Ejemplo 3 es una aplicación de carácter ingenieríl. Sin embargo, la cantidad de interés (gradiente de temperatura) también produce soluciones suaves para el problema dual.

2.7.1. Ejemplo 1. (caso 1D)

En este ejemplo se toma $\Omega :=]0, 1[$ y $T = 0.2$, esto es $I :=]0, 0.2[$ es considerado. El problema queda definido al tomar $\alpha = c = 1$ en (2.1) y f tal que la

solución exacta es

$$u(x, t) := e^{-\pi^2(t+t^2)} \sin(\pi x),$$

ver Figura 2.10 (izquierda). La solución u verifica las condiciones de contorno (2.1b) y la condición inicial se fija tal que la solución se cumpla, $u_0(\mathbf{x}, t) = u(\mathbf{x}, 0)$. La cantidad de interés se define según (2.16) por

$$j(x) = e^{\pi^2 T} \text{sen}(\pi x).$$

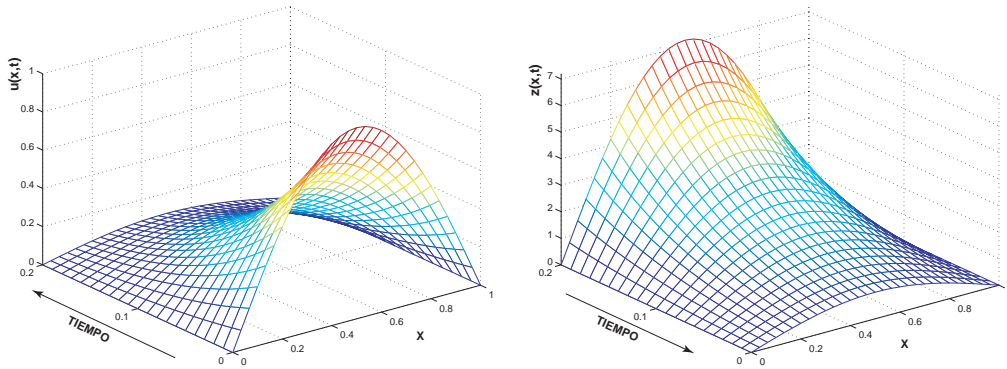


Figura 2.10: Ejemplo 1: Representación de las soluciones primal u_H (izquierda) y dual z_H (derecha)

$J(u)$	$J(u_h)$	$J(u_H)$	$J(e)$	$J(e^{\text{ref}})$
0.3369	0.3367	0.3361	8.095×10^{-04}	6.087×10^{-04}

Tabla 2.1: Valores de la cantidad de interés para las soluciones y los errores

Las aproximaciones u_H y z_H son calculadas con una malla uniforme de 30 elementos lineales. La malla en el tiempo es uniforme con $N = 20$, por lo tanto $\Delta t = 0.01$. La solución del problema dual asociado es dada en la Figura 2.10 (derecha). La malla de referencia es determinada por un factor de refinamiento de 2, $\mathbf{n}_{\text{ref}} = 2$. Así, $h = H/2$ y $\delta t = \Delta t/2$. Dos aproximaciones distintas son dadas para la solución del dual, z^{sua} y z^{res} , las dos son obtenidas en $\mathbf{V}_{h,\delta t}$. La primera es calculada usando un proceso de recovery como el dado en la sección 2.6.1 mientras la segunda se calcula usando un estimador residual tal como fue dado en la sección 2.6.2.

Los resultados numéricos se resumen en las tablas 2.1 y 2.2. En la Tabla 2.2 se dan dos tipos de resultados para la estima tipo recovery: en z^{sua} la estima se almacena en nodos, mientras en z_2^{sua} el almacenamiento se hace en los puntos de Gauss.

	$\sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}}(\cdot)$	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)/J(e)$	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$	$\sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}} $
$z^{\text{sua}} - z_{\text{H}}$	6.091×10^{-4}	75.3 %	100.1 %	6.092×10^{-4}
$z_2^{\text{sua}} - z_{\text{H}}$	8.077×10^{-4}	99.8 %	132.7 %	8.078×10^{-4}
$z^{\text{res}} - z_{\text{H}}$	6.074×10^{-4}	75.0 %	99.8 %	7.119×10^{-4}
$z_h - z_{\text{H}}$	6.087×10^{-4}	75.2 %	100.0 %	7.503×10^{-4}
$z - z_{\text{H}}$	8.095×10^{-4}	100.0 %	133.0 %	9.987×10^{-4}
$z^{\text{sua}} - \Pi_{\text{H}}z$	6.091×10^{-4}	75.3 %	100.1 %	8.877×10^{-4}
$z_2^{\text{sua}} - \Pi_{\text{H}}z$	8.077×10^{-4}	99.8 %	132.7 %	9.592×10^{-4}
$z^{\text{res}} - \Pi_{\text{H}}z$	6.074×10^{-4}	75.0 %	99.8 %	7.875×10^{-4}
$z_h - \Pi_{\text{H}}z$	6.087×10^{-4}	75.2 %	100.0 %	6.974×10^{-4}
$z - \Pi_{\text{H}}z$	8.095×10^{-4}	100.0 %	133.0 %	8.095×10^{-4}

Tabla 2.2: Valores numéricos por columnas de izquierda a derecha: aproximación del error, índice de efectividad exacto y de referencia, suma de las aproximaciones locales del error en valor absoluto y desviación típica.

Se puede ver comparando las tablas 2.1 y 2.2, que $J(e^{\text{ref}}) = \mathcal{R}^{\text{P}}(z_{\text{h}})$, como se esperaba. Hay sin embargo, una pequeña diferencia entre $J(e)$ y $\mathcal{R}^{\text{P}}(z)$. Esta diferencia es debida al error introducido por la cuadratura numérica en la integración de la solución exacta, que no es un polinomio. Por otro lado, la estima z_2^{sua} , debido a su integración, presenta una mejor aproximación al error exacto que la obtenida con z^{sua} .

Un resultado que reviste interés para el proceso adaptativo y el cual es objeto de estudio continuamente en este trabajo, es el hecho que:

$$\sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}} \approx \sum_{k,n} |\mathcal{R}_{k,n}^{\text{P}}|. \quad (2.34)$$

En otras palabras, que tanto cambian de signo las contribuciones locales del error. De los resultados numéricos dados en la última columna de la Tabla 2.2 y la Figura 2.11 se concluye que cualquiera que sea la representación de la estima

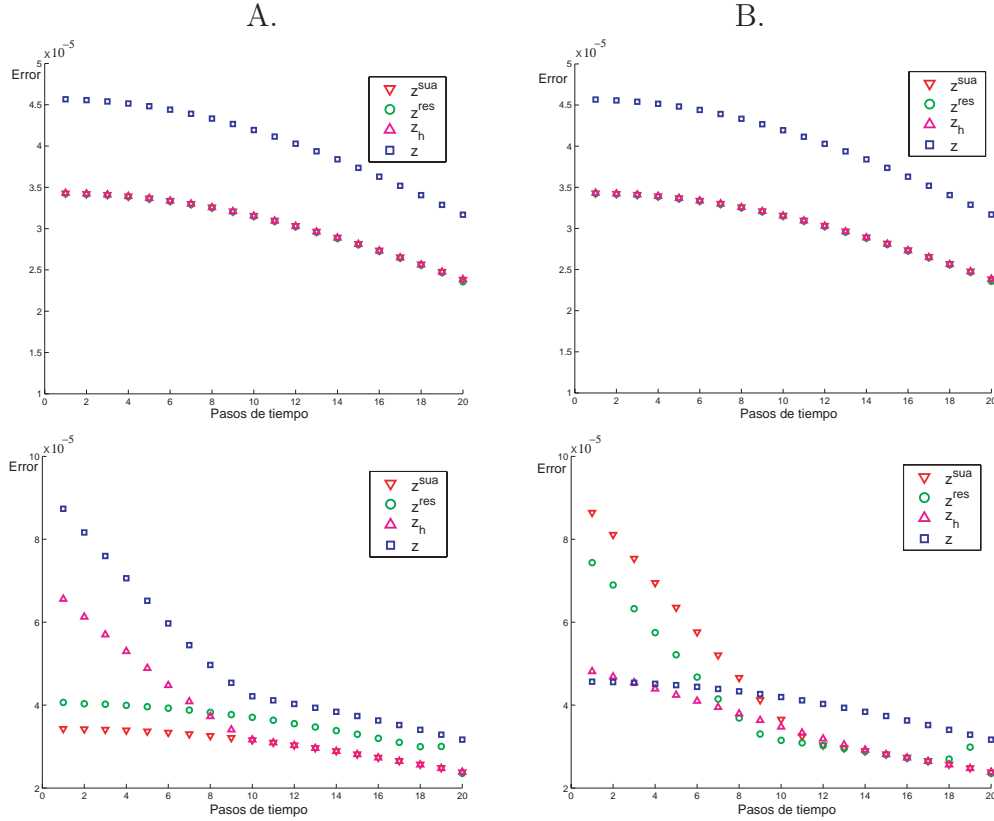


Figura 2.11: Distribución del error a lo largo del tiempo. z^{sua} = triángulo hacia abajo (rojo), z^{res} = círculo (verde), z_h = triangle hacia arriba (magenta), z = cuadrado (azul). Fila superior de izquierda a derecha (sin valor absoluto): A.- Para $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z_h - z_H)$ y $\mathcal{R}^P(z - z_H)$. B.- Para $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - \Pi_H z)$, $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - \Pi_H z)$, $\mathcal{R}^P(z_h - \Pi_H z)$ y $\mathcal{R}^P(z - \Pi_H z)$. La fila inferior representa los valores absolutos acumulados de las contribuciones elementales al error.

$\mathcal{R}^P(z^* - v_H)$, donde z^* representa cualquiera de las dos estimas propuestas y $v_H \in \mathbf{V}_{H,\Delta t}$ ($v_H := z_H$ o $v_H := \Pi_H z$), se obtiene una buena aproximación para la propiedad de (2.34). Sin embargo, como se ilustra en la Figura 2.13 y 2.16, esta representación del error trae como consecuencia un fenómeno de sensibilidad de la estima para definir las magnitudes locales del error; el comportamiento cualitativo de las magnitudes del error es completamente diferente.

En este ejemplo, este fenómeno de sensibilidad puede explicarse con cierta facilidad. La representación del error para $\mathcal{R}^P(z_H)$ y $\mathcal{R}^P(\Pi_H z)$ tienen un comportamiento similar, como se ilustra en la Figura 2.14; sin embargo, su diferencia, $\mathcal{R}^P(z_H - \Pi_H z)$, no es constante, como se deja ver en la Figura 2.15. Así pues, dado que las contribuciones locales del error cerca de la frontera del

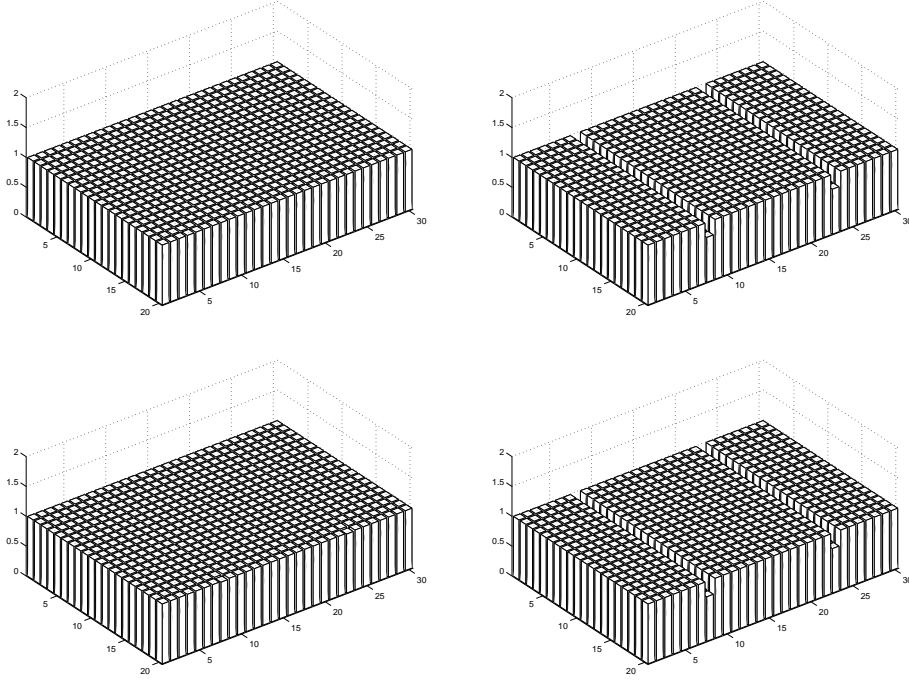


Figura 2.12: Índice de efectividad, $|\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})/\mathcal{R}^P(z)|$, $|\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})/\mathcal{R}^P(z_{\text{H}})|$, $|\mathcal{R}^P(z^{\text{res}})/\mathcal{R}^P(z)|$ y $|\mathcal{R}^P(z^{\text{res}})/\mathcal{R}^P(z_{\text{H}})|$.

dominio son más grandes para z_{H} que para $\Pi_{\text{H}}z$ (ver Figura 2.15), se tiene que $\mathcal{R}^P(z^* - z_{\text{H}})$ dará un mayor peso a los elementos centrales que a los de frontera. Sin embargo, en el caso de $\mathcal{R}^P(z^* - \Pi_{\text{H}}z)$ ocurre lo contrario, pues los errores locales para $\Pi_{\text{H}}z$ son mayores en la zona central del dominio (ver Figura 2.15).

Además, aunque en este ejemplo la condición (2.34) se cumple satisfactoriamente, esto no es cierto de forma general; como se deja ver en el Ejemplo 2. De estos resultados surge la pregunta ¿cuál será el v_{H} óptimo para representar $\mathcal{R}^P(z^* - v_{\text{H}})$? Pues el buen uso de estos resultados pueden llevar a una malla óptima en el proceso de adaptatividad.

Para finalizar, se muestra en la tabla 2.3 que la precisión de la estima mejora significativamente al tomar un n_{ref} superior.

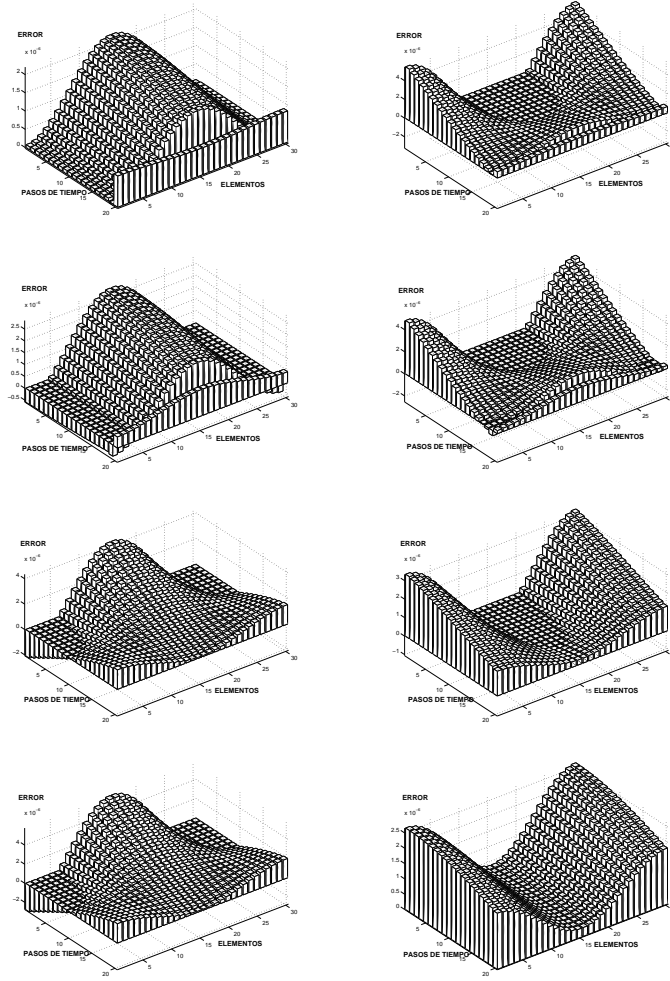


Figura 2.13: Distribución del error sin valor absoluto. Primera columna: $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z_h - z_H)$ y $\mathcal{R}^P(z - z_H)$. Segunda columna: $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - \Pi_H z)$, $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - \Pi_H z)$, $\mathcal{R}^P(z_h - \Pi_H z)$ y $\rho(z - \Pi_H z)$.

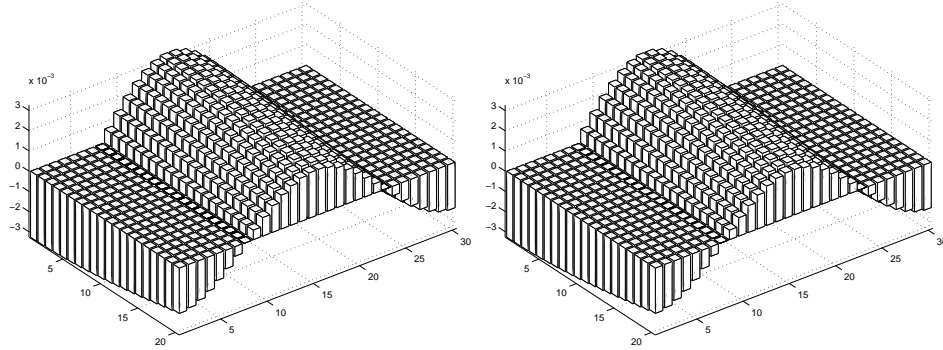


Figura 2.14: Distribución del error $\mathcal{R}^P(z_H)$ y $\mathcal{R}^P(\Pi_H z)$.

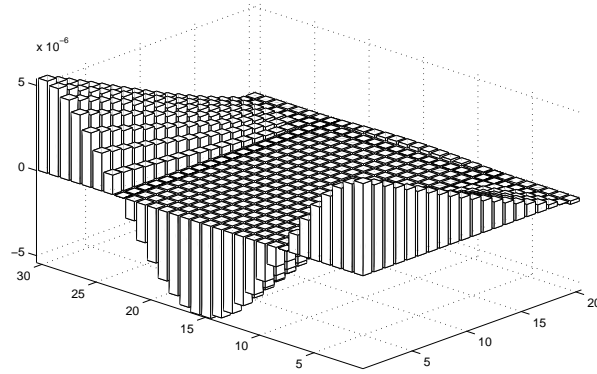


Figura 2.15: Distribución del error para $\mathcal{R}^P(z_H - \Pi_H z)$.

	$\sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^P(\cdot)$	$\mathcal{R}^P(\cdot)/J(e)$	$\mathcal{R}^P(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$
z^{sua}	7.857×10^{-4}	97.1 %	99.8 %
z_2^{sua}	8.077×10^{-4}	99.9 %	102.6 %
z^{res}	7.873×10^{-4}	97.3 %	100.0 %
z_h	7.873×10^{-4}	97.3 %	100.0 %
z	8.095×10^{-4}	100.0 %	102.8 %

Tabla 2.3: Valores numéricos para el caso de $n_{\text{ref}} = 6$.

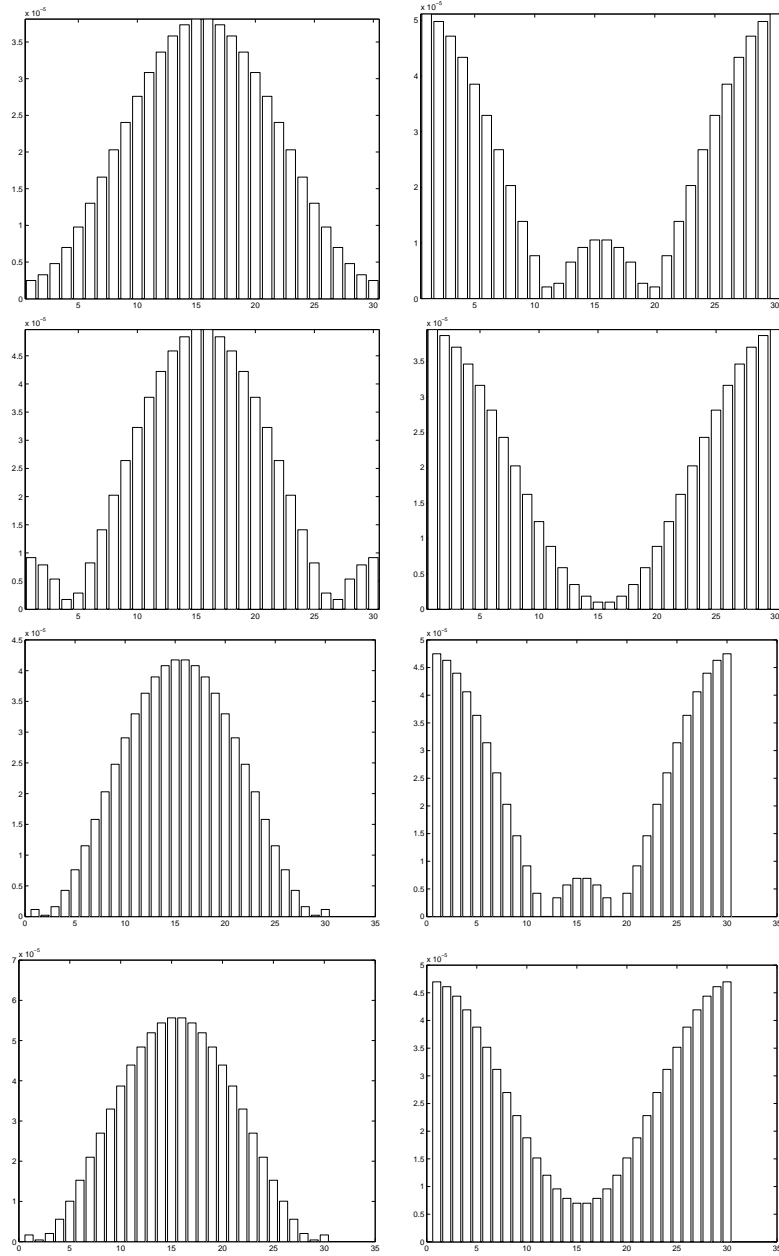


Figura 2.16: Error acumulado a lo largo del tiempo sin abs. Primera columna: $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z_h - z_H)$ y $\rho(z - z_H)$. Segunda columna: $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - \Pi_H z)$, $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - \Pi_H z)$, $\mathcal{R}^P(z_h - \Pi_H z)$ y $\rho(z - \Pi_H z)$.

2.7.2. Ejemplo 2. 2D

En este ejemplo se toma $\Omega =]0, 1[\times]0, 1[$ y $T = 0.2$, esto es $I =]0, 0.2[$. El problema queda dado al tomar $\alpha = c = 1$ en (2.1) y f tal que la solución exacta es

$$u(x, y, t) := 100e^{-10t - 800(x-x_m)^2(y-y_m)^2} \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y)^2,$$

donde $x_m = y_m = 0.1$. La solución u verifica las condiciones de contorno (2.1b) y la condición inicial se fija tal que la solución se cumpla, $u_0(x, y, t) = u(x, y, 0)$. La cantidad de interés se define según (2.16) por

$$j(x, y) = \frac{1}{40} e^{2\pi^2 T} \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y).$$

Las aproximaciones u_H y z_H son calculadas con una malla uniforme de 30×30

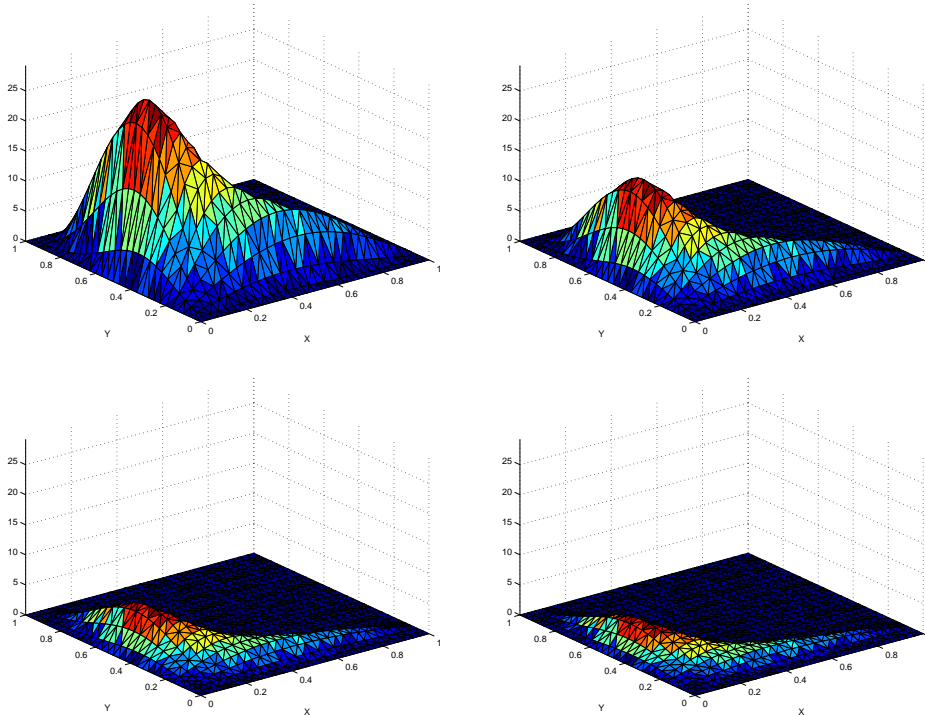


Figura 2.17: Representación de la solución u_H en distintos instantes de tiempo: $t = 2\Delta t$ (superior izquierda), $t = 8\Delta t$ (superior derecha), $t = 16\Delta t$ (inferior izquierda) and $t = 20\Delta t = T$ (inferior derecha)

elementos bilineales (4 nodos). La malla en el tiempo es uniforme con $N = 20$,

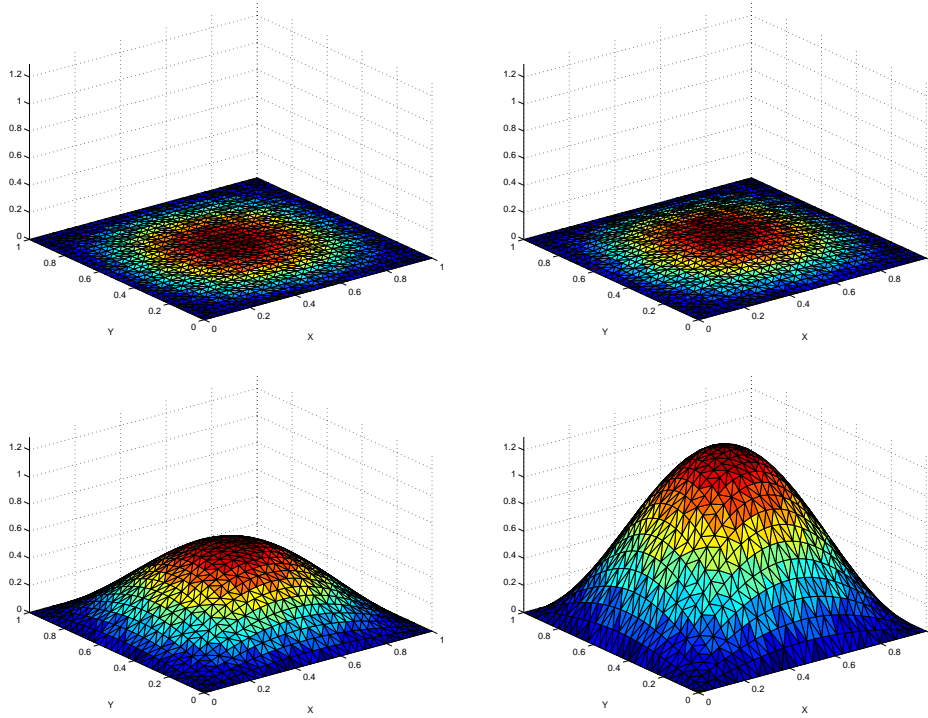


Figura 2.18: Representación de la solución z_H en distintos instantes de tiempo: $t = 2\Delta t$ (superior izquierda), $t = 8\Delta t$ (superior derecha), $t = 16\Delta t$ (inferior izquierda) and $t = 20\Delta t = T$ (inferior derecha)

por lo tanto $\Delta t = 0.01$. La soluciones del problema primal y dual son dadas en las Figura 2.17 y 2.18, respectivamente.

La malla de referencia es determinada por un factor de refinamiento de 2, $n_{\text{ref}} = 2$. Así, $h = H/2$ y $\delta t = \Delta t/2$.

Al igual que el ejemplo anterior, dos aproximadas distintas son dadas para la solución del dual, z^{sua} y z^{res} ; las dos son obtenidas en $\mathbf{V}_{h,\delta t}$. La primera es calculada usando un proceso de recovery como el dado en la sección 2.6.1 mientras la segunda es calcula usando un residual tal como fue dado en la sección 2.6.2.

Los resultados numéricos se resumen en las tablas 2.4 y 2.5. En la Tabla 2.4 (derecha) se define el Índice de efectividad en valor absoluto

$$I_{\text{eabs}, z^{\text{sua}} - z_H, z - z_H} = \frac{\sum_{n,k} |\mathcal{R}_{kn}^{\text{P}}(z^{\text{sua}} - z_H)|}{\sum_{n,k} |\mathcal{R}_{kn}^{\text{P}}(z - z_H)|},$$

de forma análoga se definen los restantes valores de la tabla. Se puede ver a

partir de las tablas 2.4 y 2.5, que $J(e^{\text{ref}}) = \mathcal{R}^{\text{P}}(z_{\text{h}})$ y $J(e) = \mathcal{R}^{\text{P}}(z)$, como se esperaba. Nuevamente, igual que en Ejemplo 1, hay una pequeña diferencia entre $J(e)$ y $\mathcal{R}^{\text{P}}(z)$ debido al error introducido por la cuadratura numérica en la integración de la solución exacta, que no es un polinomio.

	$J(\cdot)$		
u	2.60164×10^{-01}	$I_{\text{eabs}, z^{\text{sua}} - z_{\text{H}}, z - z_{\text{H}}}$	0.891
u_{h}	2.60057×10^{-01}	$I_{\text{eabs}, z^{\text{sua}} - z_{\text{H}}, z_{\text{h}} - z_{\text{H}}}$	1.043
u_{H}	2.59701×10^{-01}	$I_{\text{eabs}, z^{\text{res}} - z_{\text{H}}, z - z_{\text{H}}}$	24.794
e	4.62658×10^{-04}	$I_{\text{eabs}, z^{\text{res}} - z_{\text{H}}, z_{\text{h}} - z_{\text{H}}}$	29.039
e^{ref}	3.55825×10^{-04}		

Tabla 2.4: Valores de la cantidad de interés para las soluciones y los errores

	$\sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}}(\cdot)$	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)/J(e)$	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$	$\sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}} $
$z^{\text{sua}} - z_{\text{H}}$	3.45944×10^{-4}	74.8 %	97.2 %	1.095×10^{-2}
$z^{\text{res}} - z_{\text{H}}$	4.25529×10^{-4}	92.0 %	119.6 %	3.048×10^{-1}
$z_{\text{h}} - z_{\text{H}}$	3.55825×10^{-4}	77.0 %	100.0 %	1.050×10^{-2}
$z - z_{\text{H}}$	4.60291×10^{-4}	99.5 %	129.4 %	1.230×10^{-2}

Tabla 2.5: Valores numéricos por columnas de izquierda a derecha: aproximación del error, índice de efectividad exacto y de referencia, y suma de las aproximaciones locales del error en valor absoluto.

La discrepancia en los valores acumulados en espacio surge de los signos opuestos en las contribuciones locales. Estas magnitudes son dadas en la segunda y cuarta columna de la Tabla 2.5. La magnitud del error total, en cada paso de tiempo, es mucho más pequeña que la mayoría de las contribuciones individuales. Esto se confirma con los resultados mostrados en la segunda fila de la Figura 2.19. En otras palabras, la condición (2.34) no se cumple satisfactoriamente, pues $\sum_{k,n} |\mathcal{R}_{k,n}^{\text{P}}|$ tiene en general dos ordenes de magnitud más que $\sum_{k,n} \mathcal{R}_{k,n}^{\text{P}}$.

La Figura 2.20 ilustra los Índice de efectividad global (exacto y de referencia) para las dos estimas propuestas. Mientras, la Figura 2.21 muestra la distribución espacial del error en un instante de tiempo (en diferentes instantes

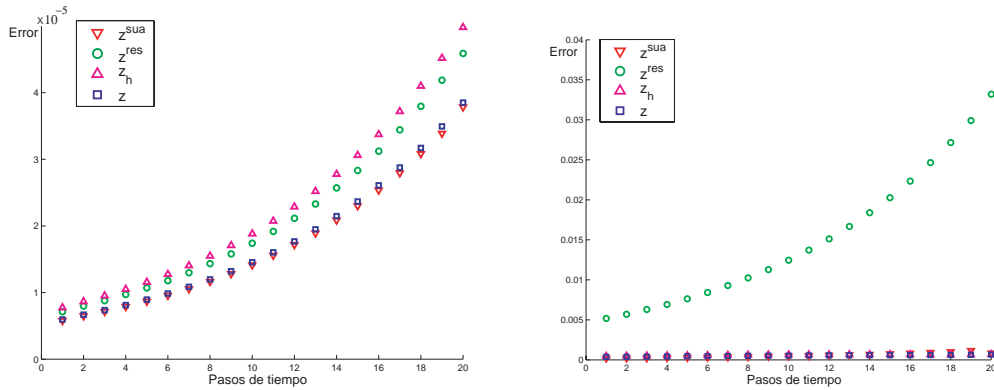


Figura 2.19: Distribución del error a lo largo del tiempo. z^{sua} = triángulo hacia abajo (rojo), z^{res} = círculo (verde), z_h = triangle hacia arriba (magenta), z = cuadrado (azul). Izquierda: valores acumulados de las contribuciones elementales al error sin valor absoluto de $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z_h - z_H)$ y $\mathcal{R}^P(z - z_H)$. Derecha: con valores absolutos.

