

## ADAPTIVIDAD EN EL MÉTODO SIN MALLA DE PUNTOS FINITOS

Franco Perazzo<sup>a</sup>, Rainald Löhner<sup>b</sup> y Nicolás Ipinza<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup>*Departamento de Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680, Valparaíso, Chile, franco.perazzo@usm.cl, <http://www.mec.utfsm.cl>*

<sup>b</sup>*School of Computational Science and Informatics, George Mason University, M.S. 4C7, VA 22030-4444, Fairfax, USA, rlohner@gmu.edu, <http://www.gmu.edu>*

<sup>c</sup>*Aula CIMNE-DMEC, Departamento de Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile, nicolas.ipinza@usm.cl*

**Palabras Clave:** métodos sin malla, métodos de colocación, método de puntos finitos, adaptividad, estimación del error

**Resumen.** En este trabajo se presentan un estimador del error a posteriori y un proceso de refinamiento adaptivo para el método sin malla de puntos finitos (MPF). El indicador del error se formula a partir de la evaluación del funcional de mínimos cuadrados, utilizado en el cálculo de la función de forma. Nuevos grados de libertad o nodos adicionales pueden ser incorporados sin dificultad en las regiones donde el estimador del error presenta un valor elevado, mediante las técnicas de refinamiento  $h$  y  $p$ . La validez del estimador del error propuesto se demuestra, mediante el desarrollo de problemas de la mecánica de sólidos y fluidos tanto 2D como 3D, utilizando un proceso de refinamiento adaptivo de la solución.

## 1. INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas, el desarrollo de los métodos numéricos sin malla ha ido en aumento, tanto en la investigación teórica, como en la implementación computacional de los métodos en sí. Dentro de estos, el Método de Puntos Finitos (FPM) se ha desarrollado como técnica numérica de cálculo, gracias al trabajo a lo largo de los últimos años de parte de diversos autores, como Oñate et.al (1996), Oñate and Idelsohn (1998), Oñate et.al. (2000), Oñate et.al. (2001), Löhner et.al. (2002) y Boroomand et.al. (2005).

Dentro del análisis numérico libre de malla, es posible determinar el error cometido en la aproximación en el contexto del FPM. Este error se puede calcular o estimar a través de variadas técnicas. Diversos grupos de investigación se han dedicado a desarrollar rutinas de estimación del error en métodos sin malla. Por un lado están los “métodos de partículas”, donde Rabczuk and Belytschko (2004) han desarrollado un estimador del error basado en la evaluación de las derivadas de orden superior, con el posterior resultado de un refinamiento adaptativo. Por otro lado, Kim and Atluri (2000) han desarrollado técnicas de estimación del error en la aproximación libre de malla de Petrov – Galerkin (MLPG); estas técnicas posteriormente incorporan “nodos secundarios” a la discretización original, sin variar los subdominios de interpolación ya utilizados. Esto permite, un adecuado control del error, y además se pueden tratar zonas no-convexas de la geometría de análisis. Finalmente, se puede observar también el trabajo de Park et.al. (2003), el cual utiliza una aproximación de mínimos cuadrados; donde, para adicionar puntos en zonas de interés, se usan celdas de Voronoi en posiciones apropiadas. Como se puede observar en estos trabajos, el error calculado o estimado es utilizado para re-distribuir la discretización o para insertar más puntos en zonas específicas, basándose en algún criterio en particular. Teniendo en cuenta la consistencia del FPM, tanto para discretizaciones regulares como irregulares, es posible agregar nuevos puntos en zonas de interés, independientes de los ya existentes, o redistribuirlos manteniendo así el número de grados de libertad.

En el presente trabajo, se analiza un estimador *a posteriori* del error en el contexto del FPM. En el ámbito de las modelaciones de elasticidad en sólidos, se utiliza como estimador el funcional de mínimos cuadrados, el cual es minimizado en la formulación del FPM. Este método utiliza las diferencias entre las contribuciones nodales y los valores calculados después de la aproximación por mínimos cuadrados ponderados.

De esta manera, posterior a la estimación del error en la aproximación, se formula un refinamiento adaptivo de la discretización, el cual está basado en los resultados obtenidos en el proceso de cálculo del error; es decir, considera aspectos como: distribución óptima de los puntos que discretizan la geometría, lugar donde se deben insertar nuevos puntos y forma en que deben ser insertados estos nuevos puntos. El desarrollo planteado considera una técnica de refinamiento geométrico basado en el refinamiento  $h$  y  $p$ , ampliamente utilizado en el método de elementos finitos, pero en el contexto del FPM.

Finalmente, para corroborar el correcto análisis y desarrollo de las técnicas de estimación del error propuestas, se implementan ejemplos numéricos en el ámbito de la mecánica de sólidos.

## 2. APROXIMACIÓN POR MÍNIMOS CUADRADOS PONDERADOS

En virtud de poder definir la notación que será utilizada en el presente trabajo, se especificarán los aspectos generales de la aproximación por mínimos cuadrados ponderados de Puntos Finitos.

Sea  $\Omega_I$  el sub-dominio de interpolación o nube de una función  $u(\mathbf{x})$ , y  $s_j$  con  $j = 1, 2, \dots, n$  una colección de  $n$  puntos con coordenadas  $\mathbf{x}_j \in \Omega_I$ . El subíndice  $I$  en las expresiones identifica aquel punto de la nube donde se requiere evaluar la aproximación, también denominado **nodo estrella**. La función incógnita  $u(\mathbf{x})$  puede ser aproximada en el interior de  $\Omega_I$  por:

$$u(\mathbf{x}) \cong \hat{u}(\mathbf{x}) = \sum_{l=1}^m p_l(\mathbf{x}) \alpha_l = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\alpha} \quad \forall \mathbf{x}_I \in \Omega, \forall \mathbf{x} \in \Omega_I \quad (1)$$

donde  $\boldsymbol{\alpha}^T = [ \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m ]$  y el vector  $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ , llamado “base de interpolación”, contiene típicamente monomios que aseguran en el espacio de coordenadas una base completa. Para problemas 3D, se pueden utilizar:

$$\mathbf{p}_1 = [1, x, y, z]^T \quad (2a)$$

$$\mathbf{p}_2 = [1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2, yz, z^2]^T \quad (2b)$$

$$\mathbf{p}_{2.5} = [1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2, yz, z^2, x^2y, x^2z, xy^2, xyz, xz^2, y^2z, yz^2]^T \quad (2c)$$

$$\mathbf{p}_3 = [1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2, yz, z^2, x^3, x^2y, x^2z, xy^2, xyz, xz^2, y^3, y^2z, yz^2, z^3]^T \quad (2d)$$

Es importante notar la dependencia del proceso de aproximación, en cuanto a la base de interpolación utilizada. Para evitar cualquier mal condicionamiento en el cálculo de las funciones de forma, es que conviene expresar la base polinómica de interpolación en forma local (centrada en el nodo estrella  $I$ ) y mediante coordenadas adimensionales, de esta forma la base se independiza de la geometría del dominio. Con esta mejora por ejemplo, una base cuadrática de interpolación para un caso 3D se expresaría como:

$$\mathbf{p}_2 = \left[ 1 \quad Dx \quad Dy \quad Dz \quad Dx^2 \quad Dx Dy \quad Dx Dz \quad Dy^2 \quad Dy Dz \quad Dz^2 \right]$$

con

$$Dx = \frac{x_I - x}{dx_{max}}; \quad Dy = \frac{y_I - y}{dy_{max}}; \quad Dz = \frac{z_I - z}{dz_{max}}.$$

Las distancias características  $dx_{max}$ ,  $dy_{max}$  y  $dz_{max}$ ; son las distancias máximas de cada nube, entre el nodo estrella y los puntos que pertenecen a ella, en las direcciones  $x$ ,  $y$ ,  $z$  respectivamente.