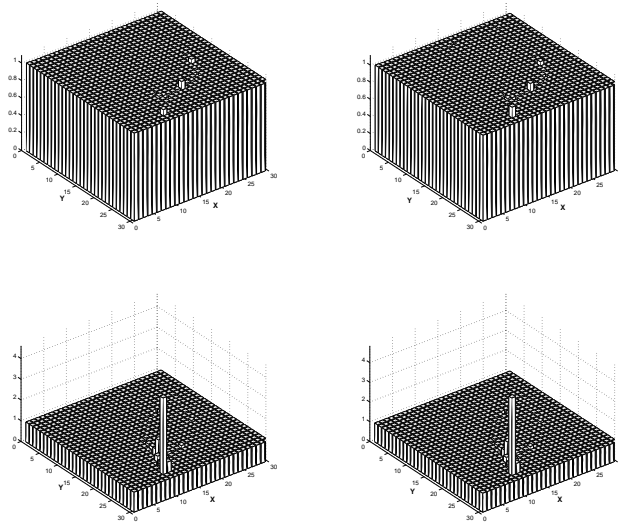


Figura 2.20: Índice de efectividad global, $|\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})/\mathcal{R}^P(z_h)|$, $|\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})/\mathcal{R}^P(z)|$, $|\mathcal{R}^P(z^{\text{res}})/\mathcal{R}^P(z_h)|$ y $|\mathcal{R}^P(z^{\text{res}})/\mathcal{R}^P(z)|$.

los resultados son similares). En general, la distribución del error es prácticamente idéntica, en forma y valor, para todos los casos. Sin embargo, la distribución del error para la estima z^{res} , $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - z_H)$, varía de los otros casos (ver Figura 2.21 y 2.19).

La precisión de la estima usando recovery es similar a los resultados obtenidos en el ejemplo anterior. La efectividad para el error de referencia es de

un 97.2% y un 74.7% para error exacto. La estima residual no resulta tan precisa para el error de referencia (119.6%) pero si para la solución exacta donde llega alcanzar un 92.7% de efectividad. La perdida de precisión para la estima residual en el error de referencia está relacionada con la precisión conque el error de referencia esta aproximando al error exacto (129.4%); lo cual no ocurre en el primer ejemplo, donde se tiene que el error de referencia aproxima al exacto con una precisión del (102.0%). Por otro lado, en un proceso adaptativo puede resultar más apropiada la estima recovery, pues la estima residual presenta un mayor error al sumar las magnitudes de los errores locales (ver la Figura 2.19 (derecha) y la Figura 2.21). Además, recuerde que la estima recovery es computacionalmente menos costosa que la estima residual.

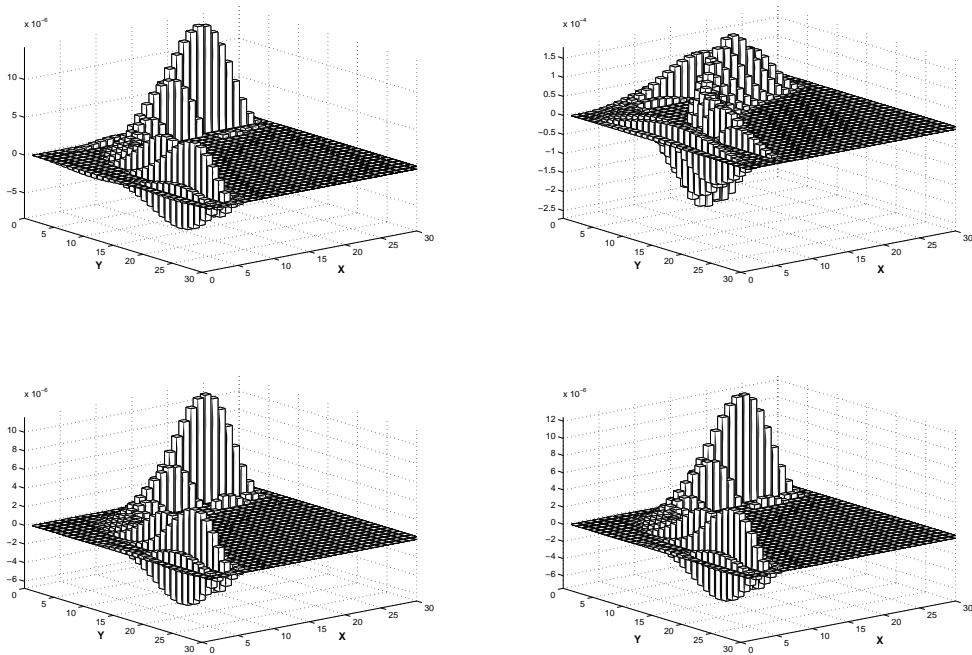


Figura 2.21: Distribución del error en $t = 16\Delta t$ (sin valor absoluto). Primera fila: $\mathcal{R}^P(z^{\text{suu}} - z_H)$ y $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - z_H)$. Segunda fila: $\mathcal{R}^P(z_h - z_H)$ y $\mathcal{R}^P(z - z_H)$.

Estos resultados motivan el uso de la estima recovery en el siguiente ejemplo.

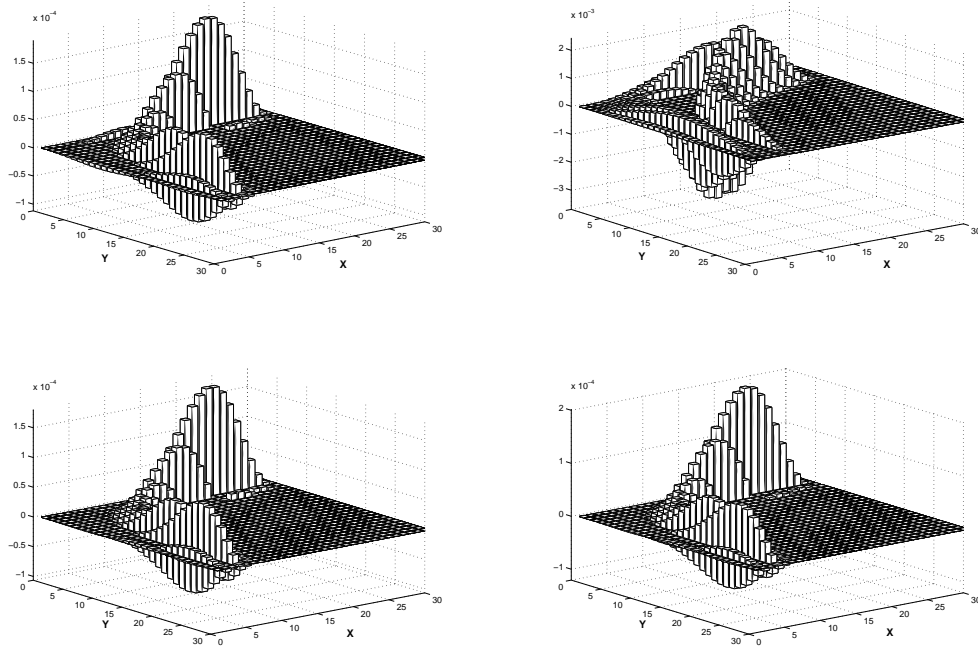


Figura 2.22: Error acumulado a lo largo del tiempo (sin valor absoluto). Primera fila: $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - z_H)$ y $\mathcal{R}^P(z^{\text{res}} - z_H)$. Segunda fila: $\mathcal{R}^P(z_h - z_H)$ y $\mathcal{R}^P(z - z_H)$.

2.7.3. Ejemplo 3. Efecto térmico en una sección transversal de un puente

El modelo matemático para simular el fenómeno de conducción de calor en una sección transversal Ω (geometría dada en la Figura 2.23) de un puente de hormigón viene dado por

$$\begin{aligned}
 c\rho\partial_t u(x, y, t) &= k\Delta u(x, y, t) && \text{en } \Omega \times I \\
 u(x, y, t = 0) &= u_0(x, y) && \text{en } \Omega \\
 k\nabla u \cdot \mathbf{n} &= g_1 + \alpha(u_A - u) && \text{en } \Gamma_1 \times I \\
 k\nabla u \cdot \mathbf{n} &= g_2 + \alpha(u_A - u) && \text{en } \Gamma_2 \times I,
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

donde $\partial\Omega := \overline{\Gamma_1 \cup \Gamma_2}$, $I = [t_0, T]$ y k , c , ρ y α son parámetros térmicos que describen la convección y la conductividad térmica del material, sus valores quedan dados en la Tabla 2.6. Las función g_1 representa la radiación solar en el contorno Γ_1 (parte superior del contorno) y $\partial\Gamma_2$. La función u_A describe la temperatura ambiente a lo largo del tiempo. Un análisis general de este tipo

de problema puede ser visto en [65].

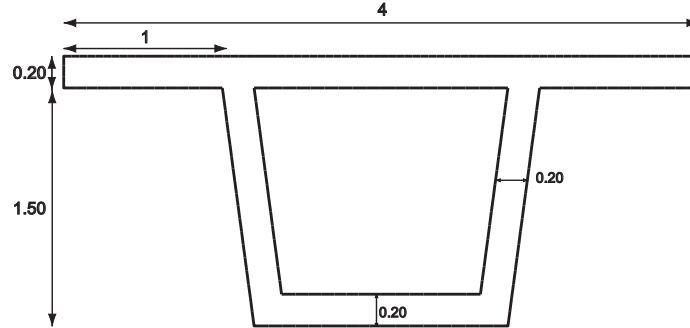


Figura 2.23: Geometría de la sección transversal del puente, longitudes expresadas en metros.

En nuestro caso la condición inicial es $u_0 = 12^\circ\text{C}$ y el tiempo de insolación será de 63 horas ($T = 63$), esto es $I =]0, 63[$.

$c = 960 \text{ J/Kg }^\circ\text{C}$	calor específico
$\rho = 2500 \text{ Kg/m}^3$	densidad
$k = 1.5 \text{ W/m }^\circ\text{C}$	conductividades térmicas
$\alpha = 15 \text{ J/m s }^\circ\text{C}$	coeficiente combinado convección.

Tabla 2.6: Constantes del problema.

La evolución de g_1 y g_2 como funciones del tiempo están dadas por:

$$g_1(t) := \begin{cases} a2\frac{W}{T_0} \sin^2\left(\frac{\pi}{T_0}(t - t_a)\right) & \text{si } t_a \leq t \leq t_a + T_0, \\ 0 & \text{en los otros casos,} \end{cases} \quad g_2(t) := 0,$$

donde $a = 1$. (Coeficiente de absorción), $W = 7000 \text{ J/m}$ representa la energía total por unidad de longitud dada por la insolación, $T_0 = 10$ horas (Duración del día solar) y $t_a = 8$ a.m. (Hora del alba). La función u_A (Temperatura ambiente) en función del tiempo se define como:

$$u_A(t) := u_m + D_u \sin\left(\frac{\pi}{12}(t - t_m)\right),$$

donde $u_m = 18$ (Temperatura media), $D_u = 6$ representa el rango de temperatura (diferencia entre la temperatura máxima y mínima) y $t_m = 6$ (Hora en que la temperatura media es igual a la temperatura ambiente). Note

que la unidad de tiempo natural es la hora y consecuentemente, las magnitudes que involucran al tiempo ($k/\rho c$) deben ser expresadas en horas, esto es $k/\rho c = 6.25 \times 10^{-7} \text{m}^2/\text{s} = 2.25 \times 10^{-3} \text{m}^2/\text{hora}$. Las gráficas de la radiación solar, g_1 , en Γ_1 y la temperatura ambiente, u_A , son ilustradas en la Figura 2.24.

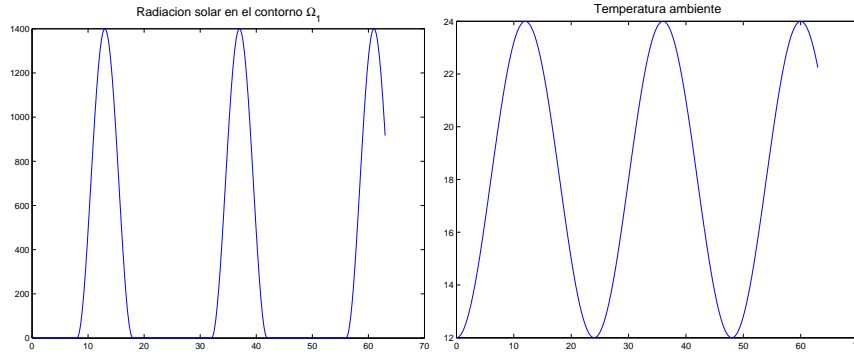


Figura 2.24: Figura a. $g_1(t)$ Radiación solar en el contorno $\partial\Gamma_1$. Figura b. $u_A(t)$ Temperatura ambiente.

La carga mecánica inducida por el efecto térmico es caracterizada por el *gradiente térmico*, el cual es la pendiente de un plano que aproxima la distribución de temperatura, ver Figura 2.25. Este gradiente térmico es considerado como la cantidad de interés, que debe ser evaluada con precisión. Formalmente, la función lineal $u_L(x, y)$ *equivalente* a la distribución de temperatura $u(x, y)$ (en un instante t) es obtenida usando un ajuste por mínimos cuadrados. Una vez que, $u_L(x, y) = a_0 + a_x x + a_y y$ es determinada, la cantidad de interés es precisamente el coeficiente a_y .

Una base ortogonal de polinomios lineales en el dominio Ω es obtenida para facilitar el cálculo de a_y como una función directa de u . Sea $\{P_0, P_1, P_2\}$ una base ortogonal del subespacio vectorial obtenida usando un proceso de ortogonalidad de Gram-Schmidt en la base $\{1, x, y\}$, esto es

$$P_0 = 1, \quad P_1 = x - x_m, \quad P_2 = y - y_m - \frac{(y, x - x_m)}{(x - x_m, x - x_m)}(x - x_m),$$

para $x_m = (x, P_0)/(P_0, P_0)$, $y_m = (y, P_0)/(P_0, P_0)$ y (x_m, y_m) el centro de gravedad de la sección transversal. Por lo tanto, u_L es explícitamente calculada

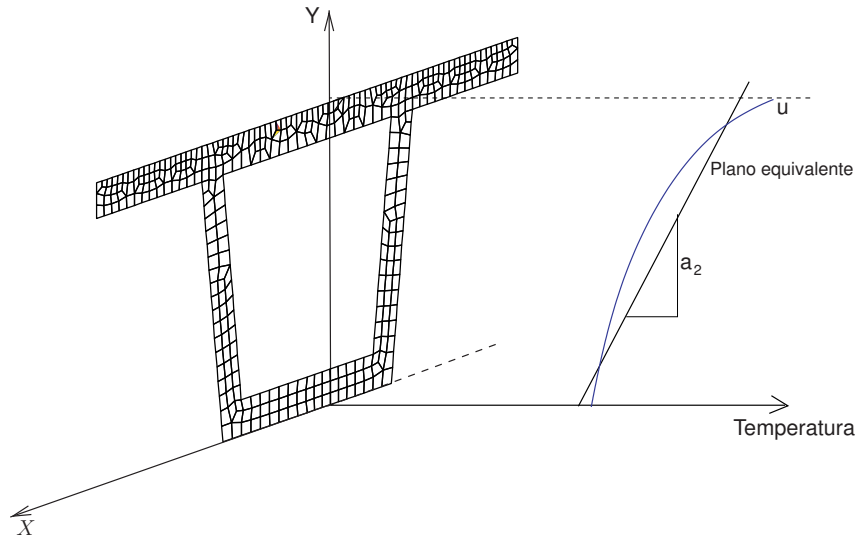


Figura 2.25: Gradiente de temperatura

como

$$u_L = \frac{(u, P_0)}{(P_0, P_0)} P_0 + \frac{(u, P_1)}{(P_1, P_1)} P_1 + \frac{(u, P_2)}{(P_2, P_2)} P_2$$

y, a_y coincide con el coeficiente de P_2 , esto es

$$a_y = \frac{(u, P_2)}{\|P_2\|^2}. \quad (2.36)$$

Note que la cantidad de interés es $J(u) = a_y$ para un instante $t = T$ (adoptaremos T como el fin del cálculo). Así, la definición del funcional que describe la cantidad de interés es precisamente

$$J(u) = \int_{\Omega} u(\cdot, T) j \, d\Omega \quad \text{donde} \quad j(x, y) := \frac{P_2}{\|P_2\|^2},$$

que es exactamente la forma dada en la ecuación (2.16).

Si la geometría es simétrica respecto al eje y , la expresión es simplificada considerablemente debido a que

$$x_m = 0, \quad P_1(x, y) = x \quad y \quad P_2(x, y) = y - y_m.$$

En este caso

$$j(x, y) := \frac{y - y_m}{\|y - y_m\|^2}.$$

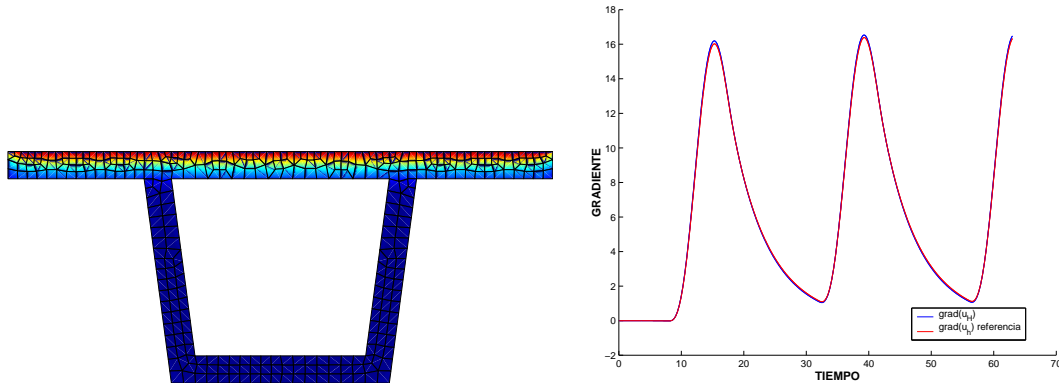


Figura 2.26: Distribución de temperatura en el tiempo final $T = 63$ (izquierda). Gradiente de temperatura para u_H y u_h (derecha).

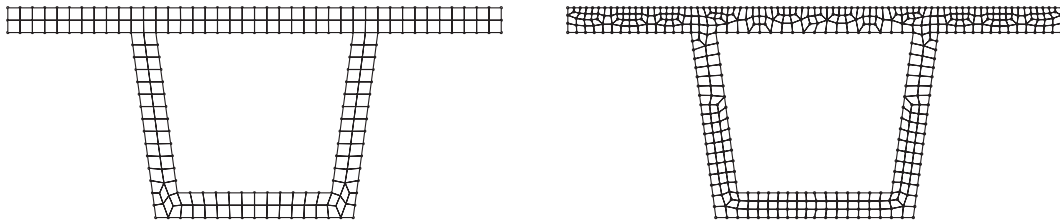


Figura 2.27: Mallas usadas en el cálculo, con 168 elementos (izquierda) y 368 elementos (derecha)

El cálculo se inicia a media noche, cuando la temperatura es asumida uniforme y llevado hasta un tiempo final de 63 horas ($T = 63$ horas). Esto es, el último instante de tiempo es las 3:00 p.m. del tercer día. Desde un punto de vista práctico, después de dos días la solución se puede asumir independiente de la condición inicial y por lo tanto de los errores de polución introducidos por la condición inicial homogénea u_0 . La evolución del gradiente de temperatura a lo largo del tiempo es descrita en la Figura 2.26 (derecha) para las solución u_H y la solución de referencia u_h . Merece la pena notar que el valor máximo se alcanza diariamente alrededor de las 3:00 p.m. (puntos críticos). La Figura 2.26 (izquierda) muestra la distribución de temperatura en el tiempo final del cálculo. La cantidad de interés es precisamente el gradiente térmico asociado con esta distribución. Nótese que las temperaturas más altas son concentradas en el tope de la sección transversal, debido al efecto de la insolación.

En este ejemplo, el error es estimado usando un proceso de recovery como

el dado en la sección 2.6.1, ($z^{\text{sua}} \in \mathbf{V}_{h,\delta t}$). La estima del error se ha realizado para las soluciones obtenidas con las dos mallas presentadas en la Figura 2.27 (de 168 elementos y 368 elementos) y con los siguientes valores de Δt (en horas): $\Delta t = 0.02; 0.1; 0.2; 0.7; 1; 1.5$, y 3 (correspondiendo a 3150, 630, 315, 90, 63, 42 y 21 pasos de tiempo, respectivamente). Además, la estima del error es realizada para dos mallas de referencia, con una división de elemento y paso de tiempo dada por $h = H/r$ y $\Delta t = \delta t/r$ con $r = 2$ y $r = 4$. Los errores estimados son calculados en todos los casos, sin embargo el costo computacional de obtener la solución de referencia es prohibitiva para $r = 4$ y $\Delta t = 0.02$. Esta prohibición también se da para $r = 4$ y la malla de 368 elementos.

Δt	Malla 1	Malla 2
	168 elementos	368 elementos
0.02	16.79108	16.48149
0.1	16.79108	16.48149
0.2	16.79113	16.48153
0.7	16.79268	16.48292
1.0	16.79544	16.48539
1.5	16.80692	16.49591
3.0	16.85808	16.53685

Tabla 2.7: Valores de $J(u_H)$ para todos los calculos

Los resultados son resumidos en las siguientes tablas. La Tabla 2.7 muestra los valores de $J(u_H)$ para todos los casos planteados. La Tabla 2.8 muestra el error de referencia en todos los casos donde la cantidad de interés puede ser calculada, esto es, los valores de $-J(e^{\text{ref}})/J(u_H)$ (el signo negativo es debido a que todos los valores son originalmente negativos). La Tabla 2.9 nos da la estima del error en las cantidad de interés, $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})$, tanto para $r = 2$ y $r = 4$. Finalmente, los índices de efectividad calculados para todos los casos donde el error de referencia es computacionalmente abordable son mostrados en la Tabla 2.10.

Vale la pena resaltar de la Tabla 2.7 que el error introducido por la discretización temporal es despreciable para $\Delta t = 0.1$ y $\Delta t = 0.02$. Esto es

Δt	Malla 1		Malla 2	
	168 elementos		368 elementos	
	$r = 2$	$r = 4$	$r = 2$	$r = 4$
0.02	2.402 %	–	0.934 %	–
0.1	2.402 %	2.954 %	0.934 %	–
0.2	2.402 %	2.954 %	0.935 %	–
0.7	2.410 %	2.964 %	0.942 %	–
1	2.425 %	2.980 %	0.955 %	–
1.5	2.490 %	3.050 %	1.015 %	–
3	2.722 %	3.357 %	1.190 %	–

Tabla 2.8: Example 3: Valores del error relativo de referencia, $-J(e^{\text{ref}})/J(u_h)$, – no disponible

confirmado en la Tabla 2.8, es más, para la malla 1 (168 elementos), el error en el tiempo asociado con $\Delta t = 0.02$ es despreciable en frente del error introducido por la malla.

Los resultados de la Tabla 2.8 indican además que el error de referencia es proporcional al error exacto por un factor (**error exacto / error de referencia**) que depende del índice de refinamiento, r .

El comportamiento de la estima del error cuantitativamente es consistente (Tabla 2.9), para una malla dada el error se incrementa con Δt . Una anomalía es detectada para la malla 2 (368 elementos) y $\Delta t = 3$, donde el error es reducido en consideración con $\Delta t = 1.5$. Esto es debido al hecho que la dependencia de la cantidad de interés con el tiempo está lejos de ser monótona. Así, para pasos de tiempo grande (3 horas!) puede resultar un error con diferente signo.

La Tabla 2.10 muestra los índices de efectividad para la solución de referencia. Obviamente, estos valores están disponibles en los casos donde la solución de referencia es calculada. Los valores del índices de efectividad están en un rango del 88 al 112 %, esto es la diferencia del error exacto y el error estimado está por debajo del 12 % en todos los casos.

El buen comportamiento de la estima se cumple también localmente, tanto es espacio y tiempo, como se puede ver en las gráficas de las figuras 2.28 y 2.29.

Δt	Malla 1		Malla 2	
	168 elementos		368 elementos	
	$r = 2$	$r = 4$	$r = 2$	$r = 4$
0.02	0.42161	0.52636	0.16813	0.21016
0.1	0.42162	0.52638	0.16814	0.21016
0.2	0.42172	0.52649	0.16821	0.21024
0.7	0.42501	0.53021	0.17112	0.21350
1	0.42941	0.53506	0.17477	0.21746
1.5	0.44187	0.54772	0.18563	0.22821
3	0.51574	0.51574	0.17062	0.21208

Tabla 2.9: Example 3: Valores del error estimado, $-\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})$

La distribución de las contribuciones al error en todos los pasos de tiempo (acumulada en espacio) se determina muy exactamente. En la Figura 2.28 los resultados demuestran que los valores estimados de las contribuciones del tiempo son aproximaciones muy buenas a los errores de referencia. Solamente se exhiben los resultados para $\Delta t = 0.1$, el comportamiento es similares para todos los casos estudiados.

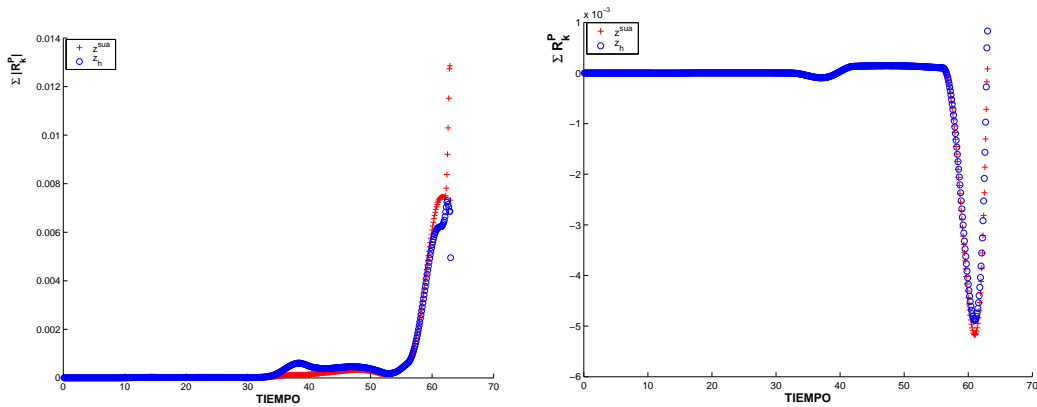


Figura 2.28: Distribución del error a lo largo del tiempo para $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - z_H)$, $\mathcal{R}^P(z_h - z_H)$ y $\Delta t = 0.1$; $z^{\text{sua}} = +$ (rojo), $z_h = \circ$ (azul). La gráfica de la izquierda representa los valores absolutos acumulados de las contribuciones elementales al error. A la derecha, sin valor absoluto.

La distribución espacial del error es obtenida acumulando en tiempo la

Δt	Malla 1		Malla 2	
	168 elementos		368 elementos	
	$r = 2$	$r = 4$	$r = 2$	$r = 4$
0.02	107.1 %	–	110.2 %	–
0.1	107.1 %	109.3 %	110.2 %	–
0.2	107.1 %	109.3 %	110.2 %	–
0.7	107.5 %	109.7 %	111.2 %	–
1	108.0 %	110.1 %	112.1 %	–
1.5	108.2 %	110.1 %	112.0 %	–
3	94.2 %	94.2 %	87.8 %	–

Tabla 2.10: Example 3: Valores del índice de efectividad, $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})/J(e^{\text{ref}})$, – no disponible

contribución del error en todos los elementos de la malla. Sin embargo, esta representación espacial del error no es única: la representación local (restringida al elemento Ω_k) de la ecuación (2.30) depende de la selección de v_H . Diferentes opciones para v_H conducen a diversas distribuciones del error. Un primer intento para obtener un v_H óptimo y así una representación óptima del error es dada en el capítulo cuatro de este trabajo. Así, en la Figura 2.29 se dan las distribuciones locales del índice de efectividad asociados a la representación del error propuesta, $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}} - z_H)$. Los índices de efectividad están todos cerca de uno y la distribución es absolutamente uniforme. La Figura 2.29 demuestra que la estima propuesta del error produce también estimaciones precisas para las distribuciones espaciales del error, que es un aspecto clave en un marco de adaptatividad. La exactitud del índice de efectividad del error es también similar en el resto de los casos computados.

Para finalizar las distribuciones del error global y para el tiempo final $T = 63$ quedan dadas en las figuras 2.30 y 2.31 respectivamente.

2.7.4. Consideraciones finales

Los resultados obtenidos en la experimentación numérica permiten concluir que las estimas propuestas (recovery y residual) captan adecuadamente el compor-

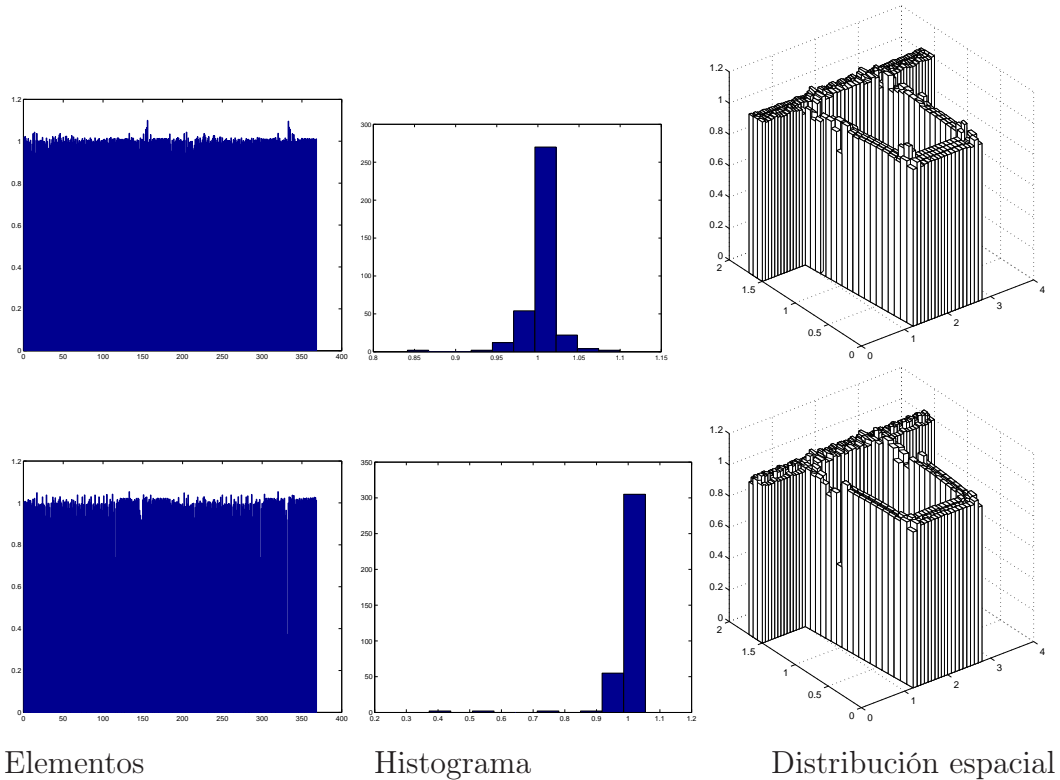


Figura 2.29: Primera fila: Índice de efectividad global $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})/\mathcal{R}^P(z_h)$. Segunda fila: Índice de efectividad para el tiempo final t_N .

tamiento del error tanto local como global.

La estima residual presenta en algunos casos mejor precisión que el recovery. Lo cual era de esperar, debido a que ésta se puede ver como una mejora del recovery. Sin embargo, para un proceso adaptativo resulta conveniente la estima recovery, pues las magnitudes del error tienen una mejor precisión que las dadas por la estima residual (ver la Figura 2.19). A esto hay que añadirle el alto costo computacional que representa el cálculo mediante la estima residual. Desde otro punto de vista, en problemas con una solución dual nada suave puede resultar altamente recomendable trabajar con la estima residual o una combinación de las dos.

Como se dijo anteriormente al definir las estimas, para el cálculo de las soluciones aproximadas z^{sua} y z^{res} se usó un polinomio de segundo grado aproximado por mínimos cuadrados para aproximar la parte espacial. No se

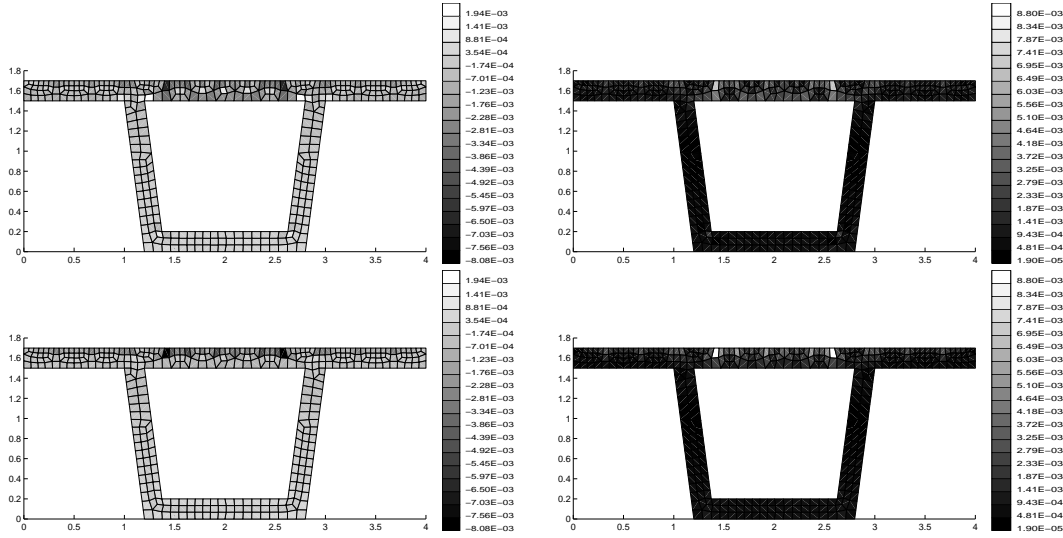


Figura 2.30: Error acumulado a lo largo del tiempo. Primera columna: suma de las contribuciones elementales del error $\sum_n \mathcal{R}_{kn}^p(\cdot)$. Segunda columna: suma de las contribuciones elementales del error en valor absoluto, $\sum_n |\mathcal{R}_{kn}^p(\cdot)|$. De arriba a abajo: $\mathcal{R}^p(z^{\text{sua}} - z_H)$ y $\mathcal{R}^p(z_h - z_H)$.

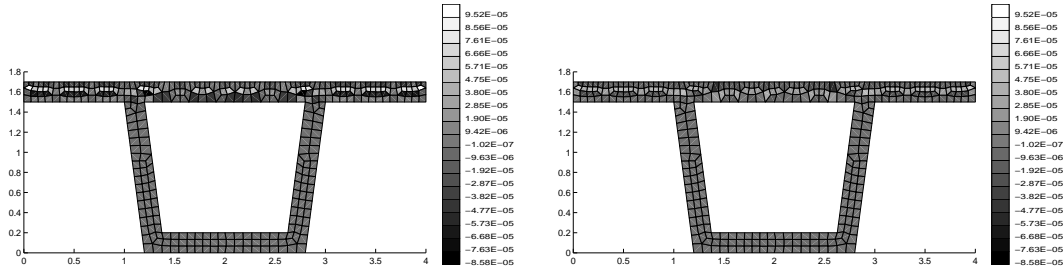


Figura 2.31: Distribución del error en el tiempo final $t_N = 63$. $\mathcal{R}^p(z^{\text{sua}} - z_H)$ y $\mathcal{R}^p(z_h - z_H)$.

han usado de grado superior debido al mal condicionamiento de las ecuaciones normales y a los pocos grados de libertad que existen en los patch de la frontera del dominio. Experimentaciones numéricas realizadas con polinomios de tercer orden (o superior) dieron como resultado valores de efectividad peor que el caso presentado.

En el capítulo 3 se analizan diferentes posibilidades para hacer el recovery. Así, en el siguiente capítulo se hace un análisis de distintas representaciones del error que se pueden definir para cantidades de interés. Estas representaciones serán evaluadas en estimas definidas a partir de un recovery en tensiones o desplazamientos. Luego, en el capítulo 4 se discutirán criterios de remallado para

cantidades de interés y los enfoques para lograr optimizar las contribuciones locales del error en el proceso adaptativo. Para facilitar la presentación de los resultados, en estos capítulos se trabaja con problemas elípticos o mecánicos elásticos.

Capítulo 3

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

3.1. Introducción

En el capítulo anterior se definieron dos estimas del error que proporcionaron resultados aceptables para la estima del error en cantidades de interés de problemas parabólicos. Además, quedó evidenciado el fenómeno de cambio de signo que presentan las contribuciones locales del error. Sin embargo, nada se dijo sobre la representación del error utilizada ni se llevó a cabo ningún estudio que permita tener idea, si la precisión del estimador depende o no de la representación que se utilice para su evaluación.

Debido al interés de analizar el comportamiento del error en la componente espacial, en este capítulo se analizan, para el caso de problemas térmicos (estacionarios) o problemas mecánicos, tres formas para representar el error con dos estrategias de postproceso para la estima del mismo. El hecho de trabajar con problemas estacionarios no resta validez a los resultados y sin embargo facilita

la presentación y el análisis de las ideas.

Ahora bien, si $B(\cdot, \cdot)$ es una forma bilineal simétrica, la combinación de estimas de error en norma energética para los problemas primal y dual permite estimar cotas del error en la cantidad de interés (ver, las reseñas [36, 37, 38, 39, 40] dadas previamente en la introducción del trabajo). Desafortunadamente, extensión de estas acotaciones al caso de formas bilineales no simétricas como las que surgen en problemas parabólicos (ver la ecuación (2.9)) no es trivial y es objeto de investigaciones en la actualidad. En este trabajo, no se pretende estimar cotas para el error en la cantidad de interés sino obtener buenas estimas, sin garantizar la acotación.

Como ya se ha dicho, 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 Rheinboldt [68]. La otra alternativa está basada en los estimadores por postproceso (suavizado o recovery) que se basan originalmente en el estimador de Zienkiewicz y Zhu [33]. Versiones de estos dos tipos de estimadores, en el contexto de estima de cantidades de interés, fueron dadas en el capítulo anterior. Ahora, en este capítulo, se analiza a fondo el uso de estimadores de postproceso.

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 $B(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon})$) 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 $\mathcal{R}^P(\boldsymbol{\varepsilon})$) (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” (siendo la segunda una pura evaluación del residuo, es decir explícita). En estos casos, se deben estimar desplazamientos en lugar de tensiones.

Las distribuciones locales del error asociadas a las representaciones del error $\mathcal{R}^P(\boldsymbol{\varepsilon})$ y $\mathcal{R}^D(\mathbf{e})$ se expresan a través de los nodos de discretización (ver Morin,

Nochetto y Siebert [57]). 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 fuerte (ver, por ejemplo, los trabajos de Rannacher y colaboradores agrupados, recientemente, en la monografía [32]).

En este capítulo 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 en [34, 35]. Para el postproceso de desplazamientos se siguen las ideas dadas por Wiberg y colaboradores [69, 52].

El resto del capítulo se estructura de la siguiente manera. En el apartado 3.2 se introduce el problema modelo, el problema dual y la notación necesaria. En 3.3 se derivan las representaciones del error a ser analizadas y se introduce la representación residual nodal del error. En el apartado 3.4 se plantean los estimadores que se van a utilizar y se discuten aspectos prácticos de su implementación. Finalmente, en 3.5, se presentan los ejemplos numéricos tanto para problemas térmicos como mecánicos y las conclusiones más relevantes.

3.2. Planteamiento del problema

3.2.1. 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:

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = \mathbf{f} \quad \text{en } \Omega \quad (3.1a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \quad \text{en } \Gamma_N \quad (3.1b)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{en } \Gamma_D, \quad (3.1c)$$

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, \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 (3.1c) 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 definen 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 (3.1), usando el método de elementos finitos (MEF), es necesario establecer su formulación variacional: encontrar $\mathbf{u} \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = L(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \quad (3.2)$$

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

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot D^{-1} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}) d\Omega, \quad L(\mathbf{v}) := \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} ds, \quad (3.3)$$

y D es el tensor de Hooke.

El problema (3.2) se aproxima con el MEF; se utiliza una discretización asociada a una partición de Ω , en elementos Ω_k , $k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}}$, 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

$$B(\mathbf{u}_H, \mathbf{v}) = L(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_H. \quad (3.4)$$

3.2.2. 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 (3.2), resulta la ecuación del error

$$B(\mathbf{e}, \mathbf{v}) = \mathcal{R}^P(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \quad (3.5)$$

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

$$\mathcal{R}^P(\mathbf{v}) = L(\mathbf{v}) - B(\mathbf{u}_H, \mathbf{v}). \quad (3.6)$$

Éste puede interpretarse como el término fuente de error. Además, se tiene que $\mathcal{R}^P(\mathbf{v}) = 0, \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_H$, (ver (3.6)): 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 (3.5)

$$B(\mathbf{e}^{\text{ref}}, \mathbf{v}) = \mathcal{R}^P(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_h. \quad (3.7)$$

3.2.3. 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 (3.5) y luego obtener $J(\mathbf{e})$. Sin embargo, el problema

(3.5) aún en su versión discreta (3.7) 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

$$B(\mathbf{v}, \mathbf{z}) = J(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \quad (3.8)$$

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 (3.2) y (3.8) se tiene

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

Desafortunadamente, el problema dual (3.8) presenta las mismas dificultades de resolución que el problema primal (3.2) 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:

$$B(\mathbf{v}, \mathbf{z}_H) = J(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_H. \quad (3.9)$$

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

$$B(\mathbf{v}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \quad (3.10)$$

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

$$\mathcal{R}^D(\mathbf{v}) = J(\mathbf{v}) - B(\mathbf{v}, \mathbf{z}_H). \quad (3.11)$$

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

$$B(\mathbf{v}, \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_h. \quad (3.12)$$

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

$$J(\mathbf{u}) = (\mathbf{j}, \mathbf{u}), \quad (3.13)$$

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 (3.8) es

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) = \mathbf{j} \quad \text{en } \Omega \quad (3.14a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{en } \Gamma_N \quad (3.14b)$$

$$\mathbf{z} = \mathbf{0} \quad \text{en } \Gamma_D, \quad (3.14c)$$

En los ejemplos numéricos que se presentan en el apartado 3.5, 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 :

$$J(\mathbf{u}) := \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) W_{\epsilon}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) d\Omega. \quad (3.15)$$

Al eliminar las singularidades se palian 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:

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

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

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

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.

3.3. Representación del error

3.3.1. Representación global

Teorema 3 Sean $\mathbf{u}_H, \mathbf{z}_H$ aproximaciones en \mathbf{V}_H de los problemas primal y dual (soluciones de (3.4) y (3.9)). Entonces el error en la cantidad de interés asociado a estas soluciones $J(\mathbf{e})$ se puede representar de las siguientes formas:

$$J(\mathbf{e}) = B(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.16a)$$

$$= \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.16b)$$

$$= \mathcal{R}^D(\mathbf{e}), \quad (3.16c)$$

donde \mathcal{R}^P y \mathcal{R}^D representan los residuos del problema primal y dual dados por (3.6) y (3.11) respectivamente.

Demostración: De la ortogonalidad de Galerkin, se deduce que

$$B(\mathbf{e}, \mathbf{z}_H) = \mathcal{R}^P(\mathbf{z}_H) = 0. \quad (3.17)$$

Por otro lado, \mathbf{v} puede ser reemplazada por \mathbf{e} en (3.8), pues $\mathbf{e} \in \mathbf{V}$, así

$$J(\mathbf{e}) = B(\mathbf{e}, \mathbf{z}). \quad (3.18)$$

Combinando (3.17) y (3.18), se tiene $J(\mathbf{e}) = B(\mathbf{e}, \mathbf{z}) - B(\mathbf{e}, \mathbf{z}_H) = B(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon})$.

La solución, \mathbf{z} , del problema dual (3.8) 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 (3.5), esto es

$$B(\mathbf{e}, \mathbf{z}) = \mathcal{R}^P(\mathbf{z}). \quad (3.19)$$

Usando (3.18) y (3.19) junto a la propiedad de ortogonalidad dada en (3.17) se obtiene la igualdad (3.16b).

A partir de (3.16a) y (3.10), se obtiene $J(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^D(\mathbf{e})$, lo cual termina la prueba. ■

La representación (3.16a) es estándar y se ha utilizado profusamente ya que permite estimar $J(\mathbf{e})$ a partir de estimas de \mathbf{e} y $\boldsymbol{\varepsilon}$ 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 (3.16a) y se obtiene una estima de $J(\mathbf{e})$. Sin embargo, las representaciones (3.16b) y (3.16c) 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 (3.16b) y (3.16c) son dos:

- no basta haber estimado el flujo de \mathbf{e} o de $\boldsymbol{\varepsilon}$: 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 (3.16b) y (3.16c) 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.

3.3.2. 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 un proceso de adaptatividad de la malla para aproximar eficientemente esta cantidad. Además, en un proceso adaptativo 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 (3.16a) y (3.16b) quedan dadas por

$$J(\mathbf{e}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} \mathcal{R}_k^{\text{P}}(\boldsymbol{\varepsilon}), \quad (3.20)$$

donde $B_k(\cdot, \cdot)$ representa la restricción de $B(\cdot, \cdot)$ y $\mathcal{R}_k^{\mathbb{P}}(\boldsymbol{\varepsilon})$ la restricción del residuo al elemento Ω_k de la malla. Si bien (3.16a) y (3.16b) son representaciones equivalentes desde el punto de vista global, las distribuciones espaciales del error que se infieren de (3.20) son distintas, es decir $B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon}) \neq \mathcal{R}_k^{\mathbb{P}}(\boldsymbol{\varepsilon})$. De hecho se tiene que

$$\mathcal{R}_k^{\mathbb{P}}(\boldsymbol{\varepsilon}) = B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon}) + \int_{\partial\Omega_k} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \boldsymbol{\varepsilon} d\Gamma. \quad (3.21)$$

De forma análoga la representación (3.16c) define otra distribución espacial distinta.

Como queda reflejado en (3.21), la distribución local, elemento a elemento, que proporcionan los valores de $\mathcal{R}_k^{\mathbb{P}}(\boldsymbol{\varepsilon})$ no es, a diferencia de la asociada a $B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon})$, una medida local del error fácilmente interpretable.

En consecuencia, para obtener distribuciones de error a partir de las representaciones globales (3.16b) y (3.16c), 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

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} N_i(\mathbf{x}) = 1, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (3.22)$$

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 (ver Figura 1 para la representación de N_i y ω_i en 2D). Usando la propiedad (3.22) y la linealidad de $\mathcal{R}^{\mathbb{P}}(\cdot)$ se tiene

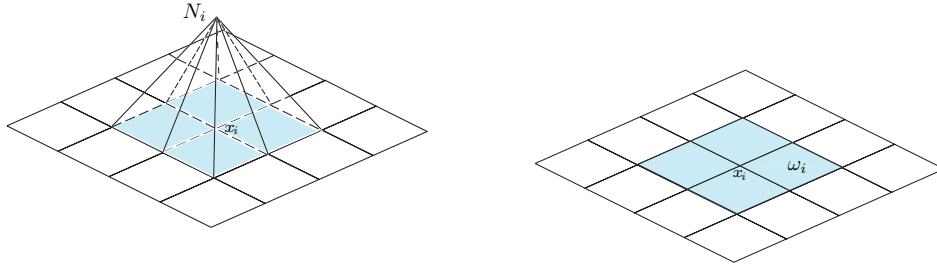


Figura 3.1: Representación de la función N_i y su soporte ω_i en una malla de cuadriláteros.

que

$$J(\mathbf{e}) = \mathcal{R}^P \left(\boldsymbol{\varepsilon} \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} N_i \right) = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\varepsilon}), \quad (3.23)$$

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

$$\mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\varepsilon}) = \int_{\omega_i} \mathbf{f} \cdot N_i \boldsymbol{\varepsilon} \, d\Omega - \int_{\omega_i} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_H) \cdot D^{-1} \boldsymbol{\sigma}(N_i \boldsymbol{\varepsilon}) \, d\Omega. \quad (3.24)$$

La contribución $\mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\varepsilon})$ 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 (3.16c)

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

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

Así, la representaciones del error (3.16) inducen las siguientes representaciones de la distribución espacial del error:

$$J(\mathbf{e}) = \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} B_k(\mathbf{e}, \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.25a)$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(N_i \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3.25b)$$

$$= \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^D(N_i \mathbf{e}), \quad (3.25c)$$

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.

3.3.3. Aspectos computacionales

En las representaciones discretas del error de (3.25b) y (3.25c) las funciones $N_i \mathbf{e}^{\text{ref}}$ y $N_i \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}}$ 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 (3.25b) se tiene

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

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 $\mathcal{R}^P(\Pi_h [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}} N_i])$ para definir los valores locales del error en vez de $\mathcal{R}^P(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}} N_i)$. Esto permite una simplificación significativa en cuanto a implementación y costo de cálculo de las estimas.

Por otro lado, aunque en principio $\mathcal{R}^P(\Pi_h [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}} N_i]) \neq \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}} N_i)$, en [58] se prueba que el comportamiento de las dos contribuciones locales es prácticamente equivalente.

3.4. Estima del error

Hasta ahora, se ha visto como 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, $\boldsymbol{\varepsilon}$. 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 $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}} := \mathbf{z}_h - \mathbf{z}_H$. Sin embargo, el cálculo global de \mathbf{u}_h y \mathbf{z}_h en \mathbf{V}_h conlleva un 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 . 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 $\boldsymbol{\varepsilon}^*$). 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 en [34, 35]. Obviamente esta opción sólo se puede utilizar para determinar $J(\mathbf{e})$ según la representación del error (3.16a) y no con (3.16b) o (3.16c). En la segunda, se define un postproceso de la incógnita \mathbf{z} (*desplazamientos*), siguiendo las ideas introducidas por Wiberg en [44, 52].

3.4.1. Estima usando suavizado de tensiones (SPR)

Las tensiones $\boldsymbol{\sigma}_H = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}_H)$ 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 $\boldsymbol{\sigma}^*$ en un espacio similar a \mathbf{V}_H , es decir interpoladas con las funciones base $N_1, N_2, \dots, N_{n_{\text{poin}}}$ ($\boldsymbol{\sigma}^* := \bar{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{N}$) y que aproximen a las tensiones exactas $\boldsymbol{\sigma}$ mejor que $\boldsymbol{\sigma}_H$. Es decir, el objetivo consiste en remplazar el valor exacto del error $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma := \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) - \boldsymbol{\sigma}_H$ ($\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{ref}} := \boldsymbol{\sigma}_h(\mathbf{z}_h) - \boldsymbol{\sigma}_H$) por la aproximación $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{ref}} := \boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_H$, suponiendo que $\boldsymbol{\sigma}^*$ es mucho más cercano a $\boldsymbol{\sigma}$ que $\boldsymbol{\sigma}_H$.

El suavizado SPR se basa en una aproximación por mínimos cuadrados local del campo de tensiones $\boldsymbol{\sigma}_H$. Así, para cada nodo de la malla \mathbf{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, este se evalúa en \mathbf{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 3.2 se ilustran diversas configuraciones de patches y datos que pueden dar problemas y requieren agrandar el patch para contar con suficientes datos.

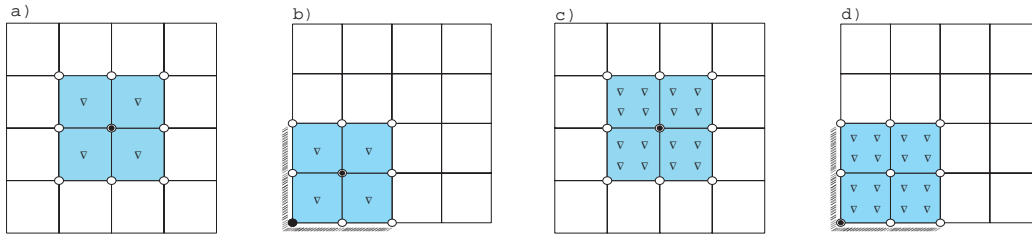


Figura 3.2: SPR en elementos cuadriláteros bilineales: o nodos. En las gráficas a) y b) se ilustra el ajuste discreto a partir de puntos de muestreo *superconvergentes* (∇) que, en el caso b), requieren ampliar el patch de uno a cuatro elementos. En las gráficas c) y d) se ilustra el ajuste continuo 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 (ver Figura 3.2 c)).

- 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 3.2 d) ilustra el patch grande en el caso en que el nodo de ensamblaje está ubicado en una esquina del contorno.

3.4.2. 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.

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 (ver Figura 3.3). 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 3.3) 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 3.3). 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 patch.

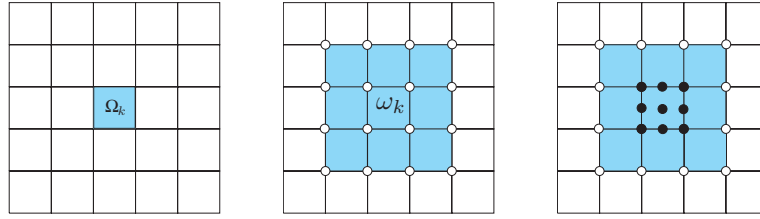


Figura 3.3: Ilustración del proceso recovery en 2D. Cada elemento de la malla Ω_k (gráfica de la izquierda) es asociado con un patch ω_k (sombreado en la gráfica del centro) y los nodos correspondientes de la malla H (marcados con \circ). Un polinomio es ajustado a los valores de los nodos \circ usando 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).

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,

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

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

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

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

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

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 .

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 esto 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 disponer de más información para hacer el ajuste por mínimos cuadrados. Esto conduce a tener que variar la definición de los patches, aumentando su tamaño.

3.4.3. Estimadores propuestos

Utilizando el método SPR (apartado 3.4.1) se aproxima el error en tensiones (o flujos) del problema primal y del problema dual. Esto es, se suaviza $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_H)$ y $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}_H)$ para obtener $\boldsymbol{\sigma}_u^*$ y $\boldsymbol{\sigma}_z^*$ y, así, calcular $\boldsymbol{\sigma}_e^* = \boldsymbol{\sigma}_u^* - \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_H)$ y $\boldsymbol{\sigma}_\varepsilon^* = \boldsymbol{\sigma}_z^* - \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}_H)$ que son aproximaciones a $\boldsymbol{\sigma}_e$ y $\boldsymbol{\sigma}_\varepsilon$, respectivamente. Además, utilizando el suavizado de desplazamientos que se describe en el apartado 3.4.2, 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 $\boldsymbol{\varepsilon}^* = \mathbf{z}^* - \mathbf{z}_H$.

Combinando estas aproximaciones en las representaciones del error (3.16) se obtienen 4 estimadores:

$$E_1 := \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_e^* \cdot D^{-1} \boldsymbol{\sigma}_\varepsilon^* d\Omega \quad (3.26a)$$

$$E_2 := B(\mathbf{e}^*, \boldsymbol{\varepsilon}^*) \quad (3.26b)$$

$$E_3 := \mathcal{R}^P(\boldsymbol{\varepsilon}^*) \quad (3.26c)$$

$$E_4 := \mathcal{R}^D(\mathbf{e}^*) \quad (3.26d)$$

Obsérvese que E_1 y E_2 corresponden a la representación (3.16a), el primero asociado a la estima con SPR y el segundo al suavizado de desplazamientos.

Según se ha mencionado en el apartado 3.3.2, 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.

3.4.4. Análisis del estimador por postproceso de desplazamientos

Dado que \mathbf{e}^* y $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ pertenecen a \mathbf{V}_h (espacio de referencia) el objetivo del postproceso es conseguir que \mathbf{e}^* y $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ aproximen lo mejor posible a \mathbf{e}^{ref} y $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ref}}$ (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:

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

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:

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

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.

3.5. Experimentación numérica

En esta sección, se presentan los resultados numéricos obtenidos al aplicar las estimas propuestas a las representaciones del error dadas en (3.16). 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 Zhu en [33] 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* para el error de referencia. Es decir

$$I^{\text{eff}} := \frac{\Phi}{J(\mathbf{e}^{\text{ref}})} \times 100$$

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 este 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_{abs}^{eff} que se define por

$$I_{abs}^{\text{eff}} := \frac{\sum_k |\Phi_k|}{\sum_k |J_k|} \times 100.$$

La cantidad I_{abs}^{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_{abs}^{eff} son idénticas. En la experimentación numérica se analizan las dos cantidades.

3.5.1. Ejemplo 1: problema térmico

Se resuelve (3.1) para el caso térmico (donde $\sigma(\mathbf{u})$ 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 3.4 (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 (3.15) (para el caso escalar) con $\mathbf{x}_0 = (0.5, 0.2)$; la solución del problema dual queda representada en la Figura 3.4 (derecha). Las soluciones aproximadas \mathbf{u}_H y \mathbf{z}_H son calculadas

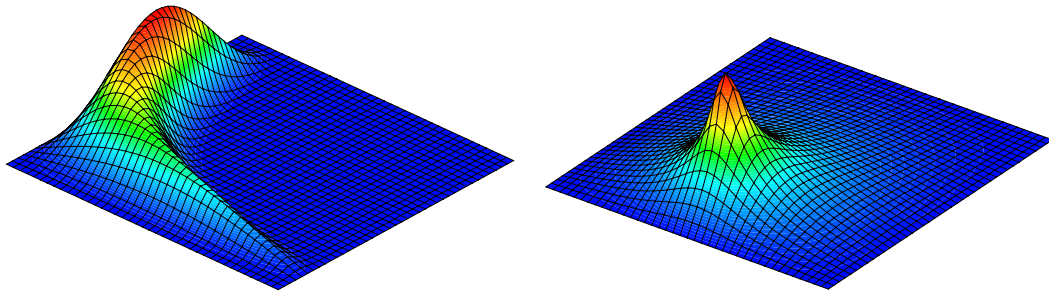


Figura 3.4: Ejemplo 1: Izquierda: Solución primal \mathbf{u}_h . Derecha: Solución dual \mathbf{z}_h

usando elementos bilineales ($p = 1$) en una secuencia 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).

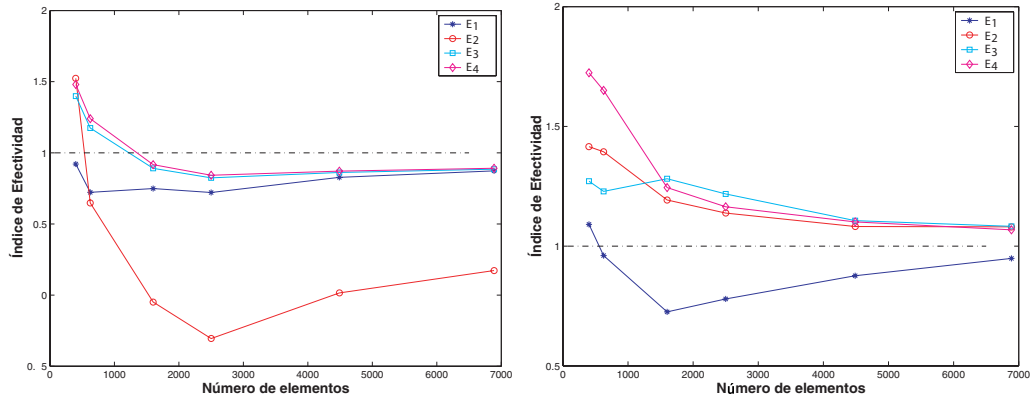
Los resultados numéricos para la sucesión de mallas se presentan en las Tablas 3.1 y 3.2. En la Tabla 3.1 se da el error relativo de referencia $J(\mathbf{e}^{ref})/J(\mathbf{u}_h)$

Malla	nelem	Error relativo para:				
		$J(\mathbf{e}^{\text{ref}})$	E_1	E_2	E_3	E_4
1	400	0.146×10^{-1}	0.135×10^{-1}	0.223×10^{-1}	0.204×10^{-1}	0.216×10^{-1}
2	625	0.749×10^{-2}	0.541×10^{-2}	0.485×10^{-2}	0.879×10^{-2}	0.929×10^{-2}
3	1600	0.245×10^{-2}	0.184×10^{-2}	-0.120×10^{-3}	0.219×10^{-2}	0.225×10^{-2}
4	2500	0.131×10^{-2}	0.943×10^{-3}	-0.399×10^{-3}	0.108×10^{-2}	0.102×10^{-2}
5	4489	0.685×10^{-3}	0.567×10^{-3}	0.103×10^{-4}	0.590×10^{-3}	0.597×10^{-3}
6	6889	0.402×10^{-3}	0.351×10^{-3}	0.694×10^{-4}	0.355×10^{-3}	0.358×10^{-3}

Tabla 3.1: Ejemplo 1: 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	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 %

Tabla 3.2: Ejemplo 1: Índices de efectividad del error estimado.

Figura 3.5: Ejemplo 1: Índices de efectividad: I^{eff} en la gráfica de la izquierda y $I_{\text{abs}}^{\text{eff}}$ a la derecha.

y sus distintas estimas, E_1 , E_2 , E_3 y E_4 . Mientras, en la Tabla 3.2 se presentan los porcentajes de efectividad que logra cada estima en la sucesivas mallas.

Gráficamente estos resultados se muestran en las Figuras 3.5, 3.6 y 3.7. La Figura 3.5 presenta los índices de efectividad obtenidos. El error relativo de referencia, $B(\mathbf{e}^{\text{ref}}, \mathbf{\epsilon}^{\text{ref}})$, junto a los errores relativos estimados son presentados

en la Figura 3.6.

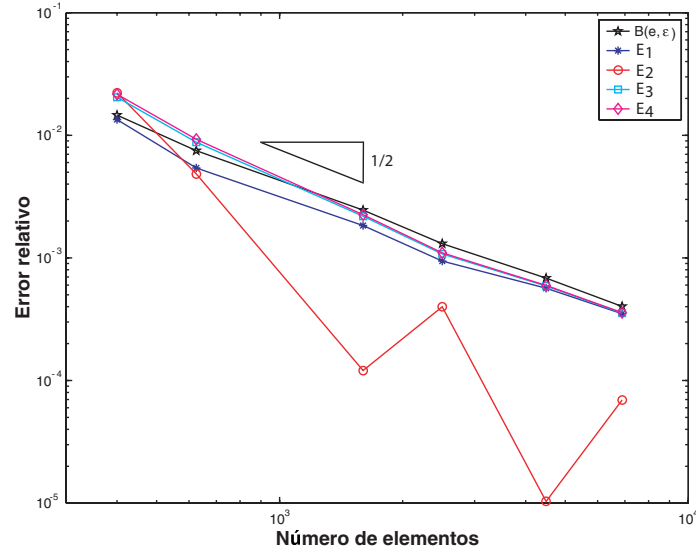


Figura 3.6: Ejemplo 1: Error relativo de referencia y sus estimas.

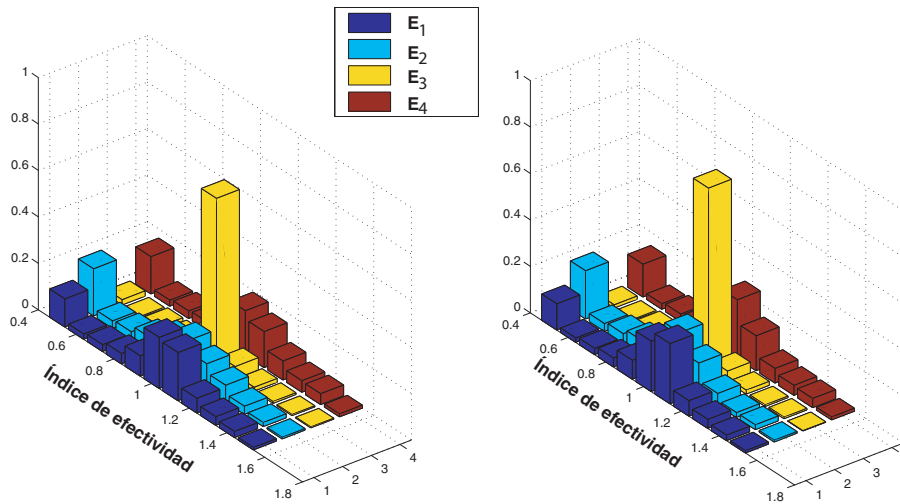


Figura 3.7: Ejemplo 1: Histograma para los índices de efectividad normalizados en las mallas 5 y 6. Fila 1: E_1 ; Fila 2: E_2 ; Fila 3: E_3 y Fila 4: E_4 .

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 (véase la Figura 3.6). 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.

La Figura 3.7 ilustra los histogramas, en las mallas 5 y 6, para los índice de efectividad normalizados. El estimador E_3 presenta los mejores resultados al estimar los índice 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.

3.5.2. Ejemplo 2: problema mecánico elástico (Presa de Zienkiewicz)

Se desea aproximar (3.1) para el dominio dado en la Figura 3.8. 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 3.1×10^7 , coeficiente de Poisson 0.25 y densidad del hormigón 2.3×10^3 .

La cantidad de interés viene dada por el desplazamiento en y del punto $\mathbf{x}_0 = (9.8, 2.3)$ (ubicado en la parte superior del túnel de la presa, ver Figura 3.8). 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.

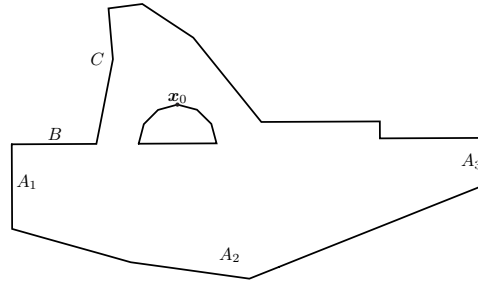


Figura 3.8: Ejemplo 2: Geometría del dominio

En este ejemplo, las soluciones de referencia son calculadas con un factor de refinamiento de $r = 8$.

Los resultados numéricos son presentados en las Tablas 3.3 y 3.4. Al igual que antes, la Tabla 3.3 muestra los errores relativos estimados junto al error relativo de referencia. Mientras, en la Tabla 3.4 se presentan los porcentajes de efectividad que logra cada estima en la sucesivas mallas. Los índices de efectividad de las distintas estimas junto a sus histogramas, para las mallas 7 y 8, quedan dados por las Figuras 3.9 y 3.11, respectivamente. Los histogramas en las otras mallas analizadas presentan características similares a las presentadas en la Figura 3.11. El error relativo de referencia y los errores relativos estimados están representados en la Figura 3.10.

Malla	nelem	Error relativo para:				
		$J(e^{\text{ref}})$	E_1	E_2	E_3	E_4
1	247	0.212×10^{-1}	0.331×10^{-1}	0.409×10^{-1}	0.151×10^{-1}	0.9426×10^{-2}
2	344	0.158×10^{-1}	0.275×10^{-1}	0.278×10^{-1}	0.116×10^{-1}	0.874×10^{-2}
3	628	0.748×10^{-2}	0.155×10^{-1}	0.143×10^{-1}	0.541×10^{-2}	0.298×10^{-2}
4	923	0.656×10^{-2}	0.122×10^{-1}	0.113×10^{-1}	0.465×10^{-2}	0.336×10^{-2}
5	1425	0.480×10^{-2}	0.800×10^{-2}	0.741×10^{-2}	0.317×10^{-2}	0.255×10^{-2}
6	2500	0.312×10^{-2}	0.504×10^{-2}	0.516×10^{-2}	0.216×10^{-2}	0.175×10^{-2}
7	3608	0.232×10^{-2}	0.361×10^{-2}	0.373×10^{-2}	0.149×10^{-2}	0.117×10^{-2}
8	4592	0.205×10^{-2}	0.293×10^{-2}	0.318×10^{-2}	0.134×10^{-2}	0.108×10^{-2}

Tabla 3.3: Ejemplo 2: Valores del error relativo de referencia y sus estimas.

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,

Malla	nelem	E_1		E_2		E_3		E_4	
		I^{eff}	I_{abs}^{eff}	I^{eff}	I_{abs}^{eff}	I^{eff}	I_{abs}^{eff}	I^{eff}	I_{abs}^{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 %

Tabla 3.4: Ejemplo 2: Índices de efectividad del error 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 ésta 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 similar, 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.