La función incógnita  $u(\mathbf{x})$  puede ser evaluada en los  $n$  puntos de la nube  $\Omega_I$ , obteniendo:

$$\mathbf{u}^h = \begin{Bmatrix} u_1^h \\ u_2^h \\ \vdots \\ u_n^h \end{Bmatrix} \cong \begin{Bmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \\ \vdots \\ \hat{u}_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{p}_1^T \\ \mathbf{p}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{p}_n^T \end{Bmatrix} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{C} \boldsymbol{\alpha} \quad (3)$$

donde  $u_j^h = u(\mathbf{x}_j)$  son las incógnitas, pero los valores buscados  $\hat{u}_j = \hat{u}(\mathbf{x}_j)$  son los valores aproximados, y  $\mathbf{p}_j = \mathbf{p}(\mathbf{x}_j)$ .

Utilizando la notación anterior, la aproximación por mínimos cuadrados ponderados (WLSQ) se obtiene minimizando el funcional:

$$\mathbf{J}_I = \sum_{j=1}^n w(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}_j) (u_j^h - \hat{u}(\mathbf{x}_j))^2 = \sum_{j=1}^n w(x_I - x_j) (u_j^h - \mathbf{p}_j^T \cdot \boldsymbol{\alpha})^2 \quad (4)$$

La función de ponderación  $w(x_I - x_j)$  evaluada en el nodo estrella, toma el valor unitario, mientras que va decreciendo conforme sea evaluada en puntos más alejados. Fuera del subdominio de influencia, la función  $w$  es nula. En este trabajo en particular, se escoge la función de Gauss para ponderar el error cometido en la aproximación WLSQ. En la Figura 1, se muestra la aproximación WLSQ con una función de ponderación  $w$  fija.

Al minimizar el funcional  $J_I$  respecto a  $\alpha$ , se obtiene

$$\alpha = A_I^{-1} B_I u^h \quad (5)$$

siendo

$$A_I = P^T(x_I) W_I P(x_I) \wedge B_I = P^T(x_I) W_I \quad (6)$$

con  $P$  y  $W$ , expresados en forma matricial.

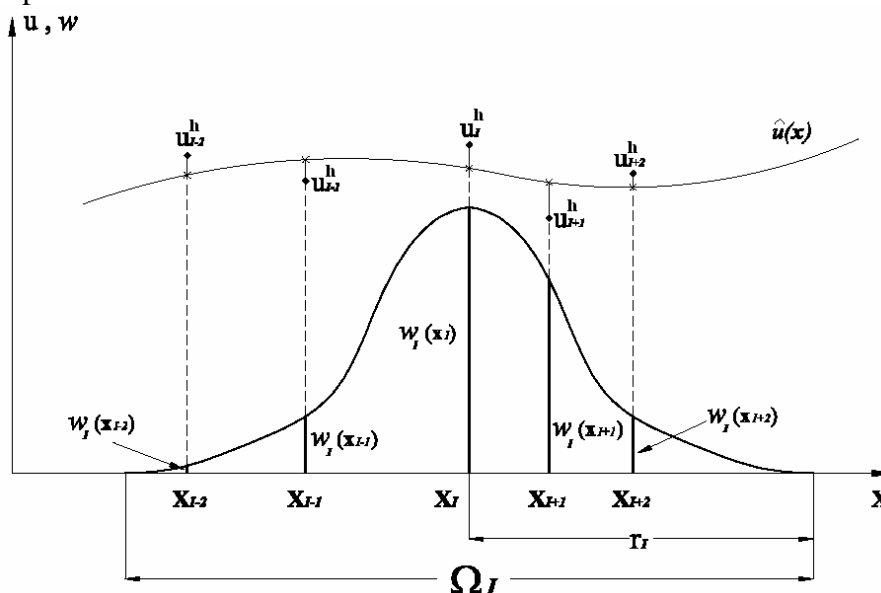


Figura 1. Aproximación por mínimos cuadrados ponderados fijos.

La aproximación final en el FPM, se obtiene reemplazando (5) en (1), con lo que se tiene

$$u(x) \cong \hat{u}(x) = p^T(x) A_I^{-1} B_I u^h \quad (7)$$

La aproximación por mínimos cuadrados propuesta en este trabajo, utiliza una función de ponderación  $w$  fija, la cual es la función Normal o de Gauss. Mayores antecedentes respecto a esta, y otras funciones de ponderación utilizadas en métodos sin malla, consultar en Perazzo et.al (2003).