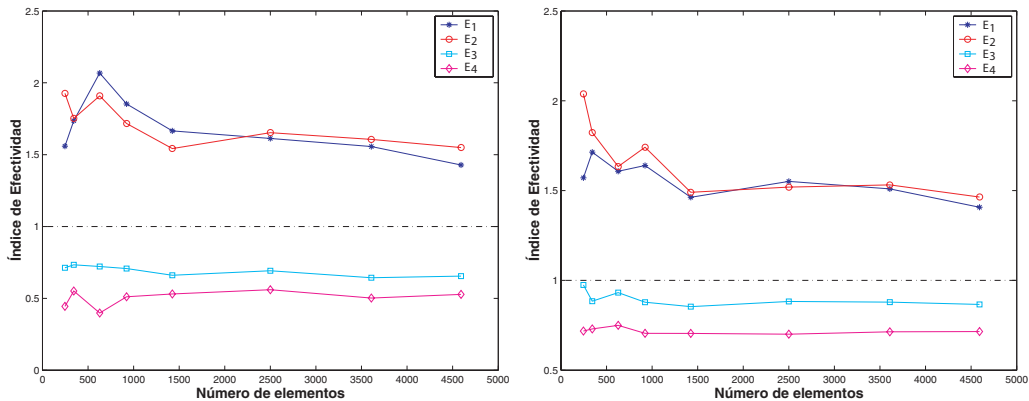


Figura 3.9: Ejemplo 2: Índices de efectividad: I^{eff} en la gráfica de la izquierda y I_{abs}^{eff} a la derecha.

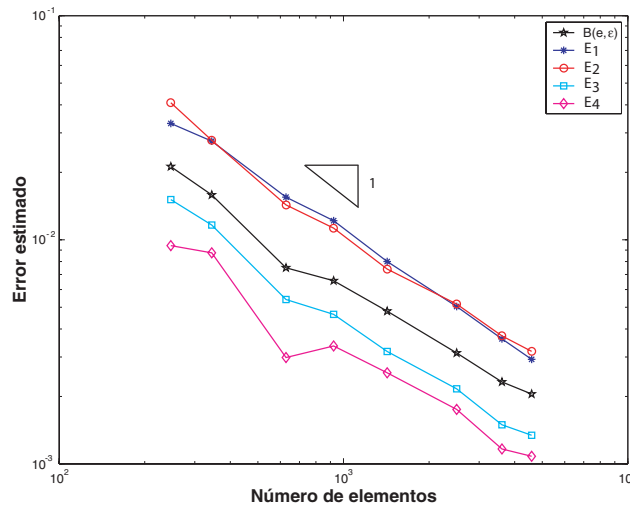
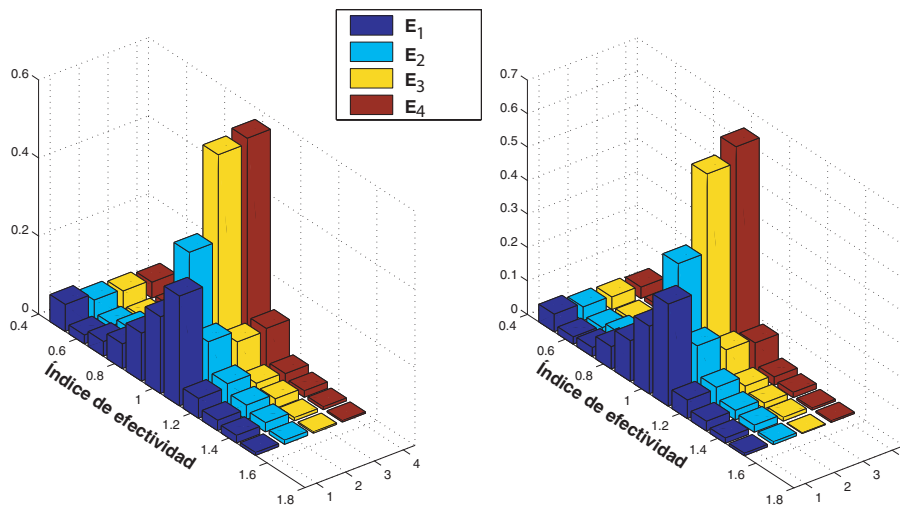


Figura 3.10: Ejemplo 2: Error relativo

Figura 3.11: 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 .

En busca de más información del comportamiento de los estimadores propuestos, éstos 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 \mathbf{x}_0 que define la cantidad de interés (adaptatividad heurística). Se analiza el error estimado en una sucesión de 6 mallas de 344, 627, 840,

1222, 1629, 2374 elementos. La Figura 3.12 ilustra las mallas de 344, 1222 y 2374 elementos. Los resultados para esta sucesión de mallas son representados en las Figuras 3.13 y 3.14. 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 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 $\|e^{\text{ref}}\|$ (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 sucesión de mallas, el error $\|e^{\text{ref}}\|$ decrece más rápidamente y la superconvergencia del SPR toma importancia. La convergencia del error es aproximadamente del orden $\mathcal{O}(H^2)$.

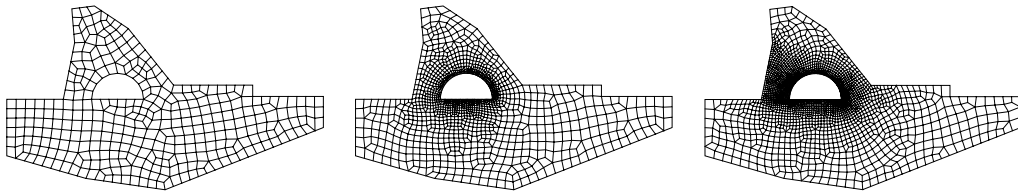


Figura 3.12: Ejemplo 2: De izquierda a derecha: Mallas de 344, 1222 y 2374 elementos con tamaño no uniforme.

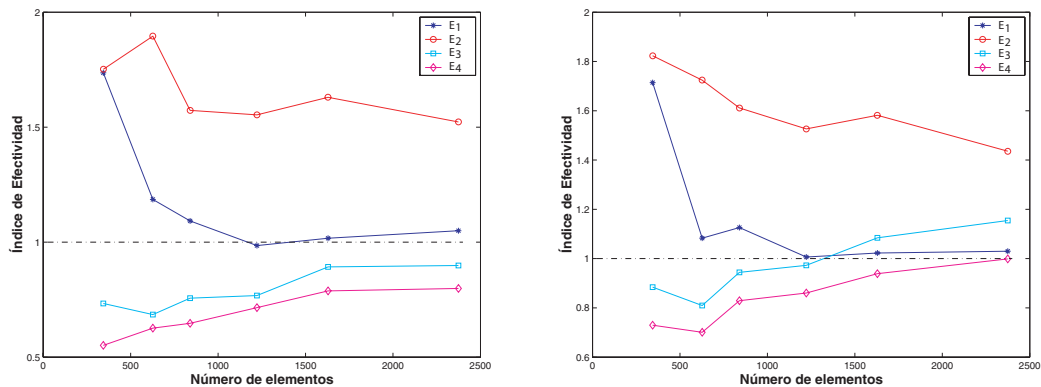


Figura 3.13: Ejemplo 2: Índices de efectividad para la segunda sucesión de mallas: I^{eff} en la gráfica de la izquierda y $I^{\text{eff}}_{\text{abs}}$ a la derecha.

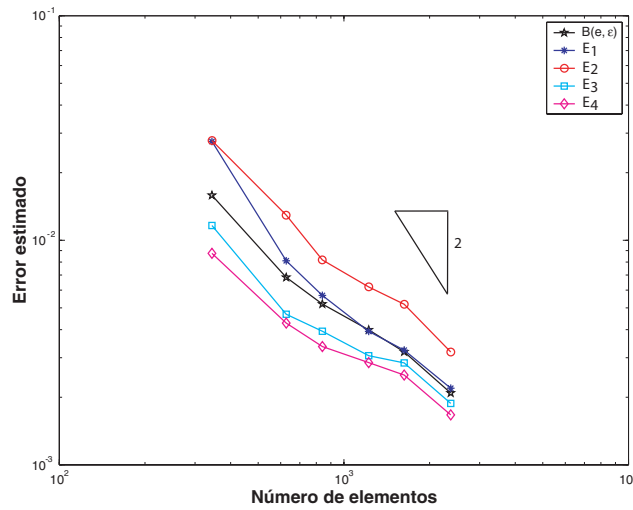


Figura 3.14: Ejemplo 2: Error relativo para la segunda sucesión de mallas.

3.5.3. 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 una distribuciones locales asociadas a los nodos y no a los elementos. Esto los hace aún más competitivos para utilizarlos 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.

Capítulo 4

Criterios de remallado y representación correcta del error para adaptatividad orientada al resultado

4.1. Introducción

En los dos capítulos anteriores se han desarrollado y analizado estimas del error en cantidades de interés aplicadas a distintas representaciones del error que toman en cuenta una o otra característica del problema. Esto es de por sí importante, pues permite conocer la magnitud global del error cometido al evaluar la cantidad de interés y su distribución en el dominio. Sin embargo, calcular y estimar el error no es suficiente para que el MEF pueda ser aplicado en problemas de ingeniería, donde se tiene un gran volumen de cálculo y se requiere gran precisión en los mismo. 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 necesario, además de la estima, un proceso adaptativo. Para llevar a cabo este proceso adaptativo es fundamental disponer de un generador de mallas. Así, la estima del error

permite localizar las zonas del dominio donde los elementos deben concentrarse (donde las contribuciones al error son grandes) y el generador de mallas produce la malla con el tamaño de elemento requerido en cada parte del dominio, según lo determinado después de estimar el error. El *criterio de remallado* es la expresión que traduce los resultados obtenidos (output) del estimador del error en una distribución espacial del tamaño de elemento *óptimo* para la nueva malla, que define el input del generador de mallas.

En el contexto de adaptatividad basada en la norma de energía, la atención se ha dedicado a los criterios de remallado que definen el tamaño del elemento como una función del error local que se utiliza para adaptatividad de *tipo h* . Entre otros, se pueden citar, los trabajos de Bettess y colaboradores [59, 60]; Zienkiewicz y Zhu [33]; Oñate y Bugeda [61]; Díez y Huerta [62]. Aunque, existen otras dos formas para plantear los criterios de remallado (denominadas r y p), aquí sólo nos concentraremos en los procesos de remallado tipo h ya que es el más general y sencillo de aplicar cuando se dispone de un generador de mallas como el desarrollado por Sarrate en [70]. En el marco de adaptatividad orientada al resultado, donde el objetivo es el control del error en una cierta cantidad de interés en lugar de la norma de energía, cada autor sigue su propia receta, basada a menudo en consideraciones heurísticas y sin ninguna exigencia en el diseño y optimalidad de la malla, ni en la representación del error utilizada (Prudhomme y Oden [39]; Peraire [63]; Parés y colaboradores [64]).

Las particularidades asociadas a los criterios de remallado en cantidades de interés se relacionan 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.

La carencia de unicidad para la distribución del error se presenta de las diversas representaciones posibles del error, muchas de ellas introducidas en el capítulo anterior. De esto, el error en la cantidad de interés puede 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.

En este capítulo se analiza y discute la forma general de una estrategia de remallado para la adaptatividad orientada al resultado en cualquier representación del error. Vale señalar que para la valoración del error no se ha estimado las soluciones que el mismo pueda requerir en su representación. En su lugar, se han usado soluciones de referencia definidas en una malla más fina que la malla original donde se realiza el cálculo.

El resto del capítulo se estructura de la siguiente manera: en el apartado 4.2 se plantea el problema modelo en un marco general, introduciendo la notación y las suposiciones básicas. En el apartado 4.3 y 4.4 se desarrollan las estrategias de remallado en cantidades de interés y se demuestra la optimalidad de una de ellas. En 4.5 se analiza la representación del error buscando tener una distribución óptima de las contribuciones locales del error. Finalmente, en el apartado 4.6, se presentan los resultados obtenidos de la experimentación

numérica tanto para problemas térmicos como mecánicos y las conclusiones más relevantes del capítulo.

4.2. Planteamiento del problema

4.2.1. Problema modelo

La función incógnita u es la solución de un problema general de contorno definido en $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, un dominio abierto, acotado y con frontera suave, donde d puede ser igual a 1, 2 o 3. La forma débil del problema queda dada como sigue: encontrar $u \in \mathbf{V}$ tal que

$$B(u, v) = L(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_0, \quad (4.1)$$

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

Para problemas elípticos auto-adjuntos, la forma bilineal $B(\cdot, \cdot)$ es simétrica y definida positiva. Sin embargo, se debe notar, que en todos los resultados que se siguen a lo largo del capítulo no nos restringimos a este caso. No obstante, y sin ninguna pérdida de generalidad, los ejemplos numéricos dados en el apartado 4.6 presentan esta propiedad.

4.2.2. Solución discreta y ecuación del error

La solución de elementos finitos u_H pertenece al espacio funcional discreto $\mathbf{V}_H \subset \mathbf{V}$, asociado a una malla con un tamaño de elemento característico H , y verifica

$$B(u_H, v) = L(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_{H0} \subset \mathbf{V}_0, \quad (4.2)$$

con \mathbf{V}_{H0} la contraparte discreta del espacio \mathbf{V}_0 . El error asociado a esta aproximación numérica, $e := u - u_H$, pertenece al espacio \mathbf{V}_0 y, al igual que en

(3.5), verifica la ecuación del error

$$B(e, v) = L(v) - B(u_{\text{H}}, v) =: \mathcal{R}^{\text{P}}(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_0, \quad (4.3)$$

donde, tal como se ha hecho hasta el momento, \mathcal{R}^{P} representa el residuo débil de la ecuación (4.1).

4.2.3. Cantidades de interés, problema dual y representación del error

Al igual que en los capítulos anteriores, el objetivo se centra en controlar la calidad numérica de la solución de elementos finitos u_{H} mediante una cierta cantidad de interés representada por un funcional lineal $J(\cdot)$. Para expresar el error en la cantidad de interés, $J(e)$, en términos de productos de energía se define el problema adjunto o dual: encontrar $z \in \mathbf{V}_0$ tal que

$$B(v, z) = J(v), \quad \forall v \in \mathbf{V}_0. \quad (4.4)$$

Entonces, tomando $v = e$ en el problema dual (4.4), se encuentra la siguiente representación del error

$$J(e) = B(e, z) = \mathcal{R}^{\text{P}}(z). \quad (4.5)$$

A partir de la propiedad de ortogonalidad de Galerkin ($B(e, v_{\text{H}}) = 0 \quad \forall v_{\text{H}} \in \mathbf{V}_{\text{H}0}$), la representación del error dada en (4.5) puede ser modificada introduciendo una función arbitraria v_{H}

$$J(e) = B(e, z - v_{\text{H}}) = \mathcal{R}^{\text{P}}(z - v_{\text{H}}). \quad (4.6)$$

En particular, tomando v_{H} como la solución del problema dual (4.4) en $\mathbf{V}_{\text{H}0}$, esto es $v_{\text{H}} = z_{\text{H}}$, el error en la cantidad de interés se expresa en términos de la combinación del error de los problemas primal y dual (ver Teorema 1 del capítulo anterior):

$$J(e) = B(e, \varepsilon) = \mathcal{R}^{\text{P}}(\varepsilon), \quad (4.7)$$

donde $\varepsilon := z - z_{\text{H}}$ es el error asociado a la aproximación numérica del problema dual. Distribuciones espaciales del error son asociadas con cada representación del error. Esto permite evaluar las contribuciones al error de todas las zonas del dominio.

4.2.4. Distribución espacial del error

Las contribuciones locales del error son usualmente asociadas con los elementos de la malla que induce el espacio \mathbf{V}_{H_0} . La restricción natural para todo elemento Ω_k , $k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}}$, con \mathbf{n}_{elem} el número de elementos en la malla de tamaño característico H , a partir de sus formas integrales en la representación del error (4.6) (o el caso particular (4.7)) produce una distribución del error elemento por elemento dada por:

$$J(e) = \sum_{k=1}^{\mathbf{n}_{\text{elem}}} B_k(e, z - v_H) = \sum_{k=1}^{\mathbf{n}_{\text{elem}}} \mathcal{R}_k^{\text{P}}(e, z - v_H), \quad (4.8)$$

donde $B_k(\cdot, \cdot)$ es la restricción de $B(\cdot, \cdot)$ al elemento Ω_k y $\mathcal{R}_k^{\text{P}}(\cdot) := L_k(\cdot) - B_k(u_H, \cdot)$, con $L_k(\cdot)$ la restricción de $L(\cdot)$ al elemento Ω_k . Nótese que las dos cantidades locales $B_k(e, z - v_H)$ y $\mathcal{R}_k^{\text{P}}(e, z - v_H)$ son las contribuciones elementales al error, las cuales son diferentes y no siempre positivas. Es más, la función v_H , se toma arbitrariamente en \mathbf{V}_{H_0} y cada opción para el v_H induce una distribución del error diferente. Como se discute en lo que sigue, la selección natural $v_H = z_H$ es a menudo la mejor opción.

4.3. Marco general para los criterios de remallado

4.3.1. Notación y objetivos

Una vez se ha estimado el error, un ingrediente importante en el proceso adaptativo es el criterio de remallado. El criterio de remallado toma como input la distribución de las medidas elementales del error y produce la información requerida para construir una nueva malla. 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. Desde un punto de vista práctico, el criterio de remallado es una expresión que traduce los valores locales del error en los tamaños del elemento deseados en cada parte del dominio.

Sea E el error funcional que se desea controlar. En un proceso de adaptatividad normal, E es la norma de energía del error (al cuadrado), $B(e, e)$, en adaptatividad orientada al resultado E es precisamente $J(e)$.

La cantidad E se puede descomponer en contribuciones elementales E_k , para $k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}}$,

$$E = \sum_{k=1}^{\mathbf{n}_{\text{elem}}} E_k. \quad (4.9)$$

Cada elemento de la malla es denotado con Ω_k (es habitual además usar la misma notación para definir el área o volumen del elemento) y la medida de este elemento es denotada por H_k . Si los elementos en la malla son lo suficientemente regulares (no demasiado distorsionados), el tamaño de cada elemento se toma como

$$H_k = \Omega_k^{1/d}. \quad (4.10)$$

Todas las cantidades que hacen referencia a la nueva malla se denotan con un acento circunflejo ($\hat{\cdot}$). Así, el número de elementos y tamaño de elemento característico son denotados por $\hat{\mathbf{n}}_{\text{elem}}$ y \hat{H} respectivamente. El tamaño de cada elemento local en la nueva malla debería ser denotado con $\hat{H}_{\hat{k}}$ para $\hat{k} = 1, \dots, \hat{\mathbf{n}}_{\text{elem}}$. Sin embargo, el criterio de remallado proporciona el mismo tamaño de elemento en la nueva malla para todos los elementos que se forman a partir del elemento Ω_k . Así, resulta más conveniente usar la notación \hat{H}_k para denotar el tamaño de elemento en la nueva malla asociado al elemento Ω_k . Por supuesto, cada valor de \hat{H}_k puede estar asociado a varios elementos, $\hat{\Omega}_{\hat{k}}$, de la nueva malla, o lo que es lo mismo, varios valores de $\hat{H}_{\hat{k}}$.

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

Criterio de aceptabilidad: se dice que una solución aproximada por elementos finitos es aceptable si el error asociado es inferior a un cierto valor de tolerancia dado. Habitualmente, el usuario especifica un error relativo máximo, TOL, y la solución \hat{u}_H (solución en la nueva malla) se considera aceptable si el error

asociado, $\widehat{e} := u - \widehat{u}_H$, verifica

$$|J(\widehat{e})| \leq \text{TOL}|J(u)|. \quad (4.11)$$

Sin embargo, un criterio de aceptabilidad global como éste no asegura que se obtenga una cierta precisión en todos los puntos del dominio. Así, es posible también prescribir criterios de aceptabilidad local, de manera que la solución obtenida tenga una precisión uniforme en todo el dominio (ver Díez [54]; Díez y Huerta [62]).

Criterio de optimalidad: Los criterios de optimalidad han de describir qué se entiende por una malla óptima. Estos criterios, en general, se han definido a partir de algún criterio de uniformidad de la distribución espacial del error: se dice que la malla es óptima si el error asociado a la solución que proporciona es uniforme.

4.3.2. Hipótesis requeridas: orden de convergencia local, distribución óptima del error

Derivar un criterio de remallado requiere establecer algunas hipótesis, tanto en la convergencia local de las soluciones como en la distribución del error en la malla óptima.

Primero, una estima a priori es necesaria para las contribuciones locales del error. Normalmente,

$$E_k = C(H_k)^\alpha, \quad \text{para } k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}}, \quad (4.12)$$

donde C es una constante independiente del tamaño de la malla y α es el orden de convergencia local de dicha contribución local. El valor de α se deriva de las estimas a priori del error, usualmente en norma de energía debido a que las contribuciones locales del error, E_k , son definidas a partir de una representación del error que implica productos de energía de las cantidades de error, según lo descrito en la ecuación (4.7). Este orden de convergencia se asume además para la nueva malla, esto es

$$\widehat{E}_{\widehat{k}} = C(\widehat{H}_{\widehat{k}})^\alpha, \quad \text{para } \widehat{k} = 1, \dots, \widehat{\mathbf{n}}_{\text{elem}}, \quad (4.13)$$

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.

Por ejemplo, la nueva malla se busca tal que todas las contribuciones elementales del error sean iguales. Es decir, todos los $\widehat{E}_{\widehat{k}}$, para $\widehat{k} = 1, \dots, \widehat{n}_{\text{elem}}$, son iguales y no dependen de \widehat{k} .

De hecho éste es el criterio de remallado propuesto por Li y Bettess [59, 60] para adaptatividad en norma de energía. Este criterio se ha desarrollado para crear las mallas con el mínimo número de elementos posible y la obtención de los valores prescritos del error en norma de energía. En la siguiente sección se prueba que este criterio es también óptimo para el caso de adaptatividad orientada al resultado.

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

$$\widehat{E}_{\widehat{k}} = \widehat{E} / \widehat{n}_{\text{elem}}, \quad \text{para } \widehat{k} = 1, \dots, \widehat{n}_{\text{elem}}. \quad (4.14)$$

Obsérvese que el número de elementos, $\widehat{n}_{\text{elem}}$, de la nueva malla no es conocido a priori; pero, sin embargo, éste será predicho usando una hipótesis adicional.

4.3.3. Derivación de los criterios de remallado

Con los ingredientes enumerados en la sección anterior la expresión para el criterio de remallado se deriva fácilmente. La constante C que corresponde al elemento Ω_k se deduce a partir de la ecuación (4.12), esto es

$$C = E_k / (H_k)^\alpha.$$

Reemplazando C en la ecuación (4.13), usando (4.14) y considerando que, para los nuevos elementos localizados en Ω_k , $\widehat{H}_{\widehat{k}}$ se denota con \widehat{H}_k , se consigue

$$\frac{E}{\widehat{n}_{\text{elem}}} = E_k \frac{(\widehat{H}_k)^\alpha}{(H_k)^\alpha} \quad \text{y, consecuentemente,} \quad \widehat{H}_k = \left[\frac{\widehat{E}}{E_k \widehat{n}_{\text{elem}}} \right]^{1/\alpha} H_k \quad (4.15)$$

donde el número de elementos de la nueva malla, $\widehat{n}_{\text{elem}}$, es aún desconocido. Al suponer válida la hipótesis de regularización de la malla se puede predecir

el valor de \hat{n}_{elem} . Se asume que el número de elementos en la nueva malla que ocupan la zona del elemento Ω_k de la malla actual será $[H_k/\hat{H}_k]^d$. Nótese que éste es un caso particular de (4.10) y es equivalente a suponer que el promedio del “aspect ratio” de los elementos en la malla actual y la nueva malla es similar en cada parte del dominio. Así, la siguiente expresión para \hat{n}_{elem} es dada

$$\hat{n}_{\text{elem}} = \sum_{k=1}^{\text{n}_{\text{elem}}} \left[\frac{H_k}{\hat{H}_k} \right]^d. \quad (4.16)$$

Sustituyendo (4.15) en (4.16) se obtiene que

$$\hat{n}_{\text{elem}} = \sum_{k=1}^{\text{n}_{\text{elem}}} \left[\frac{E_k \hat{n}_{\text{elem}}}{\hat{E}} \right]^{d/\alpha} = \frac{\hat{n}_{\text{elem}}^{d/\alpha}}{\hat{E}^{d/\alpha}} \sum_{k=1}^{\text{n}_{\text{elem}}} (E_k)^{d/\alpha}$$

de donde se obtiene que

$$\hat{n}_{\text{elem}} = \left[\frac{1}{\hat{E}^{d/\alpha}} \sum_{k=1}^{\text{n}_{\text{elem}}} (E_k)^{d/\alpha} \right]^{\alpha/(\alpha-d)}. \quad (4.17)$$

De esta manera \hat{n}_{elem} se puede evaluar una vez se hayan calculado todos los errores locales E_k en la malla actual, pues el error en la nueva malla, \hat{E} , es una cantidad prescrita.

En el desarrollo de este apartado ha sido implícitamente supuesto que todas las contribuciones locales del error son positivas o, más generalmente, todas tienen el mismo signo, véase por ejemplo (4.14). Como se dijo previamente, esto supone tomar valores absolutos de las contribuciones locales y resulta una estrategia muy conservadora, sobre todo si la distribución del error es tal que las contribuciones locales del error tienen signos contrarios y se compensan unas con otras. No obstante, desde un punto de vista práctico, aprovechando que el equilibrado de las contribuciones del error con signo contrario no es nada realista, es muy fácil definir una representación apropiada para el criterio de remallado.

4.4. Optimalidad de la distribución uniforme del error

En el apartado anterior se dijo que la distribución uniforme del error dada por (4.14) es óptimo, en el sentido que produce las mallas con el mínimo número de elementos. Esta afirmación es demostrada para adaptatividad en norma de energía por Li y Bettess [60] y la misma razón también es válida en el contexto de adaptatividad orientada al resultado.

La idea se sigue al tomar \widehat{E}_k para $k = 1, \dots, k$ como incógnitas. Usando las estimas a priori locales (4.12) y (4.13) se obtiene

$$\frac{H_k}{\widehat{H}_k} = \left[\frac{E_k}{\widehat{E}_k} \right]^{1/\alpha}. \quad (4.18)$$

Reemplazando (4.18) en (4.16) se tiene que

$$\widehat{n}_{\text{elem}} = \sum_{k=1}^{\widehat{n}_{\text{elem}}} \left[\frac{E_k}{\widehat{E}_k} \right]^{d/\alpha}. \quad (4.19)$$

Se quiere entonces encontrar \widehat{E}_k para $k = 1, \dots, k$ tal que $\widehat{n}_{\text{elem}}$ sujeto a la condición

$$\widehat{E} = \sum_{\widehat{k}=1}^{\widehat{n}_{\text{elem}}} \widehat{E}_{\widehat{k}}, \quad (4.20)$$

sea mínimo.

Ahora, a partir de la hipótesis de regularización de la malla esto es equivalente a

$$\widehat{E} = \sum_{k=1}^{\widehat{n}_{\text{elem}}} \widehat{E}_k \left[\frac{H_k}{\widehat{H}_k} \right]^d = \sum_{k=1}^{\widehat{n}_{\text{elem}}} \widehat{E}_k \left[\frac{E_k}{\widehat{E}_k} \right]^{d/\alpha} = \sum_{k=1}^{\widehat{n}_{\text{elem}}} \widehat{E}_k^{1-d/\alpha} E_k^{d/\alpha}. \quad (4.21)$$

Así, usando los multiplicadores de Lagrange apropiados, minimizar (4.19) sujeta a la restricción (4.21) es equivalente a encontrar \widehat{E}_k para $k = 1, \dots, k$ y λ tal que

$$F(\widehat{E}_1, \dots, \widehat{E}_{\widehat{n}_{\text{elem}}}, \lambda) := \sum_{k=1}^{\widehat{n}_{\text{elem}}} \left[\frac{E_k}{\widehat{E}_k} \right]^{d/\alpha} - \lambda \left(\widehat{E} - \sum_{k=1}^{\widehat{n}_{\text{elem}}} \widehat{E}_k^{1-d/\alpha} E_k^{d/\alpha} \right) \quad (4.22)$$

sea estacionaria. Es decir, para todo l desde 1 hasta \mathbf{n}_{elem} ,

$$\frac{\partial F}{\partial \widehat{E}_l} = 0, \quad \text{esto es} \quad E_l^{d/\alpha} \widehat{E}_l^{-d/\alpha} \left[(-d/\alpha) \widehat{E}_l^{-1} + \lambda(1 - d/\alpha) \right] = 0. \quad (4.23)$$

Por lo tanto,

$$\widehat{E}_l = \frac{d}{\lambda(\alpha - d)}. \quad (4.24)$$

Obviamente, esto requiere que todos los valores de $\widehat{E}_{\widehat{k}}$ para $\widehat{k} = 1, \dots, \widehat{\mathbf{n}}_{\text{elem}}$ sean iguales y por lo tanto el criterio de optimalidad (4.14) utilizado en el apartado anterior es óptimo en el sentido que se espera que la nueva malla tenga el mínimo número de elementos. Este criterio y la correspondiente estrategia de remallado son denotados en todo lo que sigue por UED (del inglés: Uniform Error Distribution).

Sin embargo, otros criterios de optimalidad pueden abordar otras características deseables para una malla óptima y ser utilizados para derivar otras expresiones para los criterios de remallado. Por ejemplo, en el criterio anterior (4.15) aparece la medida elemental del error, E_k , en el denominador. Esto significa que un elemento se refinará dependiendo sólo del valor de E_k (si $\widehat{H}_k = H_k/2$ entonces se pondrán 4 elementos $\widehat{\Omega}_{\widehat{k}}$ en lugar de Ω_k). Esto contradice la intuición puesto que un elemento grande con poco error específico puede refinarse tanto como un elemento pequeño con mucho más error específico. Éste es el caso, del criterio de remallado que denotaremos con USE (Uniform Specific Error), que está inspirado en el criterio introducido por Oñate y Bugada [61] (para el caso de adaptatividad en norma de energía) donde el objetivo es obtener una malla tal que las contribuciones locales al error sean proporcional al tamaño del elemento, en el que se quiere que

$$\frac{\widehat{E}_k}{(\widehat{H}_k)^d} = C, \quad \text{con } C \text{ constante y, } k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}}.$$

Usando el mismo análisis llevado a cabo en el criterio UED, la expresión correspondiente para el criterio remallado USE queda dada por

$$\widehat{H}_k = \left[\frac{\widehat{E}}{E_k |\Omega|} \right]^{1/(\alpha-d)} H_k^{\alpha/(\alpha-d)}. \quad (4.25)$$

Observe que la estrategia de remallado USE no es óptima, pues de lo dicho anteriormente se espera que produzca mallas con más elementos que UED. Sin embargo, el criterio de remallado USE también se utiliza en la experimentación numérica para verificar las suposiciones hechas.

4.5. Representación apropiada para la distribución local del error

En las secciones anteriores dos criterios para adaptatividad orientada al resultado fueron derivados. Los datos de entrada (input) para tales expresiones son: las contribuciones locales al error, E_k para $k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}}$, el orden de convergencia local, α , y el error que se desea alcanzar en la nueva malla, \widehat{E} , ver por ejemplo (4.15) y (4.17) y también (4.25). El error para la nueva malla \widehat{E} es prescrito por el usuario, mientras que la distribución local del error tiene que ser determinada usando algún estimador del error. Se ha mencionado, en muchas ocasiones, que la distribución del error no es única y tiene que ser elegida. De hecho, el α depende de esta opción. Este apartado está dedicado para analizar las diversas distribuciones posibles de los errores locales y los criterios de remallado que resultan.

4.5.1. Producto de errores elementales

La opción obvia para la distribución espacial del error es $E_k = B(e, \varepsilon)$, que corresponde a fijar $v_{\text{H}} = z_{\text{H}}$ en (4.8), véase por ejemplo Peraire [63]; Prudhomme y Oden [39]. El orden de convergencia local que corresponde a esta distribución se asume que esta dada por $\alpha = 2p + d$, donde p es el grado de la interpolación y d la dimensión del espacio, para las zonas sin singularidades. Esto es debido al hecho de que el producto de la energía de los dos errores e y ε converge con un orden dos veces mayor que el que se tiene en norma de energía para cada uno de ellos. Esta es a priori la mejor opción para la distribución porque con ella se tiene la expectativa más grande para el orden

de convergencia local (el valor más grande para α).

En la práctica, los datos que entran en las expresiones para los criterios de remallado ((4.15) o (4.25)) tienen que ser positivos y, por lo tanto, en realidad se toma $E_k = |B_k(e, \varepsilon)|$. Sin embargo, si la distribución original de los $B_k(e, \varepsilon)$, tiene signo alternante en el valor de sus magnitudes, entonces el criterio de remallado que resulta produce mallas con un número de elementos mucho más grande que el necesitado. De hecho, en estos casos la suma de todos los E_k es mucho más grande que $J(e)$.

Dos estrategias diferentes se proponen para reducir al mínimo el efecto del cambio de signo en las contribuciones locales del error. La primera idea, se desarrolla en el siguiente apartado y se basa en seleccionar el v_H óptimo en (4.8). La segunda propuesta, descrita en el apartado 4.5.3, consiste en promediar el efecto de las muestras usando un factor apropiado para corregir las contribuciones locales del error.

4.5.2. Selección óptima de v_H

Como se dejó ver en (4.6) y (4.7) la representación del error se sigue cumpliendo para cualquier función $v_H \in \mathbf{V}_{H0}$. Pues, al usar diversos valores para el v_H no se modifica el valor global del error $J(e)$. Sin embargo, las contribuciones locales al error, $B_k(e, z - v_H)$, son muy diferentes dependiendo de la opción que se tome para v_H . Así, en esta sección v_H es seleccionada tal que la representación local del error sea óptima en el sentido que induce una estrategia de remallado que conduce a un malla con el menor número de elementos.

Resulta obvio, a partir de (4.17), que para el criterio de remallado UED la representación óptima del error se alcanza cuando

$$S := \sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} (E_k)^{d/\alpha} \quad (4.26)$$

es mínimo. Nótese, sin embargo, que el valor del orden local de convergencia, α , depende también de la selección del v_H . Según lo visto en el apartado anterior, $\alpha = 2p + d$ para $v_H = z_H$ y $\alpha = p + d/2$ si v_H se selecciona arbitrariamente

(probablemente $z - v_H$ no depende de H).

Recuérdese que, para preservar la estabilidad del proceso del remallado, el criterio de remallado está basado en los valores absolutos de las contribuciones locales del error, esto es

$$E_k = |B_k(e, z - v_H)|.$$

Así, el objetivo consiste en seleccionar el v_H que de el menor valor para la suma en potencia d/α de las contribuciones locales del error en valores absolutos.

La función v_H es representada por sus coeficientes c_i , $i = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{dof}}$ en la base de las funciones de forma $\{N_1, \dots, N_{\mathbf{n}_{\text{dof}}}\}$ que generan el espacio \mathbf{V}_{H0} , esto es

$$v_H = \sum_{i=1}^{\mathbf{n}_{\text{dof}}} c_i N_i. \quad (4.27)$$

Así, encontrar v_H es equivalente a encontrar el vector incognita \mathbf{c} de los coeficiente c_i , $i = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{dof}}$. Minimizar S generalmente lleva a un sistema de ecuaciones no lineales para \mathbf{c} .

El costo computacional que implica obtener \mathbf{c} y por lo tanto v_H vale la pena si las distribuciones locales de los productos energéticos, $B_k(e, \varepsilon)$, ver sección 4.5.1, son equilibradas. Esto es, si las contribuciones locales del error con signos opuestos se compensan y el valor global de $J(e)$ es significativamente más bajo que la media del error. En estos casos, introduciendo los valores apropiados en los coeficientes de v_H (vector \mathbf{c}) se produce una distribución de los errores locales tan homogénea como sea posible y se reduce la mayoría de los efectos indeseables al tomar los valores absolutos en la definición de E_k .

Para obtener tal homogeneidad en las distribuciones locales del error a un costo computacional más bajo, el funcional S es reemplazado por

$$S^* := \sum_{k=1}^{\mathbf{n}_{\text{elem}}} (E_k)^2. \quad (4.28)$$

Entonces, el problema se formula como un ajuste clásico por mínimos cuadrados y, por lo tanto, encontrar \mathbf{c} es equivalente a resolver las ecuaciones normales

correspondientes. Por conveniencia, la contribución local del error se escribir como

$$E_k = B_k(e, z) - \sum_{i=1}^{\mathbf{n}_{\text{dof}}} c_i B_k(e, N_i)$$

y consecuentemente

$$S^* = \sum_{k=1}^{\mathbf{n}_{\text{elem}}} \left(B_k(e, z) - \sum_{i=1}^{\mathbf{n}_{\text{dof}}} c_i B_k(e, N_i) \right)^2 .$$

Las ecuaciones normales quedan dadas por

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{c} = \mathbf{A}^T \mathbf{f}, \quad (4.29)$$

donde \mathbf{A} y \mathbf{f} son definidas componente a componente por

$$A_{ik} = B_k(e, N_i) \quad \text{y} \quad f_k = B_k(e, z) \quad \text{para } i = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{dof}} \text{ y } k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{elem}} .$$

Nótese que la matriz $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ es usualmente mal condicionada y llena (con pocos ceros). Consecuentemente, el sistema se prefiere resolver directamente como un sistema sobredeterminado

$$\mathbf{A} \mathbf{c} \approx \mathbf{f}, \quad (4.30)$$

utilizando una descomposición en valores singulares de la matriz \mathbf{A} .

Obviamente, el valor obtenido para el v_{H} no es óptimo pero este proporciona una buena distribución del error, cuando el fenómeno de signos contrarios y compensación del error es dramático.

Sin embargo, aunque la distribución local es apropiada y el valor total de las magnitudes del error, $\sum_k |B_k(e, z - v_{\text{H}})|$, disminuye significativamente en comparación con el valor de $\sum_k |B_k(e, z - z_{\text{H}})|$, no se obtiene una malla apropiada (óptima) al final del proceso. Esto principalmente se debe al generador de mallas que se está usando y, tal vez, resulte necesario migrar hacia otro tipo de mallador para obtener buenos resultados; no obstante, hasta el momento, sólo es una conjetura y las pruebas deben ser hechas.

Para facilitar la presentación de los resultados obtenidos se introduce el siguiente ejemplo elíptico.

Ejemplo: Se resuelve (4.1) (problema térmico) en el dominio $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$ y un término fuente, f , tal que la solución exacta tiene la siguiente expresión:

$$u(x, y) := e^{-10(x^2+y^2)} \cos(.5\pi x) \cos(.5\pi y).$$

Las condiciones de contorno se fijan tal que la solución, u , se cumple, esto es $u(x, y) = 0$ en $\partial\Omega$. Así, (4.1) queda definido por

$$B(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\Omega \quad \text{y} \quad L(v) = \int_{\Omega} f v d\Omega \quad (4.31)$$

La cantidad de interés se define como el valor puntual $J(u) = u(0)$; la regularización del funcional se hace de forma análoga a las dadas en los apartados 2.4 y 3.2.3. A partir de esta regularización, se define el problema dual (4.4). La solución, z , del problema dual es aproximada usando una solución de referencia, z_h , calculada en una malla de referencia con un $h = H/4$.

El cálculo se inicia con una malla uniforme de 10×10 (cuadriláteros lineales). La Figura 4.1 muestra la distribución del error para $B(e, z_h - z_H)$ (arriba) y $B(e, z_h - v_H)$ (abajo), donde la numeración de los elementos (100 elementos) obedece a una numeración global dada por el MEF y no a ninguna posición específica de los elementos. En la gráfica de $B(e, z_h - v_H)$ se observa la cancelación del cambio de signo en los valores locales del error, que existía originalmente en $B(e, z_h - z_H)$. Además, los valores locales de $B(e, z_h - v_H)$ han decrecido considerablemente en comparación con los que se obtienen para $B(e, z_h - z_H)$; la suma global de sus magnitudes es

$$\sum_k |B_k(e, z_h - z_H)| = 6.225 \times 10^{-2} \quad \text{y} \quad \sum_k |B_k(e, z_h - v_H)| = 4.934 \times 10^{-3}$$

Sin embargo, y a pesar de la buena distribución del error alcanzada para la representación $B(e, z_h - v_H)$, las mallas que resultan del proceso adaptativo no satisfacen el criterio de optimalidad propuesto. En la Figura 4.2 se muestran las dos primeras mallas obtenidas (para $B(e, z_h - z_H)$ y $B(e, z_h - v_H)$) de un proceso adaptativo que se inicia en una malla de 100 elementos (malla uniforme 10×10) con un error en la cantidad de interés de un 4.24 % y se quiere alcanzar una solución con un error inferior al 0.05 %, es decir, se toma $\text{TOL} = 0.5 \times 10^{-3}$

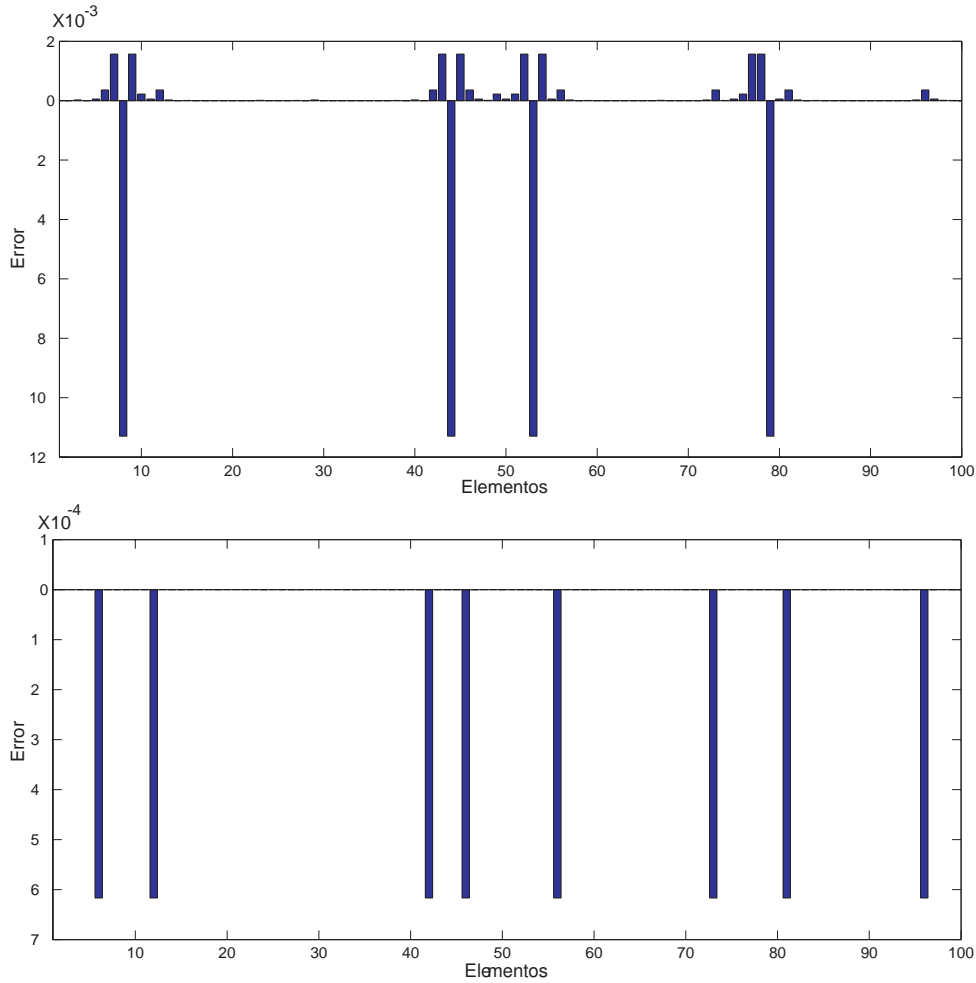


Figura 4.1: Distribución de error para $B(e, z_h - z_H)$ y $B(e, z_h - v_H)$ en la malla inicial

(3 cifras significativas) en el criterio de aceptabilidad (4.11). En la fila superior (de izquierda a derecha) se dan las mallas 1 y 2 para $B(e, z_h - z_H)$ con 689 y 1666 elementos respectivamente. En la primera se obtiene un error del 0.23 % mientras en la segunda se tiene un 0.06 % de error. Para $B(e, z_h - v_H)$ (fila inferior) se tiene una malla 1 con 109 elementos y un error de 3.5 % y una malla 2 de 1318 elementos y un error del 0.33 %.

La homogeneidad de las mallas para la representación $B(e, z_h - v_H)$ es debida a que el generador de mallas usado (ver Sarrate [70]) no logra captar los elementos aislados (ver la gráfica inferior de la Figura 4.1) donde el criterio de remallado solicita el refinamiento para reducir el error. Este hecho ocasiona,

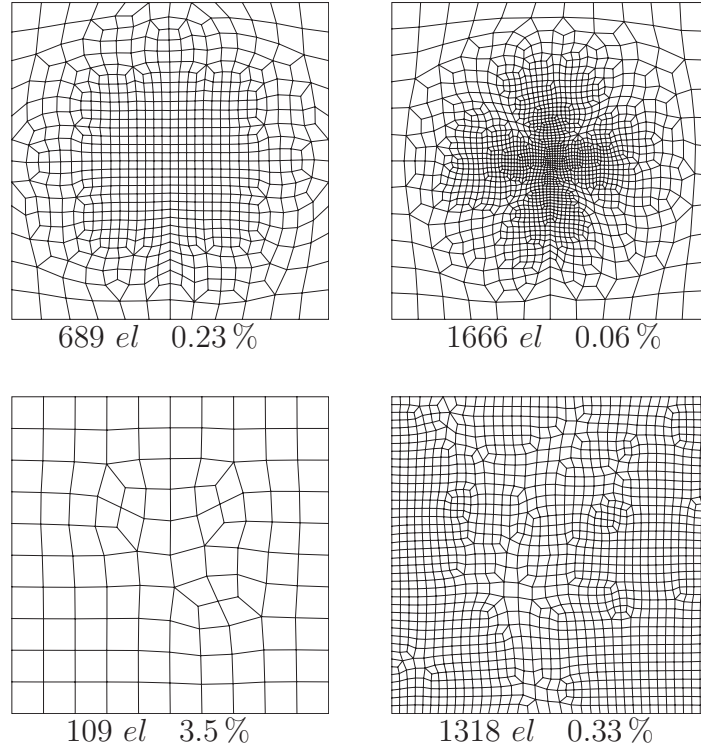


Figura 4.2: Mallas obtenidas para $B(e, z_h - z_H)$ (fila superior) y $B(e, z_h - v_H)$ (fila inferior). La malla inicial es una malla uniforme 10×10

además, que el criterio de optimalidad no se alcance.

4.5.3. Factor de corrección

Una estrategia alternativa y muy barata computacionalmente 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 $B(e, z_h - z_H)$ para todas las contribuciones locales y sin embargo, la suma de sus magnitudes sea igual a $J(e)$.

Se introduce el factor

$$\beta := \frac{\sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} B_k(e, \varepsilon)}{\sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} |B_k(e, \varepsilon)|} = \frac{J(e)}{\sum_{k=1}^{n_{\text{elem}}} |B_k(e, \varepsilon)|}. \quad (4.32)$$

Obviamente, la representación del error

$$E_k = \beta |B_k(e, \varepsilon)|$$

verifica la ecuación (4.9) y todas las contribuciones locales tienen el mismo signo de $J(e) = B(e, \varepsilon)$.

El factor β es menor o igual a uno (en valor absoluto) y es pequeño si la distribución de error $B_k(e, \varepsilon)$ presenta el fenómeno de signos opuestos en sus contribuciones, tal como fue descrito en el apartado anterior 4.5.2.

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 (4.12) 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 (4.12) también se cumple para la representación corregida. Así, este criterio de remallado resulta más ventajoso respecto al criterio descrito en sección 4.5.1, debido a que los valores absolutos no tienen ningún efecto en la malla resultante.

Los resultados numéricos de aplicar los criterios de remallado UED y USE a la distribución del error modificadas a través del factor de corrección, β , se dejan para la experimentación numérica dada posteriormente en la sección 4.6.

4.5.4. Distribución nodal del error

Como ya se mencionó, los valores elementales que se obtienen del criterio de remallado sirven de input para el generador de la malla. Normalmente, los generadores automáticos de mallas requieren la información sobre el tamaño de elemento deseado para la nueva malla expresada en los nodos de la malla actual. Es más, el tamaño del elemento se describe con la interpolación más simple y por consiguiente la información sólo se necesita en los vértices de los elementos (los nodos de los elementos lineales). No obstante, según las formulaciones dadas previamente, el output de un criterio de remallado es el tamaño de elemento para la nueva malla, dado elemento a elemento, es decir \hat{H}_k . 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. Los valores nodales del tamaño de elemento deseado se calculan promediando los elementos que contienen al nodo en cuestión o tomando el tamaño mínimo entre todos estos elementos. Ambas alternativas introducen errores en la descripción nodal de la distribución del tamaño de elemento, especialmente donde las variaciones del error son rápidas, produciendo una convergencia lenta y una conducta oscilante indeseable para el proceso adaptativo.

La partición de la unidad dada en (3.22) se usa para dividir la representación del error que involucra el residuo débil $\mathcal{R}^P(\cdot)$, de la misma manera como se hizo en el capítulo anterior (ver ecuación (3.23)), para obtener una representación nodo a nodo dada por

$$J(e) = \mathcal{R}^P(\varepsilon) = \sum_{i=1}^{\mathbf{n}_{\text{poin}}} \mathcal{R}^P(\tilde{N}_i \varepsilon), \quad (4.33)$$

donde \mathbf{n}_{poin} es el número de vértices en la malla y \tilde{N}_i , $i = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{poin}}$, las funciones de forma lineales escalares asociadas a los vértices. Nótese que tanto N_i y \tilde{N}_i coinciden para problemas escalares y elementos lineales pero son formalmente diferentes si el número de incógnitas por nodo es mayor que uno (como ocurre, por ejemplo, en la mecánica 2D o 3D) o si los elementos son de orden superior.

Así, tomando $E_k = \mathcal{R}^P(\tilde{N}_k \varepsilon)$, $k = 1, \dots, \mathbf{n}_{\text{poin}}$, se obtiene una representación nodal de los errores locales que es usada para derivar nuevos criterios de remallado. Note que con esta definición de E_k , la ecuación (4.9) se cumple si \mathbf{n}_{elem} es sustituido por \mathbf{n}_{poin} . Dos nuevas hipótesis son requeridas:

1. Se define un tamaño nodal de elemento usando algún tipo de promedio. Por ejemplo, el tamaño del elemento que corresponde al nodo i se toma como la medida del soporte de N_i elevada a $1/d$, eventualmente divididas por 2.
2. Las contribuciones nodales del error convergen localmente con un orden α , exactamente igual a (4.12) pero con H_k y E_k definidos nodalmente.

Obsérvese que, y sólo con el fin de facilitar la presentación, las notaciones para E_k y H_k se mantienen iguales que para el caso de la representación en elementos.

Si estas hipótesis se cumplen, los criterios de remallado se derivan exactamente de la misma manera que como se hizo anteriormente, reemplazando n_{elem} por n_{poin} a lo largo de todo el proceso. Resulta obvio, entonces, que el criterio de remallado analizado en la sección 4.4 es óptimo en el sentido que minimiza el número resultante de nodos, no el número de elementos.

Una aproximación alternativa se basa en usar la forma débil del problema dual (ver (3.25) del capítulo anterior). El error en la cantidad de interés es entonces representado por

$$J(e) = \mathcal{R}^p(e) = \sum_{i=1}^{n_{\text{poin}}} \mathcal{R}^d(\tilde{N}_i e), \quad (4.34)$$

donde $\mathcal{R}^d(\cdot) := J(\cdot) - B(\cdot, z_H)$ es el residuo débil del problema dual. Tomando $E_k = \mathcal{R}^d(\tilde{N}_k e)$, el mismo razonamiento es usado para encontrar los criterios de remallado correspondientes, con exactamente las mismas expresiones que antes.

4.6. Experimentación numérica

En este apartado se implementan los distintos criterios de remallado que se han introducido a lo largo del capítulo. Dos tipos de problemas son considerados. El primero presenta un caso térmico en el que la calidad de la solución es controlada a partir de una cantidad de interés puntual. Un caso mecánico elástico (viga entallada) es analizado en el segundo ejemplo. En este problema dos tipos de cantidades de interés son analizadas; las dos relacionadas con la abertura de la entalla de la viga.

Dado que el objetivo de esta experimentación numérica es el de analizar el comportamiento y efectividad de los criterios de remallado propuestos, no se hará ningún tipo de estima para los errores primal, e , y dual, ε . En su lugar

se usan los errores de referencia, e^{ref} y ε^{ref} , para los cuales las soluciones de referencia u_h y z_h son definidas a partir de una malla obtenida al dividir cada elemento de la malla original en 16 nuevos elementos, es decir $h = H/4$. Por otro lado, y tal como se ha mencionado con anterioridad, se va a utilizar el generador automático de mallas (cuadriláteros) descrito por Sarrate [70] para crear las nuevas mallas en el proceso adaptativo.

4.6.1. Ejemplo térmico: Problema de Poisson

Se resuelve (4.1) para el caso térmico 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 tiene la siguiente expresión analítica:

$$u(x, y) = x(1 - x)y(1 - y^2)(1 + 200x^2 + 7y).$$

Es decir, la forma bilineal, B , y el funcional L de (4.1) quedan definidos a partir de (4.31). La cantidad de interés se define de acuerdo a (3.15) (para el caso escalar) con $\mathbf{x}_0 = (0.9, 0.9)$ y $\epsilon = 0.05$. El proceso adaptativo se inicia en una malla uniforme de 64 elementos con un error relativo en la cantidad de interés del 7.0% ($J(e^{\text{ref}})/J(u_h) = 7.0\%$) y se quiere alcanzar una solución con un error inferior al 0.05% ($\text{TOL} = 0.5 \times 10^{-3}$). Para la presentación de los resultados, la solución de referencia está dada por la mejor solución encontrada en las mallas de referencia y la misma se mantiene fija en todas las evaluaciones y gráficas del error.

Para evitar mallas con un tamaño de elemento muy grande en los distintos niveles del proceso adaptativo, se impone un tamaño máximo, H_{max} , para los elementos de la nueva malla, el mismo está dado por el tamaño más grande de elemento en la malla inicial (en este caso, $H_{\text{max}} = 0.125$). Además, para comparar la efectividad alcanzada a lo largo del proceso adaptativo, se lleva paralelamente un cálculo en mallas uniformes de 64 (malla inicial), 256, 1024, 1600, 2500, 4096, 6889 y 10000 elementos. Todos los cálculos, tanto los de las soluciones primal, u_H , y dual, z_H , como los de las soluciones de referencia, u_h y

malla	$B(e, \varepsilon)$				$\mathcal{R}^P(e)$				$\mathcal{R}^D(\varepsilon)$			
	#		%		#		%		#		%	
	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error
0	64	7.0										
1	557	0.47	506	0.56	613	0.55	571	0.54	592	0.51	586	0.53
2	1535	0.09	1284	0.11	1553	0.13	1403	0.11	1574	0.09	1473	0.09
3	2333	0.04	887	0.12	2464	0.04	1924	0.05	2469	0.04	1811	0.06
4	2461	0.04	926	0.14	2398	0.04	1688	0.07	2195	0.05	1721	0.05
5	2474	0.04	1030	0.11	2327	0.04	1923	0.05	2595	0.04	1611	0.07

Tabla 4.1: Ejemplo térmico: Resultados obtenidos para el criterio de remallado UED

malla	$B(e, \varepsilon)$				$\mathcal{R}^P(e)$				$\mathcal{R}^D(\varepsilon)$			
	#		%		#		%		#		%	
	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error
0	64	7.0										
1	381	0.55	369	0.55	423	0.55	429	0.55	379	0.62	380	0.62
2	2367	0.06	2076	0.07	2309	0.07	2157	0.07	2381	0.09	2160	0.11
3	7645	0.02	3124	0.09	8163	0.03	6549	0.04	7740	0.02	6613	0.03

Tabla 4.2: Ejemplo térmico: Resultados obtenidos para el criterio de remallado USE

z_h , son hechos usando elementos bilineales ($p = 1$).

Los resultados obtenidos al aplicar las distintas estrategias de remallado a este problema se resumen en las Tablas 4.1 y 4.2. La Tabla 4.1 muestra los errores relativos de referencia alcanzados para las distintas mallas que se obtienen al aplicar el criterio de remallado UED en las representaciones del error: $B(e, \varepsilon)$, $\mathcal{R}^P(e)$, $\mathcal{R}^D(\varepsilon)$ y sus respectivas versiones que surgen al usar el factor de corrección (denotado en las tablas como: Factor de C.). En forma gráfica, el comportamiento del error para UED es dado en la Figura 4.3. La información se complementa con la Figura 4.12, donde se muestran las mallas que se obtienen en cada nivel del proceso adaptativo.

Los errores relativos alcanzados mediante el criterio de remallado USE se resumen en la Tabla 4.2 y la Figura 4.4. Al igual que antes la información se complementa con la Figura 4.13, donde se da la sucesión de mallas que se obtienen al usar este criterio de remallado.

Como se esperaba, el criterio de remallado UED es el que proporciona las

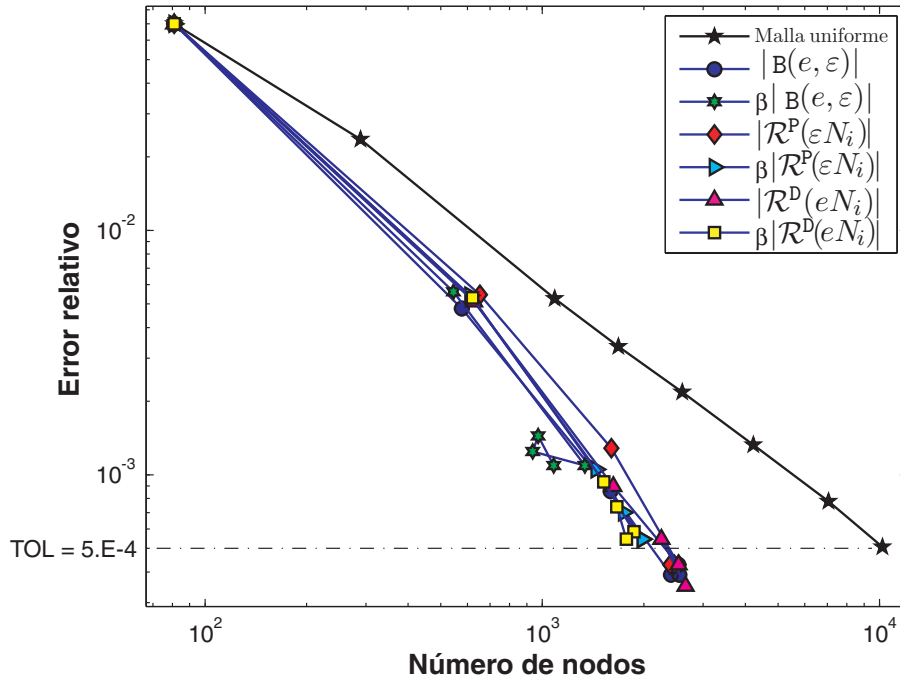


Figura 4.3: Ejemplo térmico: Convergencia del error relativo usando el criterio de remallado UED. La solución de referencia se mantiene fija para todas las mallas.

mallas con el menor número de elementos. Alcanzando el criterio de aceptabilidad, para todas las representaciones del error, en la tercera iteración (malla 3) con un número menor de elementos que el usado por el criterio USE. Pues éste, llega a necesitar más del doble de elementos, que el usado por UED, para obtener el error prescrito. La estabilización del error alrededor del 0.04% nos prueba la rápida convergencia del error a la tolerancia prescrita al usar UED.

Al combinar los criterios de remallado UED o USE con el factor de corrección se obtienen mallas con un comportamiento cualitativo semejante pero con un número de elementos significativamente menor. Sin embargo, en algunos casos, el criterio no llega a converger pues los resultados se estabilizan en mallas que proporcionan errores algo superiores a la tolerancia prescrita. No obstante, los resultados logrados se pueden considerar completamente aceptables si se tiene en cuenta los siguientes factores: en primer lugar, el criterio UED aplicado a la representación del error sin factor de corrección se estabiliza apenas por abajo del error prescrito. Por otro lado, en el criterio USE sólo queda por arriba del error prescrito la representación con factor de corrección $\beta|B(e, \varepsilon)|$.

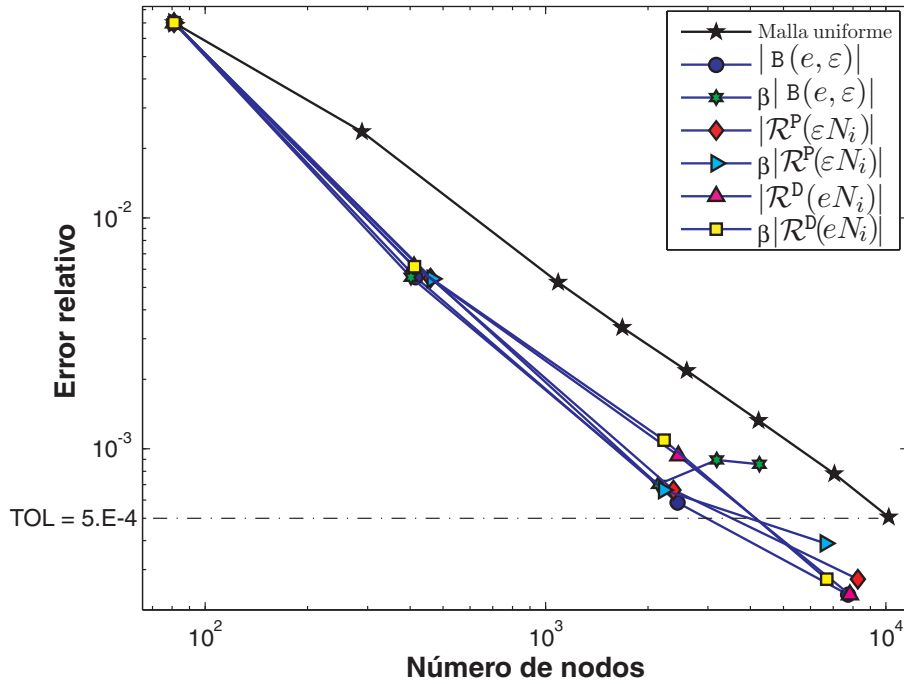


Figura 4.4: Ejemplo térmico: Convergencia del error relativo usando el criterio de remallado USE. La solución de referencia se mantiene fija para todas las mallas.

Sin embargo, se puede demostrar (al igual que en el capítulo anterior) que la representación del error $B(e, \varepsilon)$ no resulta apropiada en un proceso adaptativo; pues, es esta representación la que presenta de forma más acentuada el fenómeno de cambio de signo en sus contribuciones locales.

La afirmación anterior queda justificada a partir de la Figura 4.5, donde se ilustran los valores de $|\beta|$ a lo largo del proceso adaptativo. En otras palabras, la representación del error con factor de corrección que requiere el porcentaje más bajo de elementos en comparación con su recíproco (sin factor de corrección) es $\beta B(e, \varepsilon)$ (por ejemplo, en la malla 5, el criterio UED con factor de corrección requiere el 41.63%, 82.64% y 62.08% de los elementos usados por $B(e, \varepsilon)$, $\mathcal{R}^P(N_k e)$ y $\mathcal{R}^D(N_k \varepsilon)$, respectivamente).

La anomalía que se presenta para el factor de corrección de $\mathcal{R}^P(e)$ y $\mathcal{R}^D(\varepsilon)$ en la primera malla que se genera a partir del criterio USE puede deberse al generador automático de mallas, pues el valor de las magnitudes locales del error apenas cambian al usar el factor de corrección ($\beta = 0.95$ y $\beta = 0.97$ para

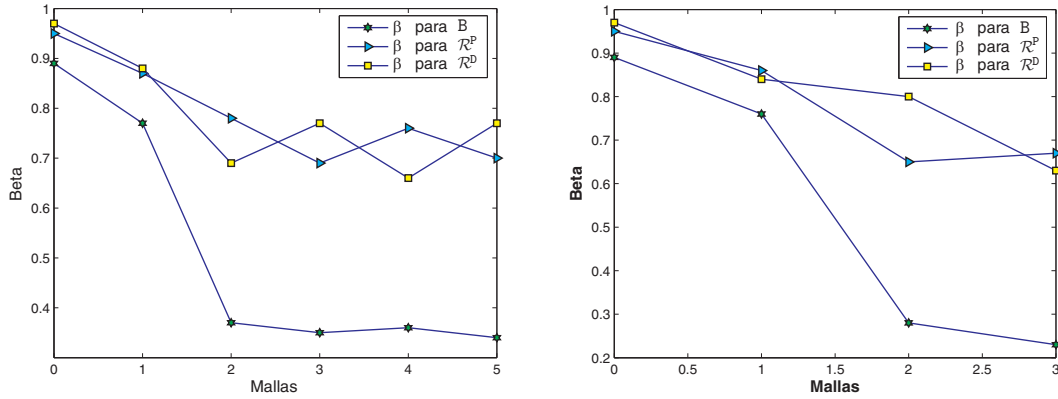


Figura 4.5: Ejemplo térmico: Valores de β . Criterio UED (izquierda), criterio USE (derecha).

\mathcal{R}^P y \mathcal{R}^D , respectivamente).

De todo lo dicho se concluye que, para este ejemplo, el criterio UED es el más apropiado y las representaciones con factor de corrección más apropiadas son la que surgen de \mathcal{R}^P y \mathcal{R}^D . De todas maneras, dado que el problema tratado es completamente regular y no presenta singularidades, en el siguiente ejemplo se pone a prueba los criterios de remallado en problemas que sí presentan estas características.

4.6.2. Ejemplo mecánico: Viga entallada

En el dominio de la Figura 4.6 se resuelve (4.1) para el caso de un problema mecánico elástico (conocido en la literatura como: *Single edge notched beam*, e introducido originalmente por Carpinteri y colaboradores [71]). En el contorno de la viga se imponen condiciones de Neumann homogéneas, se coartan los movimientos de sólido rígido para asegurar la existencia y unicidad de la solución. En este caso la forma débil (4.1) se define a partir de (3.3). Para el cálculo del problema se fijan los parámetros materiales: módulo de Young 1.0 y coeficiente de Poisson 0.33. Este ejemplo presenta singularidades debidas, especialmente, a las esquinas del contorno, pues las fuerzas, F_1 y F_2 , aplicadas a la viga son equilibradas apropiadamente, a través de los apoyos de la base.

Se analizan dos cantidades de interés relacionadas con los puntos que de-

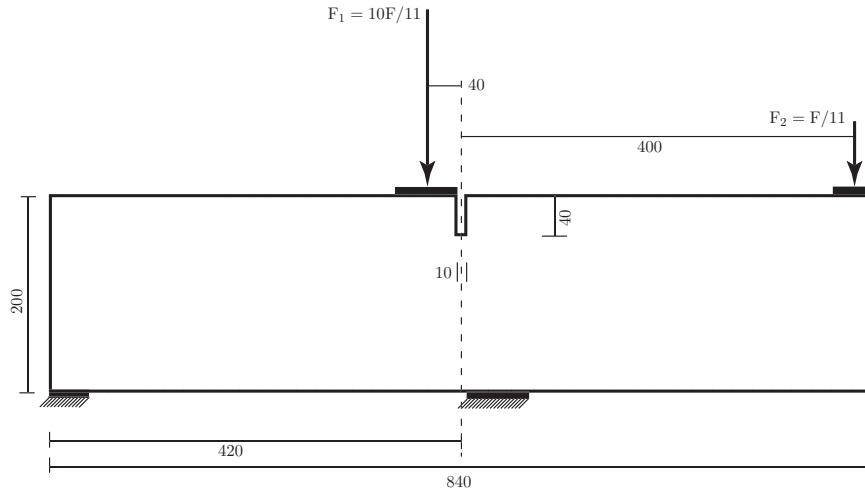


Figura 4.6: Ejemplo mecánico: Viga entallada

finen la boca de la entalla, ubicada en la parte superior de la viga (ver Figura 4.6):

- Desplazamiento horizontal de los puntos que definen el ancho de la entalla

$$J(u) := u_x(P_B) - u_x(P_A),$$

donde u_x representa el desplazamiento en el eje x ; P_A y P_B los dos puntos que definen la boca (entrada) de la entalla. En todo lo que sigue, esta cantidad de interés será referida como CMOD (Crack mouth opening displacement).