Es importante comentar que la correcta elección de los sub-dominios de interpolación o nubes para el ajuste de la función objetivo, es de relevancia en el método de Puntos Finitos, al utilizar esta la técnica de Colocación Puntual en la discretización de las ecuaciones. Por un lado, este proceso se puede llevar a cabo mediante la función de ponderación, al tener esta un radio de influencia dentro del dominio completo. Es decir, los nodos que estén dentro de este radio de acción (sub-dominio) conformarán la nube respectiva. Por otro lado, se pueden generar las nubes para cada nodo mediante técnicas solamente geométricas, para luego aplicar

la ponderación al sub-dominio ya determinado. Esta técnica ha tenido mayores aplicaciones y presentado ventajas respecto a la primera opción, por lo que en este trabajo de investigación, se utiliza una técnica geométrica basada en una **triangulación local** de Delaunay, por lo que no es necesario triangular toda la geometría. Para más detalles de la técnica de generación de nubes, se pueden ver el trabajo de Löhner et al. (2002).

### 3. PROCESO DE REFINAMIENTO ADAPTIVO

Los procedimientos de refinamiento adaptivo automático han mostrado grandes beneficios en todas las áreas de la mecánica computacional. Estos permiten alcanzar mayores grados de exactitud en la aproximación, al aumentar el número de grados de libertad. Todo proceso de refinamiento adaptivo, requiere de tres etapas:

- Un criterio de malla óptima
- Un indicador del error, y
- Un algoritmo o estrategia para refinar y estructurar la malla.

Estas etapas responden las preguntas

- Cómo puedo definir una malla óptima?
- Dónde se requiere refinar? Y
- Cómo llevar a cabo el refinamiento?

El tema de la adaptividad tiene al menos tres décadas de desarrollo, por lo que no sorprende la variedad de respuestas propuestas por los autores para cada una de estas preguntas. En lo que sigue, se considerará un refinamiento  $h$  y  $p$  en el contexto del MPF, ver Moore (2006).

#### 3.1 Estimadores del Error

Un gran número de estimadores del error han sido propuestos en la literatura ver Löhner (2001). El método de Puntos Finitos, en base a su tipo de aproximación, ofrece diversas posibilidades. La más obvia de ellas es considerar la diferencia entre el valor nodal  $u_I^h$  y el valor obtenido después de la aproximación por mínimos cuadrados ponderados. Se tiene entonces:

$$\hat{e}_I = \left| \hat{u}_I - u_I^h \right| \quad (8)$$

Es intuitivamente claro que en las regiones donde el estimador del error tiene asociado un valor alto, se requiere incrementar los grados de libertad. El estimador propuesto también se puede ilustrar en su forma adimensional como sigue:

$$\hat{e}_I = \frac{\left| \hat{u}_I - u_I^h \right|}{\max_{j \in \mathcal{N}_I} \left( \left| u_I^h \right|, \left| u_j^h \right| \right)} \quad (9)$$

Por otro lado, se puede definir también como indicador del error al funcional de mínimos cuadrados ponderados. Recordando (4), se tiene que este funcional llamado  $J$ , tiene la siguiente relación:

$$J_I = \sum_{j=1}^n w(\mathbf{x}_I - \mathbf{x}_j) (u_j^h - \hat{u}(\mathbf{x}_j))^2 = \sum_{j=1}^n w(x_I - x_j) (u_j^h - p_j^T \cdot \alpha)^2 \quad (10)$$

el cual por definición, evalúa el error cometido en la aproximación. Este funcional  $J$ , calcula ponderadamente la desviación cuadrática que existe entre la aproximación y el valor incógnito, llamado *contribución nodal*. Entonces el indicador del error “a posteriori” basado en la equidistribución global del funcional para cada nodo que discretiza la geometría de análisis, ver Oñate et.al. (2006), es el siguiente:

$$\xi_I = \frac{N \cdot J_I}{\sum_{I=1}^N J_I} \quad \forall I = 1..N \quad (11)$$

donde  $N$  es el número total de puntos que discretiza el dominio  $\Omega$ .