- Desplazamiento vertical de los puntos que definen el ancho de la entalla

$$J(u) := u_y(P_B) - u_y(P_A),$$

donde u_y representa el desplazamiento en el eje y . Al igual que la anterior, esta cantidad de interés será referida como CMSD (Crack mouth sliding displacement).

El proceso adaptativo, para las dos cantidades de interés propuestas, se inicia en una malla de 414 elementos dada en la Figura 4.7. Como en el ejemplo anterior: se toma la mejor solución de referencia y se mantiene constante para

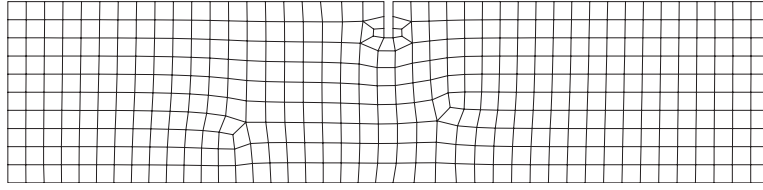


Figura 4.7: Ejemplo mecánico: Malla inicial (414 elementos) para el proceso adaptativo, usando las cantidades de interés: CMOD y CMSD

todas las evaluaciones en la que se requiera, se define el H_{\max} y la sucesión de mallas uniformes de 414 (malla 0), 752, 1696, 2042, 2620, 4672 y 6704 elementos.

Resultados para la cantidad de interés CMOD

El error relativo en la cantidad de interés CMOD para la malla inicial es del 10.7% ($J(e^{\text{ref}})/J(u_h) = 10.7\%$) y se quiere alcanzar, mediante el proceso adaptativo, una malla en la que la solución presente un error inferior al 5.0% ($\text{TOL} = 0.5 \times 10^{-1}$).

Los resultados del proceso adaptativo al aplicar los criterios de remallado UED y USE se presentan en las Tablas 4.3 y 4.4, respectivamente. La convergencia del error relativo se ilustra en las Figuras 4.8 y 4.9. La sucesión de mallas obtenidas para los dos criterios de remallado son visualizadas en las Figuras 4.14 y 4.15.

malla	$B(e, \varepsilon)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^P(e)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^D(\varepsilon)$		Factor de C.	
	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error
0	414	10.7										
1	554	3.35	369	3.61	579	1.60	363	7.17	530	5.52	338	6.41
2	625	1.45	280	12.7	711	1.35	291	5.68	692	0.58	406	11.5
3	687	1.06	313	8.02	719	0.02	273	6.85	689	1.14	240	8.33

Tabla 4.3: Ejemplo mecánico: Cantidad de interés: CMOD. Criterio de remallado: UED

Debido a la poca precisión que se pide, hasta un 5% del error, ambos criterios alcanzan la precisión prescrita en la primera iteración. Resultando, nuevamente, el criterio UED el más apropiado al generar mallas con menos número de elementos que el criterio USE. Sin embargo, al igual que en el

malla	$B(e, \varepsilon)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^P(e)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^D(\varepsilon)$		Factor de C.	
	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error	# elem	% error
0	414	10.7										
1	858	1.93	565	2.91	937	2.14	550	2.94	858	4.12	762	7.4
2	2375	0.85	710	1.52	2969	0.78	821	2.77	2349	1.03	1901	0.74
3	5794	0.64	922	0.47	6836	0.30	2104	1.48	5668	0.49	2690	0.06

Tabla 4.4: Ejemplo mecánico: Cantidad de interés: CMOD. Criterio de remallado: USE

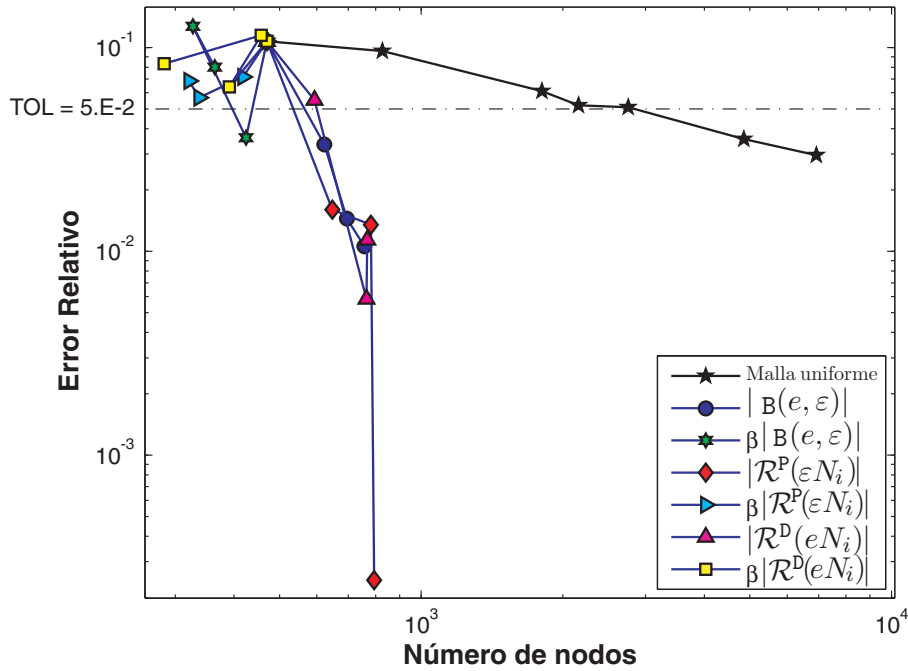


Figura 4.8: Ejemplo mecánico: Convergencia del error relativo usando el criterio de remallado UED. Cantidad de interés: CMOD.

ejemplo anterior, al usar el factor de corrección para representar las magnitudes del error, el criterio UED se estabiliza en mallas con un error relativo en la cantidad de interés algo superior al error prescrito. Estas mallas, en general, tienen un número menor de elementos que la malla inicial planteada.

El criterio USE resulta más conservativo, genera mallas con un mayor número de elementos, pero en cambio obtiene un error muy por debajo del error prescrito. Por esto, al aplicarlo a las distribuciones de error con factor de corrección se logra también alcanzar la convergencia con facilidad, lo cual no sucede para UED.

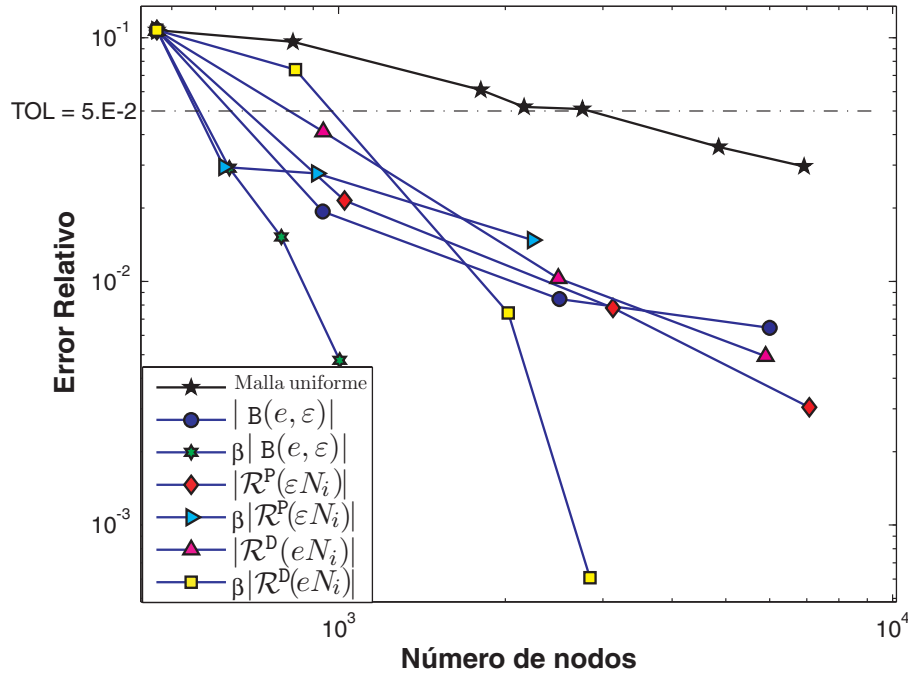


Figura 4.9: Ejemplo mecánico: Convergencia del error relativo usando el criterio de remallado USE. Cantidad de interés: CMOD.

A partir de los resultados dados en la Tabla 4.3 y la Figura 4.8 se puede concluir que el criterio UED se estabiliza rápidamente (esta propiedad también estaba presente en el ejemplo anterior), llegando incluso a mejorar su precisión sin variar significativamente el número de elementos de la malla. Esto no sucede con el criterio USE, pues aunque alcanza la precisión prescrita éste sigue generando mallas cada vez con mayor número de elementos, sin que parezca que tienda a estabilizarse.

Resultados para la cantidad de interés CMSD

Para esta cantidad de interés se tiene un error relativo del 9.45% en la malla inicial y se quiere lograr un error por debajo del 0.5%, al aplicar los criterios de remallado UED y USE.

Los resultados obtenidos al aplicar los criterios de remallado UED y USE se presentan en las Tablas 4.5 y 4.6, respectivamente. La convergencia del error relativo se ilustra en las Figuras 4.10 y 4.11. La sucesión de mallas obtenidas para los dos criterios de remallado son visualizadas en las Figuras 4.16 y 4.17.

malla	$B(e, \varepsilon)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^P(e)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^D(\varepsilon)$		Factor de C.	
	#	%	#	%	#	%	#	%	#	%	#	%
	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error
0	414	9.45										
1	860	2.89	839	2.84	923	2.44	802	2.57	887	2.48	780	2.35
2	1443	0.83	1112	0.91	1312	0.89	1159	0.99	1248	1.08	1106	1.0
3	1622	0.54	912	1.01	1473	0.58	1220	0.73	1477	0.59	1157	0.77
4	1577	0.48	868	1.02	1629	0.43	1196	0.66	1609	0.45	1237	0.6

Tabla 4.5: Ejemplo mecánico: Cantidad de interés: CMSD. Criterio de remallado: UED

malla	$B(e, \varepsilon)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^P(e)$		Factor de C.		$\mathcal{R}^D(\varepsilon)$		Factor de C.	
	#	%	#	%	#	%	#	%	#	%	#	%
	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error	elem	error
0	414	9.45										
1	1063	2.28	1030	2.25	1109	2.31	1039	2.17	1119	2.19	976	2.30
2	4248	0.52	3349	0.53	4275	0.49	3986	0.50	4418	0.47	4568	0.49
3	13242	0.16	7142	0.23	12838	0.15	11811	0.15	13131	0.16	12758	0.14

Tabla 4.6: Ejemplo mecánico: Cantidad de interés: CMSD. Criterio de remallado: USE

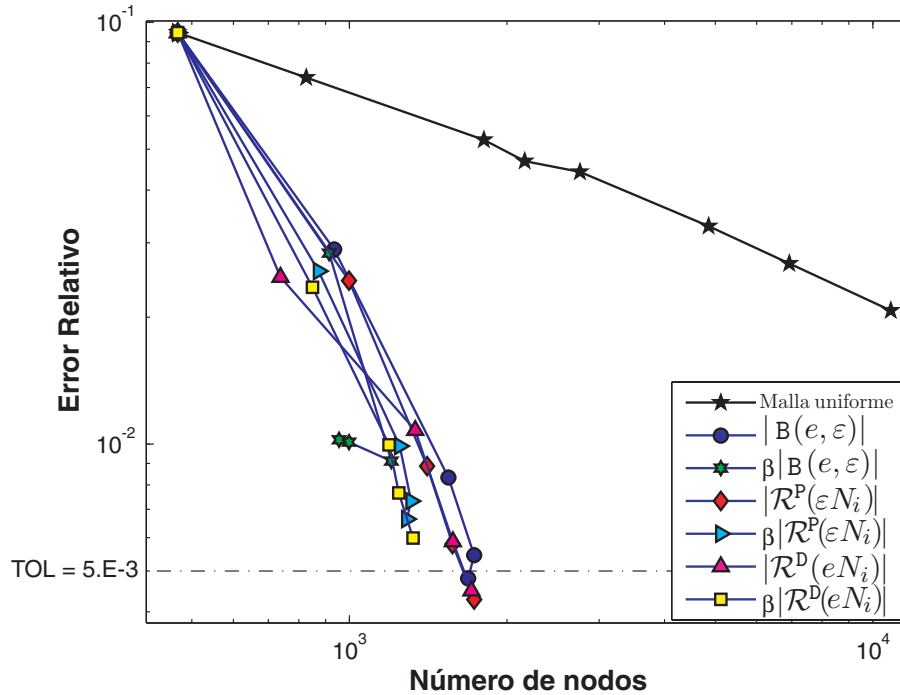


Figura 4.10: Ejemplo mecánico: Convergencia del error relativo usando el criterio de remallado UED. Cantidad de interés: CMSD.

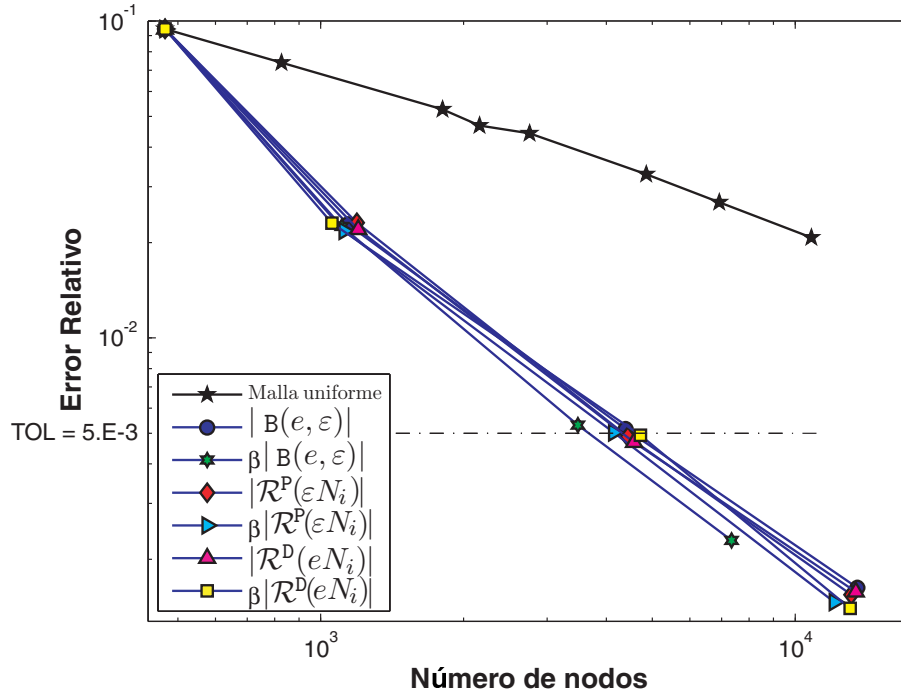


Figura 4.11: Ejemplo mecánico: Convergencia del error relativo usando el criterio de remallado USE. Cantidad de interés: CMSD.

Debido a que el criterio de aceptabilidad se ha hecho más estricto para esta cantidad de interés, 0.5%, es necesario iterar una o dos veces más para conseguir el error prescrito en todas las opciones que están siendo tratadas. Sin embargo, en este caso y como ocurrió en el primer ejemplo, el criterio UED se estabiliza apenas por abajo del error prescrito; lo cual es justificado, en cierta manera, por la propiedad de optimalidad que presenta el criterio.

Desde un punto de vista práctico, en el cálculo se tiende siempre a pedir una tolerancia mayor que la exigida por el problema. Esto permite tener mayor seguridad de que los criterios de remallado se estabilizarán por debajo del error que se quiere obtener en el problema.

Lo dicho anteriormente añade un ingrediente adicional a favor del uso del factor de corrección para modificar las magnitudes locales del error, evitando así el fenómeno de cambio de signo en dichas magnitudes. Pues al usar el factor de corrección los criterios de remallado se han estabilizado apenas por encima del límite permite.

En línea general, el comportamiento de los criterios de remallado son análogos a los casos anteriores. Presentando una uniformidad en sus propiedades analizadas a lo largo de los ejemplos planteados.

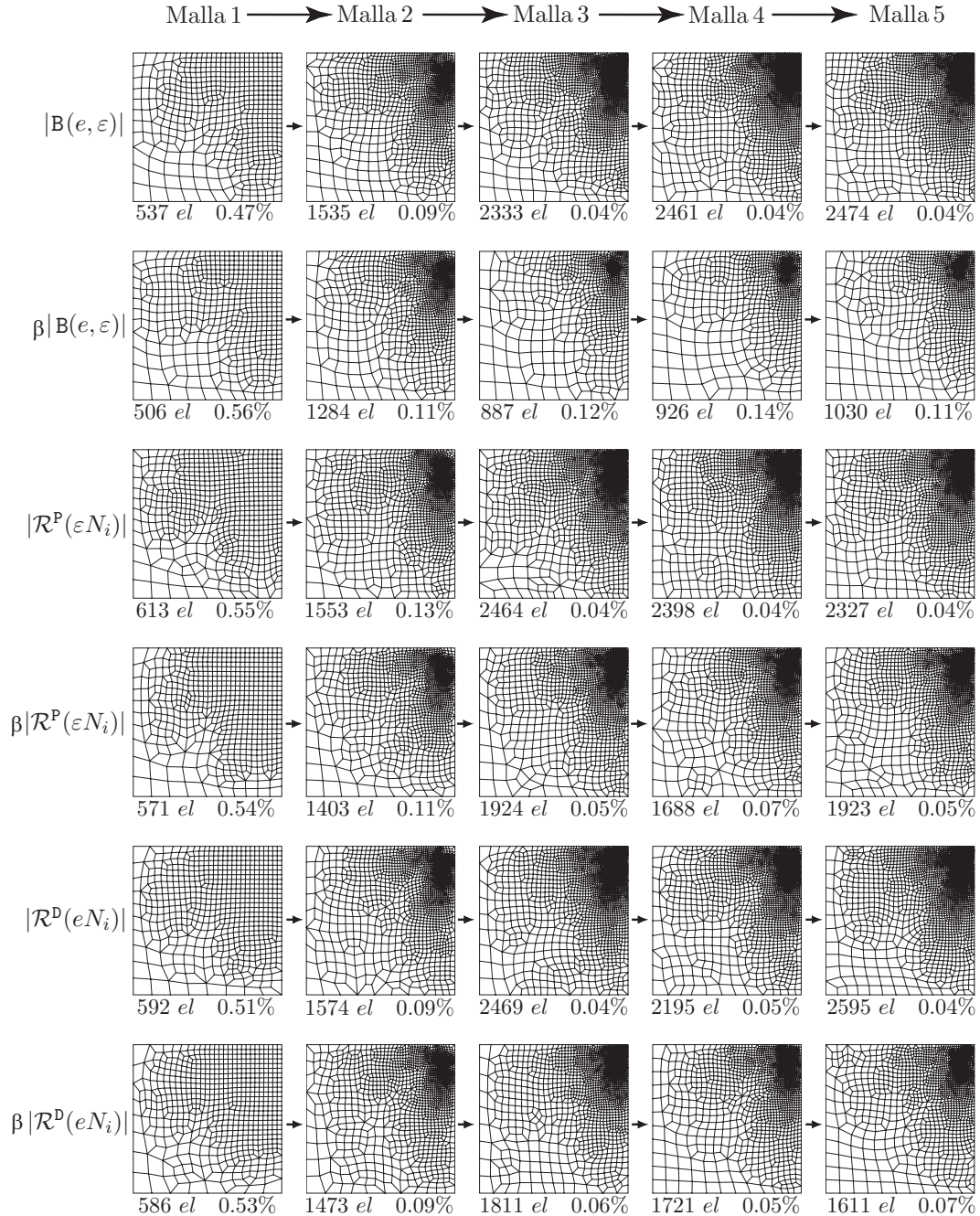


Figura 4.12: Ejemplo térmico: Sucesión de mallas para el criterio de remallado UED.

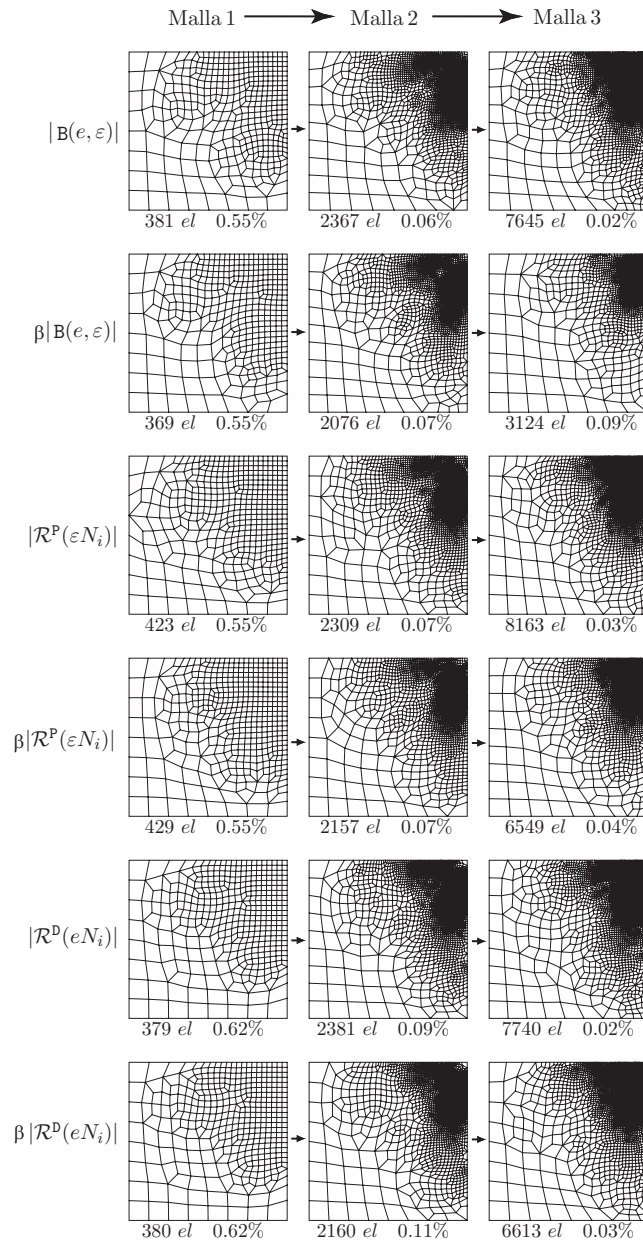


Figura 4.13: Ejemplo térmico: Sucesión de mallas para el criterio de remallado USE.

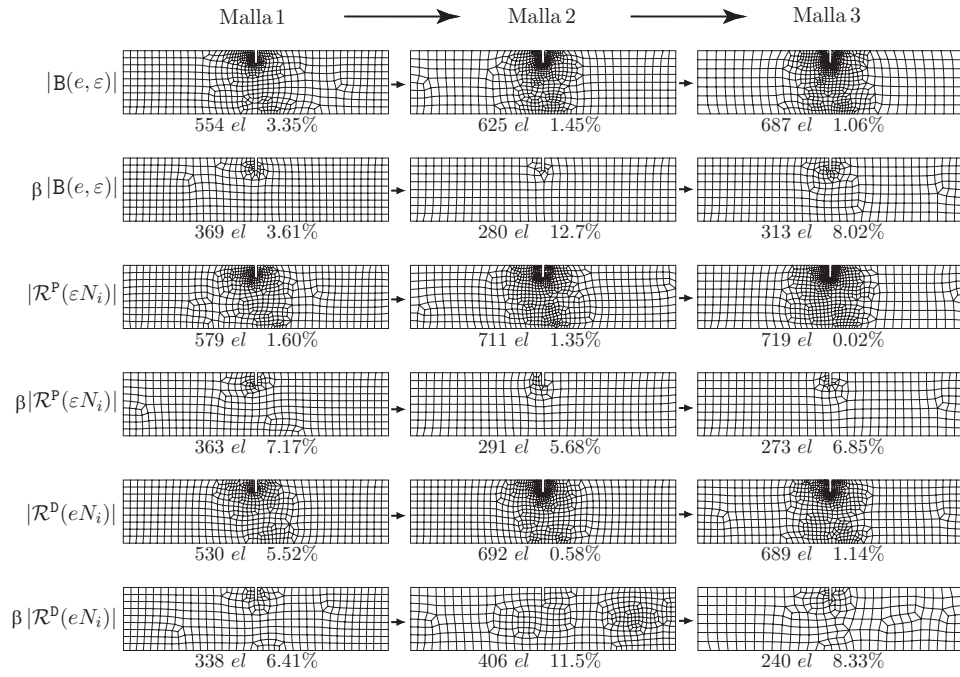


Figura 4.14: Ejemplo mecánico: Sucesión de mallas para la cantidad de interés CMOD y el criterio de remallado UED.

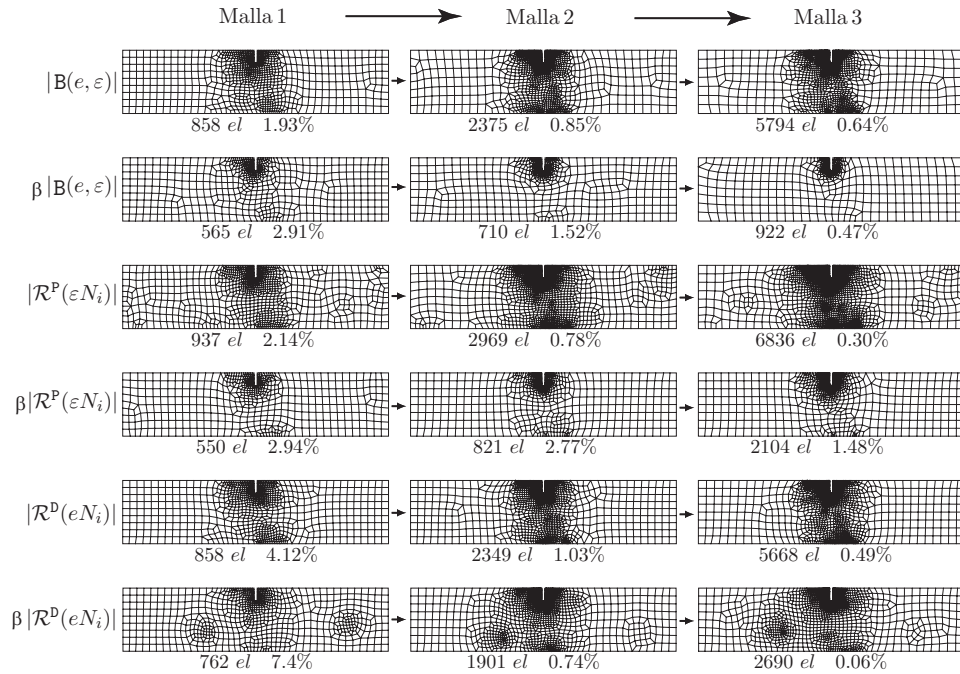


Figura 4.15: Ejemplo mecánico: Sucesión de mallas para la cantidad de interés CMOD y el criterio de remallado USE.

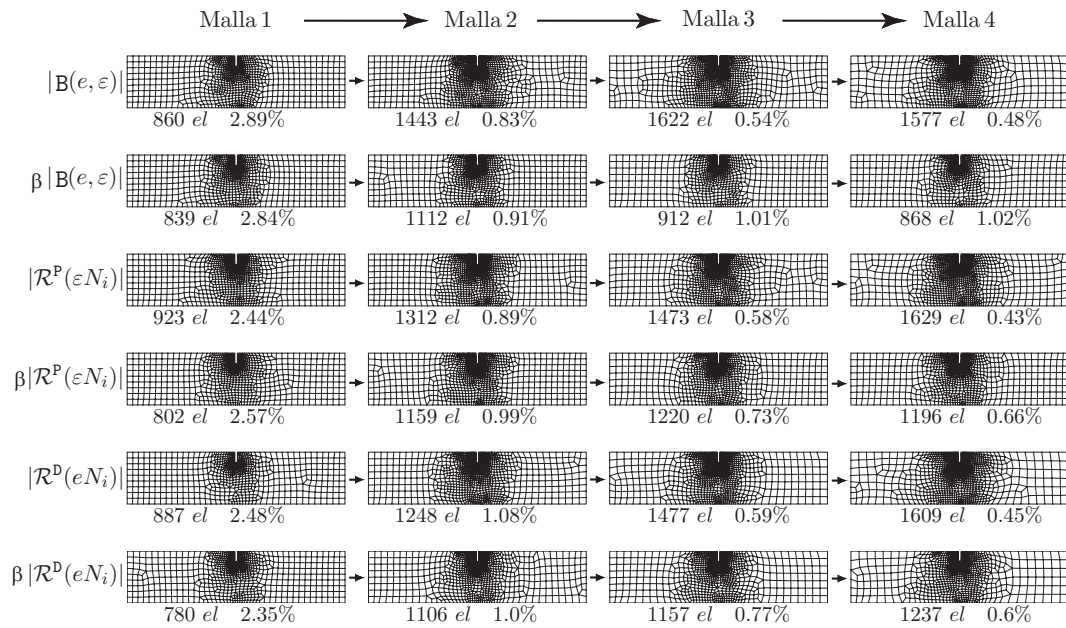


Figura 4.16: Ejemplo mecánico: Sucesión de mallas para la cantidad de interés CMSD y el criterio de remallado UED.

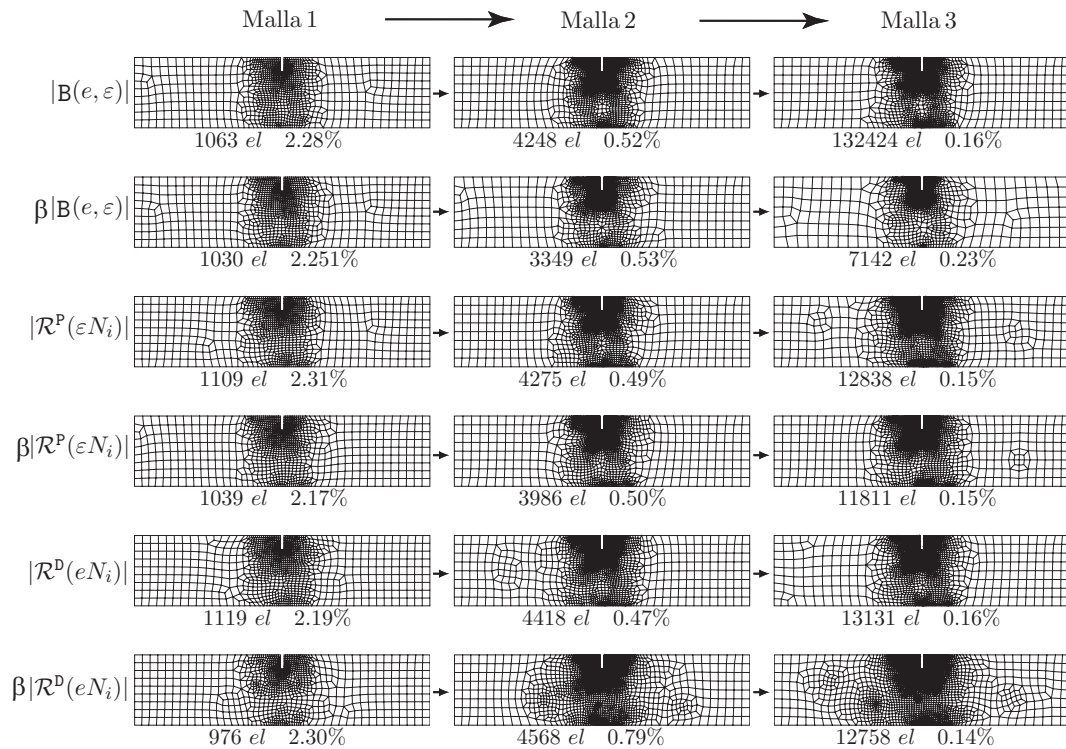


Figura 4.17: Ejemplo mecánico: Sucesión de mallas para la cantidad de interés CMSD y el criterio de remallado USE.

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas de futuro

Aunque inmediatamente después de concluir y cerrar el trabajo de tesis la investigación debe continuar, y así se hará, es necesario a esta altura del trabajo sacar conclusiones del camino recorrido. Así pues, en este capítulo se hacen las consideraciones finales sobre los objetivos propuestos y las metas alcanzadas hasta el momento. Se concluye el capítulo enunciando los nuevos objetivos a seguir y se especula un poco sobre las tendencias de futuro en el campo de estima de error en cantidades de interés de problemas que dependen del tiempo.

5.1. Conclusiones y aportes originales

Los objetivos que se siguen cuando se hace estima de error en la simulación numérica de un problema transitorios son: conocer con qué precisión se ha calculado la aproximación del problema, la distribución local del error, y, por último, aplicar un proceso adaptativo para definir una malla óptima para el cálculo del problema. Es decir, una malla, con el mínimo de grados de libertad posible, que minimize el error cometido al evaluar la cantidad de interés. Además, en este trabajo se ha introducido el paradigma de representación óp-

tima del error para el cálculo de la malla óptima, y el mismo se ha considerado que debe formar parte activa de los objetivos a cumplir. Así, los pasos a seguir en la simulación numérica son:

1. Cálculo de la solución,
2. Estima de error,
3. Representación óptima del error,
4. Adaptatividad.

En este trabajo se han desarrollado, en su totalidad, los tres primeros pasos. Sin embargo, para problemas parabólicos y debido al vacío que existía (o que aún sigue existiendo a pesar de la contribuciones hechas en esta tesis) en adaptatividad a partir de cantidades de interés, relacionado con: unicidad y representación óptima del error, precisión de los estimadores definidos a partir de postproceso (en desplazamientos), criterios de remallado y resolución apropiada del problema dual (integración hacia el pasado), la adaptatividad sólo se ha realizado para problemas estacionarios. No obstante, los pasos logrados definen un marco general apropiado y firme para alcanzar de forma óptima la adaptatividad en problemas parabólicos.

Las conclusiones y comentarios finales que surgen de estos logros ya han sido dados en cada uno de los capítulos que componen el trabajo. No obstante, las *contribuciones originales* de este trabajo se pueden resumir en:

Definir una estima de error por postproceso para el dominio espacio-tiempo de problemas parabólicos. El suavizado hecho por la estima en la variable temporal presenta la propiedad de superconvergencia. Además, se tiene la opción de poder integrar en el tiempo de forma exacta. Por otro lado, usando el output de este estimador se pudo definir un estimador de tipo residual. La validación de los estimadores se llevo a cabo mediante un test de ejemplos tanto de interés académico como de la ingeniería. Los resultados obtenidos demuestran la consistencia y precisión (desde un punto de vista

numérico) de los estimadores propuestos (suavizado en desplazamientos). En el Apéndice B, queda además justificada la buena precisión de este tipo de estima en problemas (estacionarios) con soluciones no suaves, incluso no derivables en algún punto y dominios no convexos.

Análisis sobre la representación del error (unicidad). Debido a que la representación del error en cantidades de interés no es única, en esta tesis se analizan tres representaciones del error combinadas con diferentes estrategias de postproceso. En concreto, usando la propiedad de partición de la unidad, se introducen representaciones del error asociadas al residuo débil definidas a partir de los nodos de discretización de la malla. 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.

Análisis sobre la representación óptima del error. Este hecho contribuye a eliminar el fenómeno de signos opuestos que presentan las contribuciones locales del error en la cantidad de interés. Se realiza un estudio (en problemas estacionarios) para definir la representación del error que resulta óptima en el sentido que la suma de las magnitudes locales no produzcan una sobrevaloración del error. En la experimentación numérica, el paradigma de representar de forma óptima el error arroja resultados satisfactorios para una de las opciones propuestas; sin embargo, no todo está dicho. Pues, a partir de las observaciones hechas, el generador automático de mallas tiene mucho que decir, dado que este puede influir en la representación final del error. Además, el uso de mallas no conformes puede abrir aún más las posibilidades para este tipo de representación.

Criterios de remallado en cantidades de interés. En línea general, los criterios de remallado están basados en norma de energía y su output viene dado elemento a elemento en la malla actual. En el capítulo 4 de este trabajo se deducen y analizan criterios de remallado basados en cantidades de interés; demostrando la optimalidad de uno de ellos. Debido a que se han introducido representaciones del error definidas a partir de los nodos de discretización de la malla se deducen criterios de remallado que presentan esta misma caracterís-

tica; esto favorece al proceso adaptativo, pues generalmente los generadores automáticos de mallas requieren la información expresada en los nodos de la malla y no elemento a elemento. El output de las diferentes representaciones del error (evaluadas en las soluciones de referencia) son usados para analizar la convergencia y estabilidad de estos criterios de remallado.

Para llevar a fin los objetivos de este trabajo se creó, inicialmente, bajo la plataforma MATLAB, y posteriormente en la plataforma CASTEM, el código necesario para implementar, validar y postprocesar las estimas propuestas. Aunque este código no puede considerarse como una contribución en la investigación del problema, si puede considerarse como una contribución de carácter académico local. Pues, éste puede llegar a ser de gran utilidad en las futuras investigaciones en el área, que nuestro grupo de investigación emprenda.

5.2. Continuación de la investigación

En el presente se esta trabajando para concluir el ciclo, desarrollando el proceso adaptativo (paso 4) en problemas parabólicos. Dada la dificultad que transfiere los problemas transitorios al proceso adaptativo se han plateado una serie de objetivos e ideas a seguir:

- **Objetivo 1.** La representación a posteriori del error consta de contribuciones espacio-tiempo no desacopladas. Se desea lograr una representación que separe dichas contribuciones. Este hecho será de una relevancia primordial para el proceso de adaptatividad.
- **Objetivo 2.** Debido al costo computacional y a la dificultad adicional de una integración hacia el pasado en el tiempo, se hará el cálculo de z_H en una malla grosera y se utilizará en todo el proceso de cálculo de u_H (aún cambiando la malla para u_H). El objetivo es ver, mediante una amplia experimentación numérica, que consecuencias acarrea esta simplificación en el proceso de adaptatividad.

- **Objetivo 3.** Hasta el momento se han presentado dos procedimientos (recovery y residual) para lograr una aproximación de la solución dual z a partir de la aproximación z_H calculada en la malla gruesa. El objetivo es analizar e implementar otros métodos de postproceso para la aproximación de la solución dual.

- **Objetivo 4.** Construir acotaciones para la representación a posteriori del error. En este objetivo se quieren seguir las ideas que existen en la literatura para el caso de problemas elípticos.

- **Objetivo 5.** Analizar la posibilidad de resolver el problema dual mediante una integración semianalítica (análisis modal). Esta idea surge al suponer que el problema dual es homogéneo y por lo tanto la solución z del problema semidiscreto puede ser representada de la forma $z(\mathbf{x}, t) = e^{-\lambda t}\psi$. Esta simplificación, puede suponer la resolución de un problema de autovalores y no del problema regresivo planteado.

Al lograr estos objetivos, se debe concluir en un proceso adaptativo en magnitudes de interés de problemas parabólicos. Esto, en cierta forma, concluiría el ciclo iniciado en este trabajo.

Resulta conveniente, además de los objetivos enunciados previamente, llevar a cabo un análisis (en problemas estacionarios) donde se haga adaptatividad en las distintas representaciones del error usando las estimas y los criterios de remallado propuestos. Este estudio le daría una conclusión final a las dadas en los capítulos 3 y 4 de esta tesis.

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

5.3. Otras líneas de investigación

Dentro del marco de estima de error en magnitudes de interés en problemas transitorios, y como enlace inmediato al marco de investigación que se sigue en este trabajo, se pueden citar algunas líneas de investigación:

- Cantidades de interés representadas por funcionales no lineales.
- Generalizar el problemas parabólico al caso de ecuaciones (sistemas) del tipo convección difusión reacción, con términos de convección o difusión no constantes. Además, el caso donde se presentan términos de reacción no lineales.
- Trasladar todos los objetivos y resultados alcanzados al caso de problemas hiperbólicos.
- Definir y analizar aproximaciones de z mediante estimadores tipo recovery o residual pero usando interpolación tipo p en la malla.

Apéndice A: Formulación de los métodos de discontinuos Galerkin (cG(q)dG(r)) en tiempo

A.1. Métodos cG(q)dG(0) y cG(q)dG(1)

cG(q)dG(0)

Recuérdese que r es el grado de interpolación en el tiempo. Para $r = 0$ la solución u_H es constante a trozos en el tiempo. Es decir, se tiene la equivalencia $u_H^{n-} \equiv u_H^{(n-1)+} \stackrel{\text{not}}{=} u_H^n = u_H$, y $\dot{u}_H = 0$ para $u_H \in \mathbf{V}_{H,\Delta t} \equiv \mathbf{V}_H$. Teniendo en cuenta esto, la ecuación (2.12) se transforma en

$$(u_H^{(n-1)+} - u_H^{(n-1)-}, v) + \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (\nabla u_H^n, \nabla v) dt = \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, v) dt \quad \forall v \in \mathbf{V}_H.$$

Así, el cG(q)dG(0) se reduce al siguiente problema:

Para $n = 1, 2, \dots, N$, encontrar $u_H \in \mathbf{V}_H$ tal que

$$(u_H^n, v) + k_n (\nabla u_H^n, \nabla v) = (u_H^{(n-1)-}, v) + \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, v) dt, \quad (\text{A.1})$$

con $u_H^{0-} = u_0, \quad \forall v \in \mathbf{V}_H.$

Definiendo

$$u_H^n(x, t) := \sum_{i=1}^M \xi_i^n \varphi_i^n(x) \quad (x, t) \in S_n,$$

donde $\xi_i^n = u_{\text{H}}^n(x_i, t) \quad \forall t \in I_n$, $\{\varphi_i^n\}_{i=1}^M$ una base para el espacio \mathbf{V}_{H} , y $v := \varphi_j^n$ con $j = 1 : M$, se tiene que en cada nivel S_n el método $\text{cG}(q)\text{dG}(0)$ requiere resolver el siguiente sistema lineal

$$(\mathbf{M}_n + k_n \mathbf{A}_n) \boldsymbol{\xi}^n = \mathbf{B}_{n-1,n} \boldsymbol{\xi}^{n-1} + \mathbf{F}_n, \quad n = 1 : N. \quad (\text{A.2})$$

Aquí,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_n &= (a_{ij}) = \int_{\Omega} \nabla \varphi_i^n \cdot \nabla \varphi_j^n d\Omega & \mathbf{M}_n &= (m_{ij}) = \int_{\Omega} \varphi_i^n \varphi_j^n d\Omega \\ \mathbf{F}_n &= (F_i) = \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, \varphi_i^n) dt & \mathbf{B}_{n-1,n} &= (b_{ij}) = \int_{\Omega} \varphi_i^{n-1} \varphi_j^n d\Omega \end{aligned}$$

denotan la matriz de rigidez, la matriz de masa, el vector de carga y la matriz de proyección entre $\mathbf{V}_{\text{H},n-1}$ y $\mathbf{V}_{\text{H},\Delta t}$, respectivamente, y en cada nivel S_n . Además, para S_1 $\boldsymbol{\xi}^0 = u_0(x_j)$, con $j = 1 : M$.

cG(q)dG(1)

En el caso de $r = 1$, la solución es lineal a trozos en el tiempo. Para cada S_n , se define

$$u_{\text{H}}(\cdot, t) := U_0 + \left(\frac{t - t_{n-1}}{k_n} \right) U_1, \quad \text{con } U_0, U_1 \in \mathbf{V}_{\text{H}}.$$

Así, $u_{\text{H}}^{(n-1)+} = U_0$, $u_{\text{H}}^{n-} = U_0 + U_1$ y $\dot{u}_{\text{H}} = (1/k_n)U_1$. De la definición de u_{H} se tiene que la función base de $\mathbf{V}_{\text{H},\Delta t}$ tiene la forma $\varphi_{jl}^n := v\psi_l(t)$, con $\{\psi_l\}_{l=0,1} = \{1, \frac{t-t_{n-1}}{k_n}\}$ la base de $\mathbb{P}_1(I_n)$. Así, se pueden calcular por separado cada término polinomial $\{v, \frac{t-t_{n-1}}{k_n}v\}$.

► Para el primer caso, la ecuación general (2.12) se reduce a:

$$\begin{aligned} \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} \left\{ \frac{1}{k_n} (U_1, v) + (\nabla(U_0 + \frac{t-t_{n-1}}{k_n} U_1), \nabla v) \right\} dt + (U_0, v) &= (u_{\text{H}}^{(n-1)-}, v) + \\ &+ \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, v) dt. \end{aligned}$$

Entonces, usando $\int_{I_n} (t - t_{n-1}) dt = \frac{1}{2} k_n^2$ se tiene

$$\begin{aligned} (U_1, v) + k_n (\nabla U_0, \nabla v) &+ \frac{1}{2} k_n (\nabla U_1, \nabla v) + (U_0, v) \\ &= (u_{\text{H}}^{(n-1)-}, v) + \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, v) dt \quad \forall v \in \mathbf{V}_{\text{H}} \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

► Para el segundo caso, se obtiene de la ecuación general (2.12)

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_n^2}(U_1, v) \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} t - t_{n-1} dt + \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (\nabla(U_0 + \frac{t-t_{n-1}}{k_n} U_1), \nabla v) \frac{t-t_{n-1}}{k_n} dt \\ = \frac{1}{k_n} \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, v)(t - t_{n-1}) dt. \end{aligned}$$

Entonces, usando $\int_{I_n} (t - t_{n-1})^2 dt = \frac{1}{3} k_n^3$ se tiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(U_1, v) + \frac{1}{2} k_n (\nabla U_0, \nabla v) + \frac{1}{3} k_n (\nabla U_1, \nabla v) = \\ = \frac{1}{k_n} \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (t - t_{n-1}) (f(\cdot, t), v) dt \quad \forall v \in \mathbf{V}_H \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Así, el problema consiste en encontrar

$$u_H(\cdot, t) := U_0 + \left(\frac{t - t_{n-1}}{k_n}\right) U_1 \text{ con } t \in I_n, \quad U_i \in \mathbf{V}_H$$

tal que las ecuaciones (A.3)-(A.4) se cumplan.

Definiendo $U_0 := \sum_{i=1}^M U_{0i} \varphi_i(x)$; $U_1 := \sum_{i=1}^M U_{1i} \varphi_i(x)$ y $v := \varphi_j^n$ con $j = 1 : M$, se obtiene de las ecuaciones (A.3)-(A.4) que en cada nivel S_n el método $cG(q)dG(1)$ requiere resolver el siguiente sistema lineal por bloques

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_n + k_n \mathbf{A}_n & \mathbf{M}_n + \frac{1}{2} k_n \mathbf{A}_n \\ \frac{1}{2} k_n \mathbf{A}_n & \frac{1}{2} \mathbf{M}_n + \frac{1}{3} k_n \mathbf{A}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_0 \\ \mathbf{U}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{n-1,n} u_H^{(n-1)-} + \mathbf{F}_n \\ \frac{1}{k_n} \mathbf{G}_n \end{bmatrix},$$

donde

$$\mathbf{F}_n = (F_i) := \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (f, \varphi_i^n) dt, \quad \mathbf{G}_n = (G_i(t)) := \int_{t_{n-1}^+}^{t_n} (t - t_{n-1}) (f(\cdot, t), \varphi_j^n) dt,$$

y $\mathbf{A}_n, \mathbf{M}_n, \mathbf{B}_{n-1,n}$ definidas previamente en $cG(q)dG(0)$. ■

A.2. Problema local

Una propiedad que reviste interés para el cálculo de estimas es la precisión de la solución numérica u_H (ver Figura 2.4) en el nodo final de $I_n = (t_{n-1}, t_n]$.

Pues, al suponer que la solución $u_{\mathbb{H}}^{n-1-}$, en I_{n-1} , es “exacta” se puede definir un problema local para (3.1) en el intervalo I_n usando $u_{\mathbb{H}}^{n-1-}$ como condición inicial. Para demostrar la buena definición de dicho problema local, partiremos primero del caso más simple, una EDO lineal dada por

$$\dot{u}(t) = f(t),$$

la cual surge al suponer que no tenemos la variable espacial x en el problema modelo. Entonces

$$u(t_n) = u(t_{n-1}) + \int_{I_n} f(t) dt.$$

Ahora, Para el caso de una EDO, el $cG(q)dG(r)$ dado en (2.8) se transforma en:

$$u_{\mathbb{H}}^{n-} v^{n-} - \int_{I_n} u_{\mathbb{H}} v' dt = u_{\mathbb{H}}^{(n-1)-} v^{(n-1)-} + \int_{I_n} f v dt.$$

Si $v \equiv 1$ entonces $v' = 0$ y por lo tanto

$$u_{\mathbb{H}}^{n-} = u_{\mathbb{H}}^{(n-1)-} + \int_{I_n} f dt.$$

Así, si suponemos que $u_{\mathbb{H}}^{(n-1)-} = u(t_{n-1})$ se tiene que $u_{\mathbb{H}}^{n-} = u(t_n)$.

Para el caso general del problema (3.1) se tiene que

$$u(x, t_n) = u(x, t_{n-1}) + \int_{I_n} f(x, t) + \Delta u(x, t) dt.$$

Por lo tanto

$$(u^n, v) = (u^{n-1}, v) + \int_{I_n} (f, v) dt - \int_{I_n} (\nabla u, \nabla v) dt. \quad (\text{A.5})$$

Por otro lado del $cG(q)dG(r)$, ecuación (2.8), se tiene

$$(u_{\mathbb{H}}^{n-}, v^n) - \int_{I_n} (u_{\mathbb{H}}, \dot{v}) dt = (u_{\mathbb{H}}^{n-1-}, v^{n-1+}) - \int_{I_n} (\nabla u_{\mathbb{H}}, \nabla v) dt + \int_{I_n} (f, v) dt. \quad (\text{A.6})$$

Tomando $v(x, t) = N_i(x) \times 1$ y la hipótesis “ $u_{\mathbb{H}}^{n-1-} = u^{n-1}$ ” se obtiene al restar (A.5) y (A.6)

$$(u^n, N_i) + \int_{I_n} (\nabla u, \nabla N_i) dt = (u_{\mathbb{H}}^{n-}, N_i) + \int_{I_n} (\nabla u_{\mathbb{H}}, \nabla N_i) dt.$$

Si suponemos despreciable, el error (dependiente de la malla espacial H) cometido al aproximar $(\nabla u, \nabla N_i)$ por $(\nabla u_{\mathbb{H}}, \nabla N_i)$ se tiene que $u_{\mathbb{H}}$ es la proyección \mathbf{L}_2 de u sobre $\mathbf{V}_{\mathbb{H}, \Delta t}$. ■

Apéndice B: Análisis de la exactitud asintótica de los métodos de suavizado (recovery)

B.1. Planteamiento

En este apéndice se estudia el recovery, S_x , hecho para definir la parte espacial de z^* . Para facilitar la presentación de los resultados se define el problema elíptico primal

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f & \text{en } \Omega \\ u &= 0 & \text{en } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{B.1}$$

donde $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ es un dominio acotado, el cual, por el momento, es asumido poligonal convexo. La formulación variacional de (B.1) consiste en: encontrar $u \in \mathbf{V}$ tal que

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

donde $\mathbf{V} = \{v \in \mathbf{H}^1(\Omega) : v = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$, $B(u, v) = (\nabla u, \nabla v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\Omega$ y $(f, v) = \int_{\Omega} f v d\Omega$. Se introduce el espacio de elementos finitos $\mathbf{V}_H \subset \mathbf{V}$,

$$\mathbf{V}_H := \{v \in \mathbf{V} : v|_k \in \mathbb{P}(k), \quad k \in \mathbb{T}_H\},$$

inducido por la partición \mathbb{T}_H del dominio Ω en k (elementos) triángulos o cuadriláteros de longitud $H_k = \text{diam}(k)$. Se denota por $H := \max_{k \in \mathbb{T}_H} H_k$ el tamaño característico de elemento en de la malla, $\mathbb{P}(k)$ denota un espacio apropiado de funciones definidas en la celda $k \in \mathbb{T}_H$. Y, la aproximación $u_H \in$

\mathbf{V}_H es determinada por

$$B(u_H, \varphi) = (f, \varphi) \quad \forall \varphi \in \mathbf{V}_H. \quad (\text{B.3})$$

La cantidad de interés, $J(u)$, esta dada por

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

Así, el problema dual asociado queda definido por

$$B(z, \varphi) = (j, \varphi) \quad \forall \varphi \in \mathbf{V}, \quad (\text{B.4})$$

y la representación del error en la cantidad de interés queda dada por

$$J(e) = (f, z) - \int_{\Omega} \nabla u_H \cdot \nabla z \, d\Omega := \mathcal{R}^P(z). \quad (\text{B.5})$$

Si la solución dual, z , es aproximada por un recovery, z^* , como el descrito en la sección 2.6.1, surge la pregunta:

¿por qué z^* debe ser una mejor aproximación de z que z_H ?

De hecho, la construcción de z^* esta basada en la información nodal de z_H , y el error puntual $(z - z_H)(\mathbf{x}_i)$ tiene un comportamiento generalmente no mayor que $\mathcal{O}(H^2)$, incluso en mallas uniformes. De esto, parece improbable que

$$\|z - z^*\|_k \ll \|z - z_H\|_k.$$

Sin embargo, éste no puede ser el punto de vista correcto. Pues, también se podría buscar demostrar la relación más débil

$$|\mathcal{R}^P(z - z^*)| \ll |\mathcal{R}^P(z - z_H)|,$$

la cual esta pensada como una propiedad global de “superconvergencia”. Por consiguiente, probablemente, debe depender de alguna propiedad de uniformidad de la malla. Antes de enunciar el teorema que nos dice bajo qué condiciones ésta propiedad se cumple, es necesario introducir una forma equivalente para definir la representación del error.

B.2. Análisis

Usando el Teorema de Green y la definición del error dual $\varepsilon := z - z_{\text{H}}$, se tiene

$$\begin{aligned} (\nabla e, \nabla z) &= \int_{\partial\Omega} \varepsilon \nabla e \cdot \mathbf{n} ds - \int_{\Omega} \varepsilon \Delta e d\Omega \\ &= \int_{\partial\Omega} \varepsilon \nabla u \cdot \mathbf{n} ds - \int_{\partial\Omega} \varepsilon \nabla u_{\text{H}} \cdot \mathbf{n} ds - \int_{\Omega} \varepsilon \Delta(u - u_{\text{H}}) d\Omega, \end{aligned}$$

Por otro lado, para cada elemento

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_k} z \nabla u_{\text{H}} \cdot \mathbf{n} ds &= \sum_{\Gamma_i=1}^{N_{\text{aristas}}} \int_{\Gamma_i} z \nabla u_{\text{H}} \cdot \mathbf{n} ds = \sum_{\Gamma_i=1}^{N_{\text{aristas}}} \int_{\Gamma_i} z \frac{1}{2} (\nabla u_{\text{H}}|_{k_1} - \nabla u_{\text{H}}|_{k_2}) \cdot \mathbf{n} ds \\ &= \sum_{\Gamma_i=1}^{N_{\text{aristas}}} \frac{1}{2} \int_{\Gamma_i} z [\nabla u_{\text{H}}] \cdot \mathbf{n} ds, \end{aligned}$$

donde la suma se realiza sobre las arista Γ_i ($N_{\text{aristas}} = 4$, número de aristas por elemento) del elemento y $[\nabla u_{\text{H}}] = \nabla u_{\text{H}}|_{k_1} - \nabla u_{\text{H}}|_{k_2}$ denota el salto del gradiente en la arista común de dos elementos adyacentes k_1 y k_2 (salto espacial). Dado que la solución exacta u se supone regular, su flujo es continuo, los saltos en las aristas se cancelan, concluyendo

$$(\nabla e, \nabla z)_k = \int_{\Omega_k} (f + \Delta u_{\text{H}}) \varepsilon d\Omega_k - \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_k} \varepsilon [\nabla u_{\text{H}}] \cdot \mathbf{n} ds.$$

Sumando todos los elementos de \mathbb{T}_h y usando (B.4)

$$J(e) = (\nabla e, \nabla z) = \sum_{k \in \mathbb{T}_h} \left\{ (R(u_{\text{H}}), \varepsilon)_k - (r(u_{\text{H}}), \varepsilon)_{\partial k} \right\} \quad (\text{B.6})$$

donde $R(u_{\text{H}})$ y $r(u_{\text{H}})$ representan los *residuos en el elemento y en la frontera del elemento*, respectivamente, definidos por

$$R(u_{\text{H}})|_k := f + \Delta u_{\text{H}} \quad r(u_{\text{H}})|_{\Gamma} := \begin{cases} \frac{1}{2} \mathbf{n} \cdot [\nabla u_{\text{H}}] & \text{si } \Gamma \subset \partial k \setminus \partial\Omega, \\ 0 & \text{si } \Gamma \subset \partial\Omega. \end{cases}$$

Se aclara la notación usada diciendo que $(u, v)_k = \int_{\Omega_k} uv d\Omega$ y $\|u\|_k = \int_{\Omega_k} |u|^2 d\Omega$ representan el producto escalar y la norma L^2 en el elemento Ω_k (de forma análoga para $\partial k \equiv \partial\Omega_k$).

De la representación del error dada en (B.6) se deduce el siguiente resultado.

Teorema 4 Para la aproximación por el MEF de la ecuación de Poisson (B.1) se tiene la estima a posteriori del error

$$|J(e)| \leq \eta(u_H) := \sum_{k \in \mathbb{T}_H} \left| (R(u_H), \varepsilon)_k - (r(u_H), \varepsilon)_{\partial k} \right|. \quad (\text{B.7})$$

Además, se puede inferir la siguiente estima a posteriori del error

$$|J(e)| \leq \eta_\omega(u_H) := \sum_{k \in \mathbb{T}_H} \rho_k \omega_k, \quad (\text{B.8})$$

donde el residuo ρ_k y peso ω_k de la celda k son dados por

$$\rho_k := H_k \|R(u_H)\|_k + \frac{1}{2} H_k^{1/2} \|\mathbf{n} \cdot [\nabla u_H]\|_{\partial k}$$

y

$$\omega_k := \max \left\{ H_k^{-1} \|z - z_H\|_k, H_k^{-1/2} \|z - z_H\|_{\partial k} \right\}$$

Prueba: La primera desigualdad se sigue de forma inmediata de (B.6).

Para probar (B.8), se tiene de (B.6)

$$|(\nabla e, \nabla z)| \leq \sum_{k \in \mathbb{T}_H} \left[\int_{\Omega_k} |(f + \Delta u_H)(z - z_H)| d\Omega_k + \frac{1}{2} \int_{\partial \Omega_k} |\mathbf{n} \cdot [\nabla u_H](z - z_H)| ds \right].$$

Ahora, usando la desigualdad de Hölder

$$\int_{\Omega_k} |R(u_H)(z - z_H)| d\Omega_k \leq \left[\int_{\Omega_k} |R(u_H)|^2 d\Omega_k \right]^{1/2} \left[\int_{\Omega_k} |z - z_H|^2 d\Omega_k \right]^{1/2}$$

y

$$\int_{\partial \Omega_k} |\mathbf{n} \cdot [\nabla u_H](z - z_H)| ds \leq \left[\int_{\partial \Omega_k} |\mathbf{n} \cdot [\nabla u_H]|^2 ds \right]^{1/2} \left[\int_{\partial \Omega_k} |z - z_H|^2 ds \right]^{1/2}.$$

Entonces, usando estas dos últimas desigualdades, se obtiene

$$|(\nabla e, \nabla z)| \leq \sum_{k \in \mathbb{T}_H} \left[\int_{\Omega_k} |R(u_H)(z - z_H)| d\Omega_k + \frac{1}{2} \int_{\partial \Omega_k} |\mathbf{n} \cdot [\nabla u_H](z - z_H)| ds \right] \leq \sum_{k \in \mathbb{T}_H} \left\{ \|R(u_H)\|_k \|z - z_H\|_k + \frac{1}{2} \|\mathbf{n} \cdot [\nabla u_H]\|_{\partial k} \|z - z_H\|_{\partial k} \right\}.$$

Así, al definir

$$\begin{aligned} \rho_k &:= H_k \|R(u_H)\|_k + \frac{1}{2} H_k^{1/2} \|\mathbf{n} \cdot [\nabla u_H]\|_{\partial k} \\ \omega_k &:= \max \left\{ H_k^{-1} \|z - z_H\|_k, H_k^{-1/2} \|z - z_H\|_{\partial k} \right\} \end{aligned}$$

se tiene el resultado pedido

$$|(\nabla e, \nabla z)| \leq \sum_{k \in \mathbb{T}_H} \rho_k \omega_k$$

■

Observación: La terminología de pesos al referirnos a ω_k viene del hecho que el factor $z - z_H$, en (B.6), puede ser visto como el peso dado a la sensibilidad de $J(e)$ con respecto a los cambios de los residuales $R(u_H)$ y $r(u_H)$. ■

Corolario 5 *La estima definida en (B.7) se sigue cumpliendo si se define*

$$\rho_k := \|R(u_H)\|_k + H_k^{-1/2} \|r(u_H)\|_{\partial k} \quad y \quad \omega_k := \|z - z_H\|_k + H_k^{+1/2} \|z - z_H\|_{\partial k}$$

Prueba: Consecuencia del Teorema anterior. ■

Observación: La estima en el corolario anterior representa una sobre-estimación del error. Esta representación será de gran utilidad en los resultados siguientes. ■

Otra desigualdad de gran ayuda, la cual se puede deducir a partir del Teorema 1.7 de [42], para $v \in \mathbf{V} \cap \mathbf{H}^2(\Omega)$ esta dada por

$$\|v - \Pi_H v\|_k + H_k^{1/2} \|v - \Pi_H v\|_{\partial k} \leq C(k) H_k^2 \|v\|_{\mathbf{H}^2(\mathcal{S}(k))}, \quad (\text{B.9})$$

donde $\Pi_H v \in \mathbf{V}_H$ denota la interpolación nodal natural satisfaciendo que $\Pi_H v(P) = v(P)$ en todo punto nodal P y, $\mathcal{S}(k)$ denota el dominio formado por el patch de elementos donde $\Pi_H z$ está definido.

Teorema 6 *Si $z \in C^{4+\xi}(\Omega)$, para algún $\xi \geq 0$, \mathbb{T}_H define la discretización de una malla uniforme, H , sobre un dominio poligonal convexo Ω y*

$$\rho_k \leq CH_k \quad \text{para } k \in \mathbb{T}_H, \quad (\text{B.10})$$

se tiene entonces que

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z^* - z_H) + \mathcal{O}(H^3). \quad (\text{B.11})$$

Prueba:

Al escribir la identidad del error $J(e) = \mathcal{R}^P(z - z_H)$ en la forma

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z - \Pi_H z) + \mathcal{R}^P(\Pi_H z - z^*) + \mathcal{R}^P(z^* - z_H), \quad (\text{B.12})$$

el último término del lado derecho es justamente nuestro estimador de error. Mientras, el primero y segundo término pueden ser estimados separadamente.

Usando la propiedad local de la interpolación $\Pi_H z$, dada en (B.9) se obtiene para el primer término de (B.12)

$$\left| \mathcal{R}^P(z - \Pi_H z) \right| \leq C \sum_{k \in \mathbb{T}_H} \rho_k H_k^2 \|z\|_{\mathbf{H}^2(\mathcal{S}(k))}. \quad (\text{B.13})$$

Usando (B.10) se llega a la estima

$$\left| \mathcal{R}^P(z - \Pi_H z) \right| \leq C(u, z) H_k^3. \quad (\text{B.14})$$

El segundo término de (B.12) requiere más trabajo, pues relaciona propiedades no locales de z_H y la interpolación local. Su estima depende fuertemente en las propiedades de uniformidad de la malla dada por \mathbb{T}_H . Así, si se supone que la malla \mathbb{T}_H es uniforme con un ancho de malla H y dado que $z \in C^{4+\xi}$ entonces, se tiene que en los puntos nodales, el error $z - z_H$ permite una expansión asintótica en potencias de H que puede expresarse en la forma (ver Teorema 1 de Blum y Rannacher [72])

$$\Pi_H z - z_H = \Pi_H(z - z_H) = H^2 \psi(\cdot, z) + H^3 \Lambda_H(\cdot, z), \quad (\text{B.15})$$

para alguna función, independiente de H , $\psi \in \mathbf{H}_0^1(\Omega)$ y un término de resto, Λ_H , de orden $\mathcal{O}(H^4 \ln(1/H))$ si $\xi = 0$ y $\mathcal{O}(H^4)$ si $\xi > 0$. De esto, se concluye

$$\mathcal{R}^P(\Pi_H z - z_H) = H^2 \mathcal{R}^P(\psi) + H^3 \mathcal{R}^P(\Lambda_H)$$

y usando la ortogonalidad de Galerkin

$$\mathcal{R}^P(\Pi_H z - z_H) = H^2 \mathcal{R}^P(\psi - \Pi_H \psi) + H^3 \mathcal{R}^P(\Lambda_H)$$

Dado que z^* coincide con z_H en los valores nodales, se puede asumir que z^* tiene el mismo comportamiento asintótico, es decir

$$\mathcal{R}^P(\Pi_H z - z^*) = H^2 \mathcal{R}^P(\psi - \Pi_H \psi) + H^3 \mathcal{R}^P(\Lambda_H) \quad (\text{B.16})$$

Usando (B.9) se tiene

$$\left| \mathcal{R}^P(\Pi_{\mathbb{H}} z - z^*) \right| \leq C \sum_{k \in \mathbb{T}_{\mathbb{H}}} \rho_k H_k^2 \|\psi\|_{\mathbf{H}^2(\mathcal{S}(k))}.$$

Nuevamente, al hacer uso de (B.10) se llega a la estima

$$\left| \mathcal{R}^P(\Pi_{\mathbb{H}} z - z^*) \right| \leq C(u, z) H_k^3. \quad (\text{B.17})$$

Finalmente, insertando las estimas (B.14) y (B.17) en (B.12), se obtiene el resultado deseado

$$J(e) = \mathcal{R}^P(z^* - z_{\mathbb{H}}) + \mathcal{O}(H^3).$$

■

Para la prueba del teorema anterior fue necesario pedir soluciones suaves del problema dual, lo cual excluye una parte significativa de aplicaciones de interés. Otra petición en la prueba es la de trabajar en mallas uniformes, lo cual entra en conflicto con el propósito final de adaptatividad de la malla. En la siguiente sección se lleva a cabo la experimentación numérica para los casos que pueden ser considerados como críticos (soluciones duales no suaves y casos donde el dominio, Ω , es no convexo). Los resultados obtenidos demuestran, sin embargo, que la estima de error y el proceso adaptativo de la malla funcionan con una precisión aceptable.

B.3. Experimentación numérica

En esta sección se presentan dos ejemplos que abordan las situaciones críticas donde puede fallar el recovery espacial, Φ_x . Para los dos ejemplos, se define una cantidad de interés tal que la solución del problema dual, z , presente una singularidad en $\mathbf{x} = 0$. En el primer ejemplo se toma un dominio convexo, mientras en el segundo se trabaja con un dominio no convexo. En ambos casos se trabaja en mallas no homogéneas que surgen de un proceso adaptativo. Este proceso adaptativo está basado en el criterio de remallado UED introducido en el capítulo 4 usando como generador automático de mallas, el paquete GEN4U descrito por Sarrate en [70]. Sin embargo, no se profundizará en el

análisis de este proceso adaptativo, pues el objetivo general de este apartado es ver el comportamiento del recovery en estos casos críticos. La representación del error esta dada por la ecuación (B.5) sin tomar en cuenta la representación óptima del error, $\mathcal{R}^P(z^* - v_H)$. Pues, como se dijo anteriormente, lo que se quiere es ver el comportamiento del recovery espacial y no la optimización de la representación del error.