### 3.2 Introducción de nuevos puntos

Una vez el estimador del error haya sido evaluado, nuevos grados de libertad pueden ser introducidos. En principio, el MPF permite la libertad de introducir nuevos puntos de una forma completamente arbitraria. Para de alguna manera proponer una introducción más ordenada de los nuevos puntos, se colocarán estos en los puntos medios de los límites entre cada par de nodos. Esta técnica tiene la ventaja de que si existe una distribución regular cartesiana de puntos, esta estructura se mantendrá después de la introducción de los nuevos grados de libertad. Los pasos requeridos del algoritmo, se pueden resumir como sigue:

- Evaluar la estimación del error deseada;
- Obtener los límites a refinar;
- Introducir los nuevos puntos;
- Actualizar las condiciones de contorno del problema.

En lo que sigue, se describirá en detalle las técnicas y parámetros usados en cada uno de estos pasos.

#### 3.2.1 Límites a refinar

Se necesitan obtener los límites a refinar, los cuales serán utilizados para la introducción de nuevos puntos a la discretización. Los pasos necesarios para este fin son los siguientes, los cuales están ilustrados en la Figura 2, en una analogía 2D:

##### *Retención de la primera capa de vecinos:*

Identificado el punto asociado al mayor error relativo, se procede a identificar su respectiva nube local. Luego se realiza una triangulación de Delaunay con la nube local (Figura 2a y 2b). Finalmente, y para evitar problemas de futuros nodos muy cercanos entre sí, se retiene sólo el primer “layer” de la triangulación, como se muestra en la Figura 2c.

##### *Desechar los límites pequeños:*

En casos con singularidades o discontinuidades físicas, hay que tener precaución con los límites retenidos en el paso anterior. Se pueden presentar límites muy pequeños, lo que produciría nuevamente una extrema cercanía entre los nodos existentes y los futuros a introducir. Por lo tanto, si un límite existente es más pequeño que una cierta tolerancia

definida, este no será refinado.

*Introducción de nuevos puntos:*

Los nuevos puntos son introducidos en los puntos medios de todos los límites retenidos, como se muestra en la Figura 2d.