Ejemplo 1.

$$\begin{aligned} -\Delta u(x, y) &= f(x, y) & \text{en } \Omega &= [-1, 1] \times [-1, 1] \\ u &= 0 & \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

donde f es tal que la solución u es

$$u(x, y) = e^{-10(x^2+y^2)} \cos\left(\frac{1}{2}\pi x\right) \cos\left(\frac{1}{2}\pi y\right).$$

La cantidad de interés se define por:

$$J(u) := u(0) = \int_{\Omega} \delta_0 u \, dx.$$

Entonces, el problema dual queda por

$$\begin{aligned} -\Delta z(x, y) &= \delta_0 & \text{en } \Omega \\ z &= 0 & \text{en } \partial\Omega. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Para el proceso de cálculo se toma una malla inicial homogénea de 400 elementos y, la malla de referencia es determinada por un factor de refinamiento de 2 ($h = H/2$). Las soluciones respectivas del problema primal y dual son dadas en la Figura B.1. Dos aproximaciones distintas en $\mathbf{V}_{h,\delta t}$ son dadas para la solución dual, z^{sua} y z^{res} . La primera es calculada usando un proceso de recovery como el dado en la sección 2.6.1 mientras la segunda es calcula usando un residual tal como fue dado en la sección 2.6.2. Los resultados numéricos se resumen en la Tabla B.1 y B.2. En estos resultados, Malla 1 denota la malla inicial (400 elementos) sobre la cual se aplica un proceso adaptativo, usando los errores locales estimados por $\mathcal{R}^P(z^{\text{sua}})$, para definir una nueva malla que se

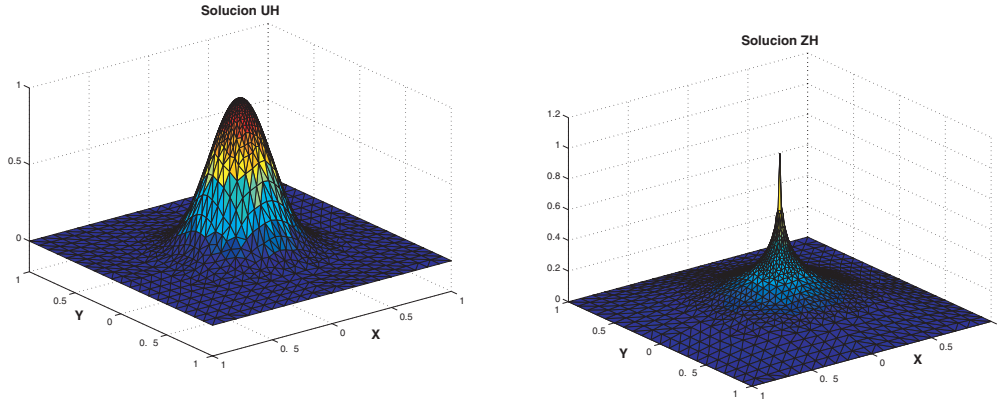


Figura B.1: Representación de la solución primal u_H (izquierda) y dual z_H (derecha).

	$J(\cdot)$ en Malla 1.	$J(\cdot)$ en Malla 2
u	1.00000×10^{-0}	1.00000×10^{-0}
u_h	1.00240×10^{-0}	0.99951×10^{-0}
u_H	1.00979×10^{-0}	0.99801×10^{-0}
e	-9.78793×10^{-3}	1.99244×10^{-3}
e^{ref}	-7.39084×10^{-3}	1.50033×10^{-3}

Tabla B.1: Valores de la cantidad de interés para las soluciones y errores.

Malla 1	$\mathcal{R}^P(\cdot) = \sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^P$	$\mathcal{R}^P(\cdot)/J(e)$	$\mathcal{R}^P(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$
z^{sua}	1.69731×10^{-2}	-1.73409	-2.29651
z^{res}	8.16954×10^{-3}	-0.83465	-1.10536
z_h	-7.39084×10^{-3}	0.75510	1.00000
Malla 2	$\mathcal{R}^P(\cdot) = \sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^P$	$\mathcal{R}^P(\cdot)/J(e)$	$\mathcal{R}^P(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$
z^{sua}	1.93060×10^{-3}	0.96896	1.28678
z^{res}	1.72851×10^{-3}	0.86754	1.15209
z_h	1.50033×10^{-3}	0.75301	1.00000

Tabla B.2: Valores numéricos para las mallas 1 y 2: aproximación del error, índice de efectividad exacto y de referencia.

denota como Malla 2. Gráficamente estas mallas están dadas en la Figura B.2.

La Figura B.3 representa los índices de efectividad local restados del valor 1, es decir $|1 - \text{Ieff}| \equiv |1 - \mathcal{R}^P(\cdot)/J(e^{\text{ref}})|$, junto a los histogramas para z^{sua}

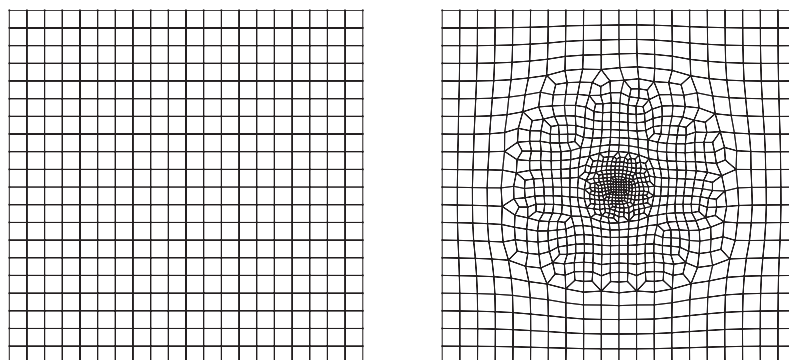


Figura B.2: Mallas de cálculo: Malla 1 (400 elementos y 441 nodos) (izquierda) y Malla 2 (948 elementos y 989 nodos) (derecha).

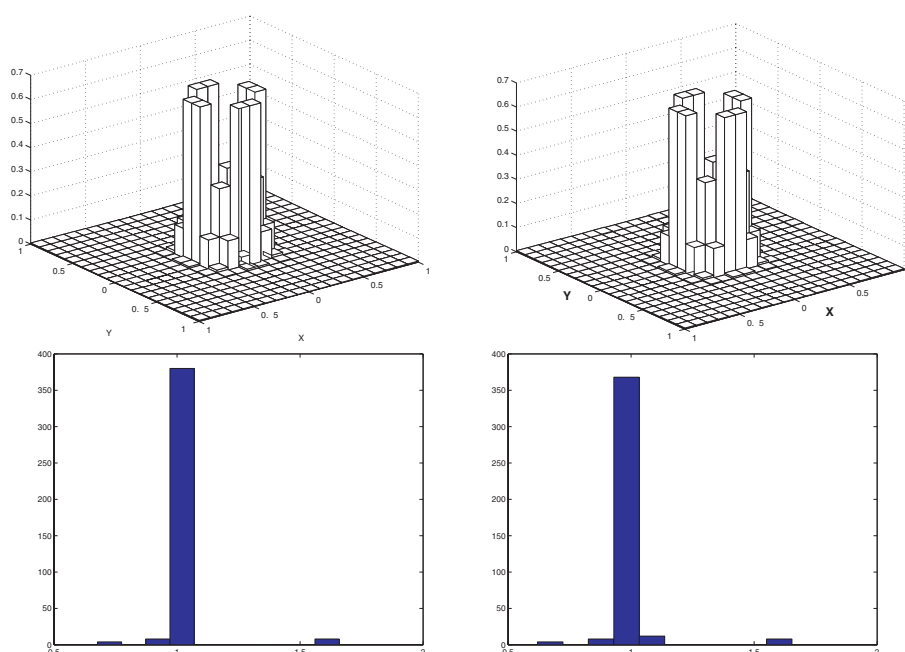


Figura B.3: Resultados para la primera malla (Malla 1). Arriba: Índice de efectividad ($1 - I_{eff}$) para z^{sua} , z^{res} . Abajo: Histograma del I_{eff} para z^{sua} , z^{res} .

y z^{res} en la malla 1. Restar 1 (uno) al índice de efectividad no busca otra cosa que una mejor visión en la gráfica de las contribuciones locales, pues de lo contrario los índice de efectividad local menores que uno pueden solaparse y perderse fácilmente de vista. De forma análoga la Figura B.4 nos da los resultados para la malla 2.

Los resultados obtenidos muestran que para la primera malla de cálculo

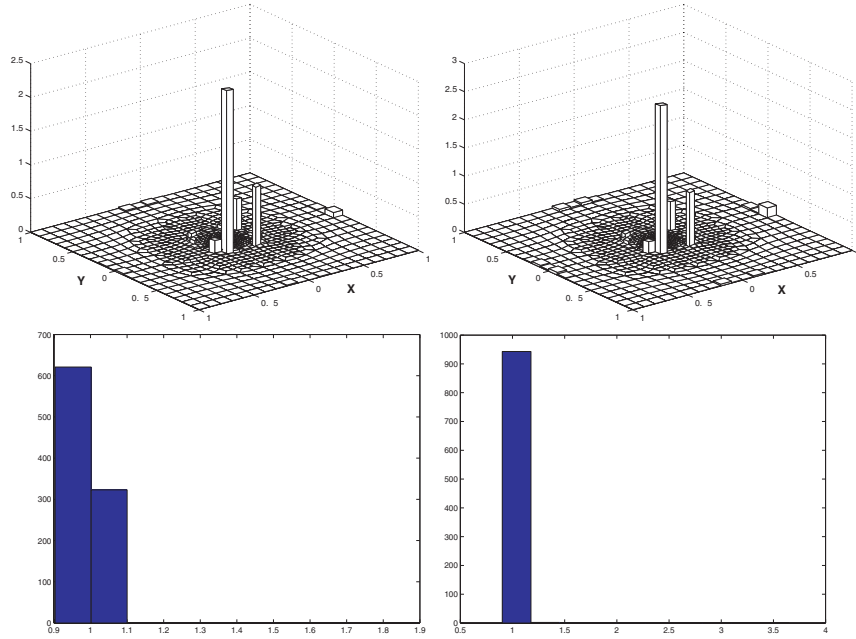


Figura B.4: Resultados para la primera malla (Malla 1). Arriba: Índice de efectividad (Ieff) para z^{sua} , z^{res} . Abajo: Histograma del Ieff para z^{sua} , z^{res} .

(Malla 1) el índice de efectividad global o en su defecto $J(u) \approx J(u_H) + \mathcal{R}^P(\cdot)$, tiene una mala aproximación para z^{sua} . Aunque los resultados mejoran significativamente para z^{res} , la mala aproximación se mantiene. Sin embargo, debido a que su mal comportamiento ocurre en un número pequeño de elementos, como muestran los histogramas del índice de efectividad, se tiene que al hacer adaptatividad resulta una malla (Malla 2) para la cual la nueva estima si tiene una buena representación (por arriba del 96 %) llegando a superar la estima del error dada al usar la solución de referencia z_h para representar z ($\mathcal{R}^P(z_h)$).

Ejemplo 2.

En este ejemplo se toman los mismos problemas primal y dual del ejemplo anterior, sólo que su dominio, Ω , esta dado por el contorno que define las mallas representadas en la Figura B.5. En dicha figura, la esquina hacia adentro tiene su pico final en el punto $(0.1, 0.1)$ y los bordes superiores en los puntos $(0.9, 1)$ y $(1, 0.9)$. Dada la característica del dominio no se conoce la solución exacta

del problema primal y por lo tanto sólo se dan resultados para una solución de referencia u_h .

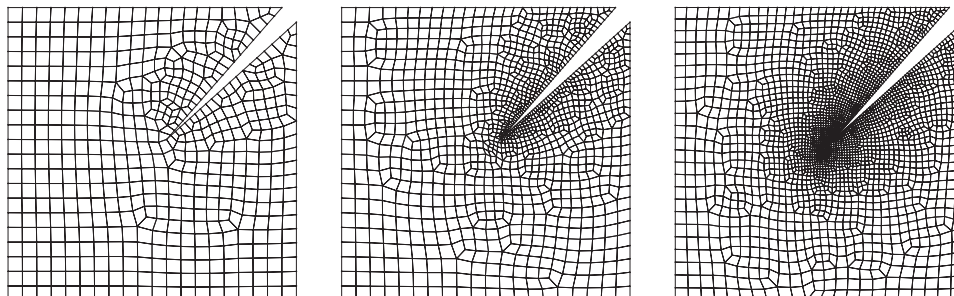


Figura B.5: Mallas de cálculo: Malla 1 (535 elementos y 598 nodos) (izquierda). Malla 2 (1243 elementos y 1349 nodos) (centro). Malla 3 (2714 elementos y 2846 nodos) (derecha).

Para el proceso de cálculo se toma como malla inicial la malla de la izquierda de la Figura B.5, formada por 535 elementos y 598 nodos. La malla de referencia en todos los cálculos esta determinada por un factor de refinamiento de 2 ($h = H/2$). Nuevamente, dos aproximaciones distintas en $\mathbf{V}_{h,\delta t}$ son dadas para la solución dual, z^{sua} y z^{res} . Los resultados numéricos se resumen en la tabla B.3 y B.4.

	$J(\cdot)$ en Malla 1.	$J(\cdot)$ en Malla 2	$J(\cdot)$ en Malla 3
u_h	0.66656	0.67383	0.67861
u_H	0.65585	0.66776	0.67583
e^{ref}	0.01072	0.00606	0.00278

Tabla B.3: Valores de la cantidad de interés para las soluciones y errores.

La Figura B.6 representa los índices de efectividad local restados del valor 1, es decir $|1 - \text{Ieff}| \equiv |1 - \mathcal{R}^p(\cdot)/J(e^{\text{ref}})|$, junto a los histogramas para z^{sua} y z^{res} en la malla 1. De forma análoga, la Figura B.7 nos da los resultados para la malla 2 y la Figura B.8 para la malla 3.

Los resultados obtenidos muestran, al igual que el ejemplo anterior, que la efectividad de la estima mejora a medida que la malla se refina. Además, los resultados para la estima, z^{res} , son mejores que los obtenidos para z^{sua} . Esto es debido a que en las mallas más groseras el problema local de la estima residual mejora la estima hecha por el recovery.

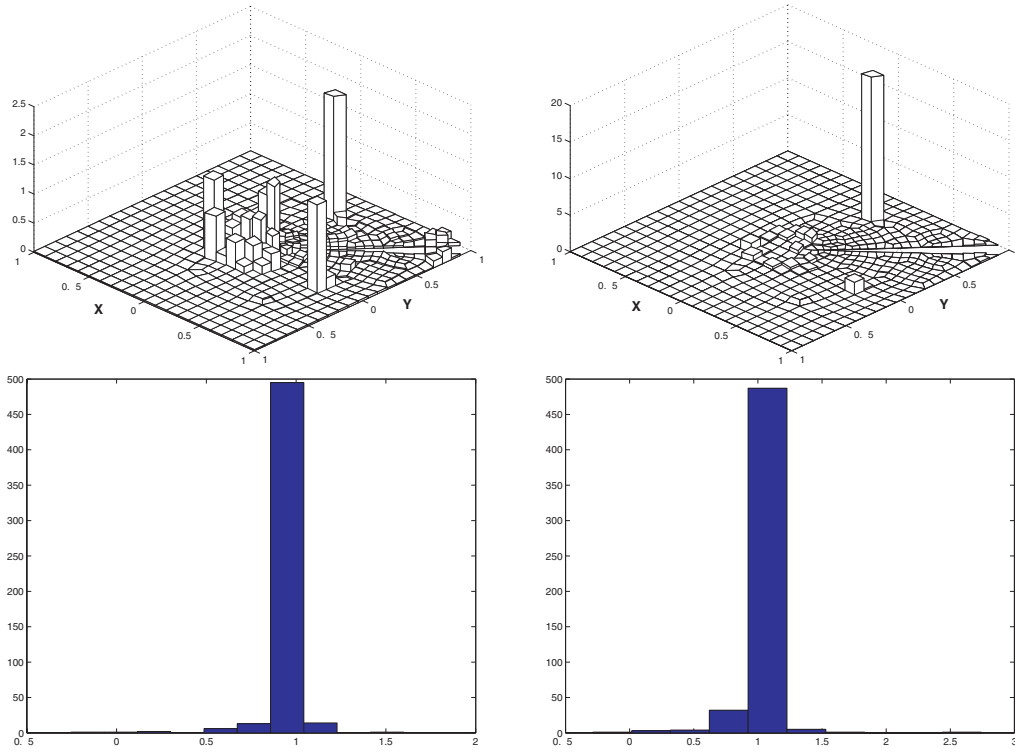


Figura B.6: Resultados para la primera malla (Malla 1). Arriba: Índice de efectividad $(1 - I_{\text{eff}})$ para z^{sua} , z^{res} . Abajo: Histograma del I_{eff} para z^{sua} , z^{res} .

Malla 1	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot) = \sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}}$	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$
z^{sua}	0.02415	2.25342
z^{res}	0.01838	1.71507
z_h	0.01072	1.00000
Malla 2	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot) = \sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}}$	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$
z^{sua}	0.00338	0.55658
z^{res}	0.00433	0.71437
z_h	0.00606	1.00000
Malla 3	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot) = \sum_{k,n} \mathcal{R}_{kn}^{\text{P}}$	$\mathcal{R}^{\text{P}}(\cdot)/J(e^{\text{ref}})$
z^{sua}	0.00244	0.87750
z^{res}	0.00244	0.87872
z_h	0.00278	1.00000

Tabla B.4: Valores numéricos para las tres mallas: aproximación del error e índice de efectividad de referencia.

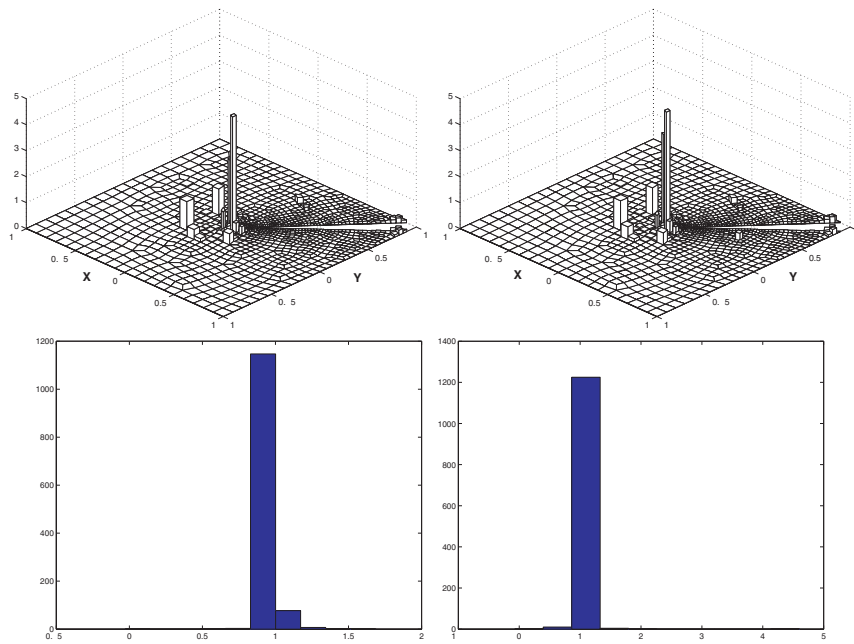


Figura B.7: Resultados para la primera malla (Malla 2). Arriba: Índice de efectividad (Ieff) para z^{sua} , z^{res} . Abajo: Histograma del Ieff para z^{sua} , z^{res} .

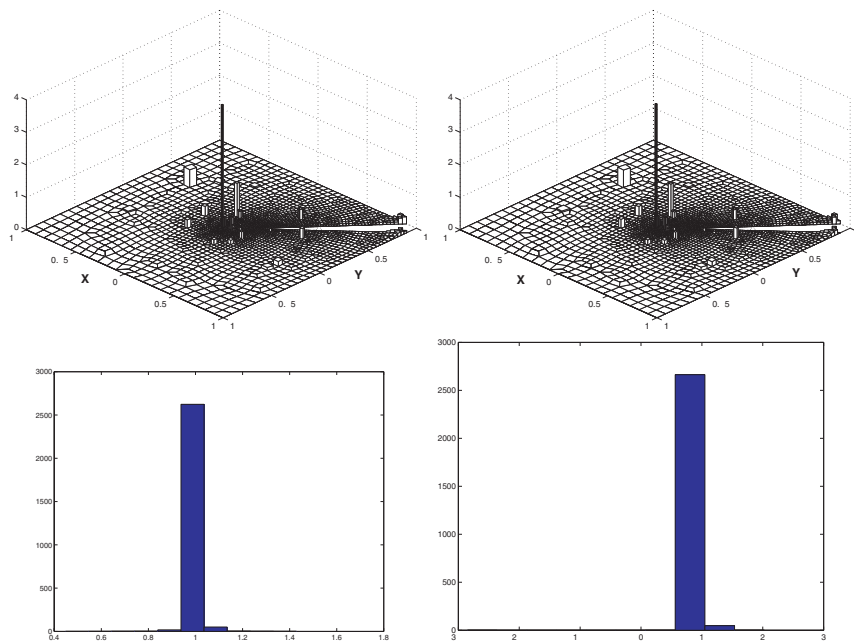


Figura B.8: Resultados para la primera malla (Malla 3). Arriba: Índice de efectividad (Ieff) para z^{sua} , z^{res} . Abajo: Histograma del Ieff para z^{sua} , z^{res} .

Referencias

- [1] S. Brenner and R.L. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer, Berlin Heidelberg, New York, 1994.
- [2] M. Bieterman and I. Babuška. The finite element method for parabolic equations I. a posteriori error estimation. *Numer. Math*, 40:339–371, 1982.
- [3] I. Babuška and A. Miller. The finite element method for parabolic equations II. a posteriori error estimation and adaptive approach. *Numer. Math*, 40:371–406, 1982.
- [4] I. Babuška and T. Janik. The hp -version of the finite element method for parabolic equations I. the p -version in time. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 5:363–399, 1989.
- [5] I. Babuška and T. Janik. The hp -version of the finite element method for parabolic equations II. the hp - version in time. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 6:343–369, 1990.
- [6] I. Babuška and S. Ohnimus. A posteriori error estimation for the semidiscrete finite element method of parabolic differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(35-36):4691–4712, 2001.
- [7] S. Adjerid, J.E. Flaherty, and I. Babuška. A posteriori error estimation for the finite element method-of-lines solution of parabolic problems. *Mathematical Models and Methods in the Applied Sciences*, 9(2):261–289, 1999.

-
- [8] T. Strouboulis, I. Babuška, and D.K. Datta. Guaranteed a posteriori error estimation for fully discrete solutions of parabolic problems. *ijnme*, 56:1243–1259, 2003.
- [9] J. Lawson, M. Berzins, and P.M. Dew. Balancing space and time errors in the method of lines for parabolic equations. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 12(3):573–594, 1991.
- [10] P.K. Moore and J.E. Flaherty. A local refinement finite-element method for one-dimensional parabolic systems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(6):1422–1444, 1990.
- [11] P.K. Moore. A posteriori error estimation with finite element semi- and fully discrete method for nonlinear parabolic equations in one space dimension. *SIAM J. Numer. Anal.*, 31(1):149–169, 1994.
- [12] J.E. Flaherty and P.K. Moore. Integrated space-time adaptive hp-refinement methods for parabolic systems. *Appl. Numer. Math.*, 16:317–341, 1995.
- [13] S. Adjerid, J.E. Flaherty, and Y.J. Wang. A posteriori error estimation with finite element method of lines for one-dimensional parabolic systems. *Numer. Math.*, 65:1–21, 1993.
- [14] M. Arroyo, P. Díez, and A. Huerta. Estima del error y adaptividad en problemas parabólicos. In J. Domínguez R. Abascal and G. Bugada, editors, *Métodos Numéricos en Ingeniería*, volume 1, España, 1999. SEMNI.
- [15] Dominik Schötzau and Christoph Schwab. Time discretization of parabolic problems by the *hp*-version of the discontinuous galerkin finite element method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38(3):837–875, 2000.
- [16] T. Werder, K. Gerder, Dominik Schötzau, and Christoph Schwab. *hp*-discontinuous galerkin time stepping for parabolic problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:6685–6708, 2001.

-
- [17] P. Jamet. Galerkin-type approximations which are discontinuous en time for parabolic equations in a variable domain. *SIAM J. Numer. Anal.*, 15:912–928, 1978.
- [18] V. Thomée. *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*. Lecture Notes in Mathematics 1054. Springer-Verlag, 1984.
- [19] K. Eriksson, C. Johnson, and V. Thomée. Time discretization of parabolic problems by the discontinuous galerkin method. *RAIRO Anal. Numer.*, 19:611–643, 1985.
- [20] K. Eriksson and C. Johnson. Adaptive finite element methods for parabolic problems, I: A linear model problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28:43–77, 1991.
- [21] K. Eriksson and C. Johnson. Adaptive finite element methods for parabolic problems, II: Optimal error estimates in $\ell_\infty\ell_2$ and $\ell_\infty\ell_\infty$. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32:706–740, 1995.
- [22] K. Eriksson and C. Johnson. Adaptive finite element methods for parabolic problems, IV: Nonlinear problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32:1729–1749, 1995.
- [23] K. Eriksson and C. Johnson. Adaptive finite element methods for parabolic problems, V: Long-time integration. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32:1750–1763, 1995.
- [24] Ch. G. Makridakis and I. Babuška. On the stability of the discontinuous galerkin method for the heat equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(1):389–401, 1997.
- [25] I. Babuška and A. Miller. The post-processing approach in the finite element method. part 1. calculation of displacements, stresses and other higher derivatives of displacements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:1085–1109, 1984.

- [26] I. Babuška and A. Miller. The post-processing approach in the finite element method. part 2. the calculation of stress intensity factors. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:1111–1129, 1984.
- [27] I. Babuška and A. Miller. The post-processing approach in the finite element method. part 3. a posteriori error estimates and adaptive mesh selection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:2311–2324, 1984.
- [28] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo, and C. Johnson. Introduction to adaptive methods for differential equations. *Acta Numerica*, pages 105–158, 1995.
- [29] R. Becker and R. Rannacher. *An optimal control approach to a posteriori error estimation in finite element methods*. INF 293/294, D-69120 Heidelberg. <http://gaia.iwr.uni-heidelberg.de>, Germany, 2001.
- [30] R. Becker and R. Rannacher. An feed-back approach to error control in finite element methods: Basis analysis and examples. *East-West J. Numer. Math.*, 4:237–264, 1996.
- [31] R. Becker and R. Rannacher. *Adaptive Galerkin Finite Elements Methods for Partial differential Equations*. INF 293/294, D-69120 Heidelberg., Germany, 2001.
- [32] W. Bangerth and R. Rannacher. *Adaptive Finite Element Methods for Differential Equations*. Lecture in Mathematics. Birkhäuser Verlag, 2003.
- [33] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24:337–357, 1987.
- [34] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery (SPR) and *a posteriori* error estimates. Part 1: The recovery technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1331–1364, 1992.

-
- [35] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery (SPR) and *a posteriori* error estimates. Part 2: Error estimates and adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1365–1382, 1992.
- [36] M Paraschivoiu, J. Peraire, and A.T. Patera. A posteriori finite element bounds for linear-functional outputs of elliptic partial differential equation. *Comput. Methods Appl. Mech Engrg.*, 150:289–312, 1997.
- [37] M Paraschivoiu and A.T. Patera. A hierarchical duality approach to bounds for the outputs of partial differential equation. *Comput. Methods Appl. Mech Engrg.*, 158:389–407, 1998.
- [38] J. Peraire and A.T. Patera. Bounds for linear-functional output of coercive partial differential equation: local indicators and adaptive refinement. *Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics*, Elsevier, pages 199–215, Amsterdam, 1998. P. Ladevéze and J.T. Oden eds.
- [39] Prudhomme S. and Oden J.T. On goal-oriented error estimation for elliptic problems: application to the control of pointwise errors. *Comput. Methods Appl. Mech Engrg.*, 176:313–331, 1999.
- [40] Oden J.T. and Prudhomme S. Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method. *Computers & Mathematics with Applications*, 41(5-6):735–756, 2001.
- [41] Pedro Díez, Núria Páres, and Antonio Huerta. Recovering lower bounds of the error by postprocessing implicit residual a posteriori error estimates. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56:1465–1488, 2003.
- [42] M. Ainsworth and J.T. Oden. *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. Pure and Applied Mathematics. John Wiley & Sons, New York, 2000.

- [43] M.G. Larson and A. J. Niklasson. A posteriori error estimation of functionals in elliptic problems: Experiments. Sweden, 2001. Preprint 2001-04, Chalmers Finite Element Center.
- [44] N.-E. Wiberg and F. Abdulwahab. Patch recovery based on superconvergent derivatives and equilibrium. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36:2703–2724, 1993.
- [45] N.-E. Wiberg, F. Abdulwahab, and S. Ziukas. Enhanced superconvergent patch recovery incorporating equilibrium and boundary conditions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37:3417–3440, 1994.
- [46] X.D. Li and N.-E. Wiberg. A *posteriori* error estimate by element patch postprocessing, adaptive analysis in energy and l_2 norms. *Computers and Structures*, 53(4):907–919, 1994.
- [47] N.-E. Wiberg. On understanding and teaching of the finite element method. *Commun. Numer. Methods Eng.*, 11(2):105–115, 1995.
- [48] N.-E. Wiberg, F. Abdulwahab, and S. Ziukas. Improved element stresses for node and element patches using superconvergent patch recovery. *Commun. Numer. Methods Eng.*, 11(7):619–627, 1995.
- [49] J. Aalto and M. Perälä. Built-in field equations for patch recovery procedures using weighted residuals. *Computers and Structures*, 73:91–118, 1999.
- [50] J. Aalto and M. Åman. Polynomial representations for patch recovery procedures. *Computers and Structures*, 73:119–146, 1999.
- [51] M. Krizek and P. Neittaanmaki. On superconvergence techniques. *Acta Appl. Math.*, 9:175–198, 1987.
- [52] N.-E. Wiberg and X.D. Li. Superconvergent patch recovery of finite element solutions and a *posteriori* l_2 norm error estimate. *Commun. Numer. Methods Engrg.*, 10:313–320, 1994.

- [53] N.-E. Wiberg and X.D. Li. Adaptive finite element procedures for linear and non-linear dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46:1781–1802, 1999.
- [54] P. Díez. *Un nuevo estimador de error para el método de los elementos finitos*. Tesis PhD. UPC, Barcelona, 1996.
- [55] P. Díez, J.J. Egozcue, and A. Huerta. A posteriori error estimation for standard finite element analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 163:141–157, 1998.
- [56] Machiels L. A posteriori finite element bounds for output functionals of discontinuous galerkin discretizations of parabolic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:3401–3411, 2001.
- [57] P. Morin, R.H. Nochetto, and K.G. Siebert. Local problems on stars: A posteriori error estimators, convergence, and performance. *Mathematics Computation*, 72(1):1067–1097, 2003.
- [58] Núria Páres, Pedro Díez, and Antonio Huerta. Subdomain-based flux-free a posteriori error estimators. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. In press., 2005.
- [59] L.Y. Li, P. Bettess, J.W. Bull, T. Bond, and I. Applegarth. Theoretical formulations for adaptive finite element computations. *Comm. Numer. Methods Engrg.*, 11:857–868, 1995.
- [60] L.Y. Li and P. Bettess. Notes on mesh optimal criteria in adaptive finite element computations. *Comm. Numer. Methods Engrg.*, 11:911–915, 1995.
- [61] E. Oñate and G. Bugada. A study of mesh optimality criteria in adaptive finite element analysis. *Engineering Computations*, 10:307–321, 1993.
- [62] P. Díez and A. Huerta. A unified approach to remeshing strategies for finite element h-adaptivity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 176:215–229, 1999.

- [63] J. Peraire. Computing bounds for functional output of exact solutions of partial differential equations. In *Adaptive Modeling and Simulation*, volume 1, pages 4–5. N.E. Wiberg and P. Díez, eds., October 2003.
- [64] N. Páres, J. Bonet, A. Huerta, and J. Peraire. Guaranteed bounds for linear output of interest in elasticity. In *Adaptive Modeling and Simulation*, volume 1, pages 78–79. N.E. Wiberg and P. Díez, eds., October 2003.
- [65] E. Mirambell and A. Aguado y P. Díez. Acciones térmicas en tableros de puentes de vigas de hormigón. *Hormigón y Acero*, 1, 1990.
- [66] P. Ladevèze, J.P. Pelle, and Ph. Rougeot. Error estimation and mesh optimization for classical finite elements. *Engineering Computations*, 8:69–80, 1991.
- [67] D. Henry. *Geometric Theory of Semilinear Parabolic Equation*. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, 1981.
- [68] I. Babuška and W.C. Rheinboldt. *A-posteriori* error estimates for the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 12:1597–1615, 1978.
- [69] N.-E. Wiberg, L.F. Zeng, and X.D. Li. Error estimation and adaptivity in elastodynamics. *Comput. Methods Appl. Mech Engrg.*, 101:369–395, 1992.
- [70] J. Sarrate. *Modelización numérica de la interacción fluido-sólido rígido: desarrollo de algoritmos, generación de mallas y adaptividad*. Tesis PhD. Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, 1996.
- [71] A. Carpinteri, S. Valente, G. Ferrara, and G. Melchiorri. Is mode ii fracture energy a real material property? *Comput. Struct.*, 48(3):397–413, 1993.
- [72] H. Blum, Q. Lin, and R. Rannacher. Asymptotic error expansion and richardson extrapolation for linear finite elements. *Numerische Mathematik*, 49:11–37, 1986.