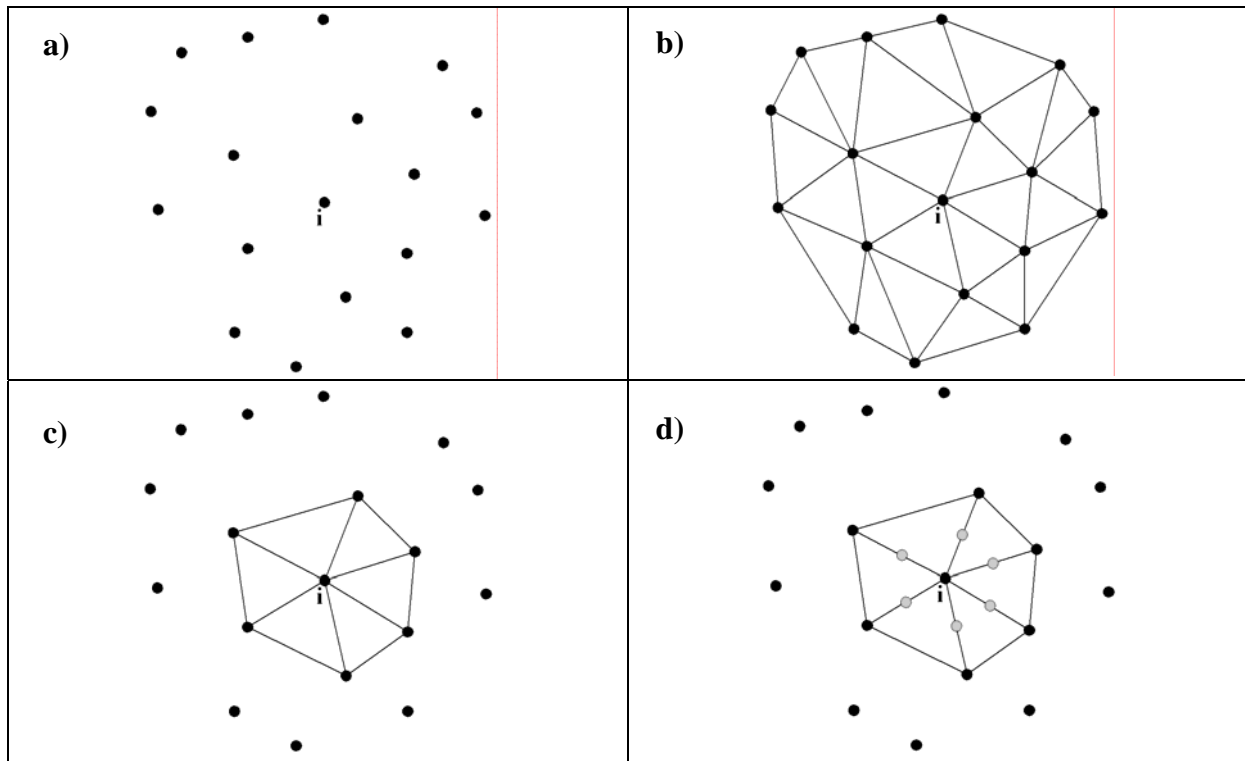


Figura 2. Proceso de generación de nuevos puntos alrededor del nodo estrella  $i$ .

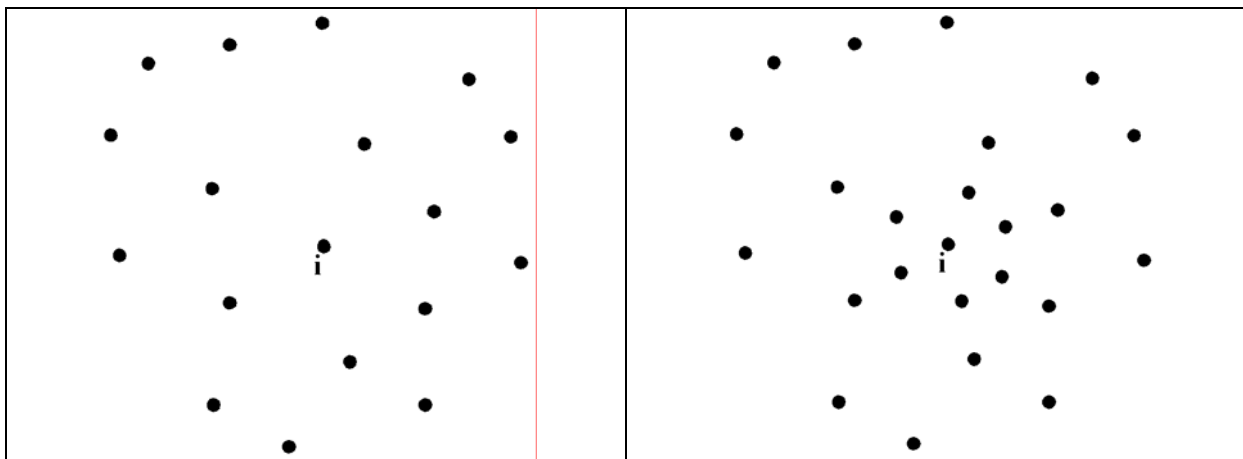


Figura 3. Refinamiento alrededor del nodo estrella  $i$ .

En la Figura 3 se puede observar el refinamiento alrededor del nodo estrella  $i$ , en el cual se aumentan los grados de libertad del problema para un posterior proceso de cálculo. La técnica de refinamiento utilizada, permite implementar un proceso adaptivo de solución al ir evaluando el error con cada discretización geométrica, hasta obtener el error permitido en la

aproximación numérica.

### 3.2.2 Actualización de las condiciones de contorno.

Teniendo conocimiento previo de las condiciones de contorno aplicadas, se actualizan sobre los posibles nuevos puntos que correspondan a las superficies prescritas. Además se requiere una actualización de la discretización, para después generar los respectivos sub-dominios de interpolación.

En la Figura 4 se ilustra el proceso adaptivo para el MPF, comprendiendo las etapas de estimación del error, refinamiento y actualización de las condiciones de contorno.

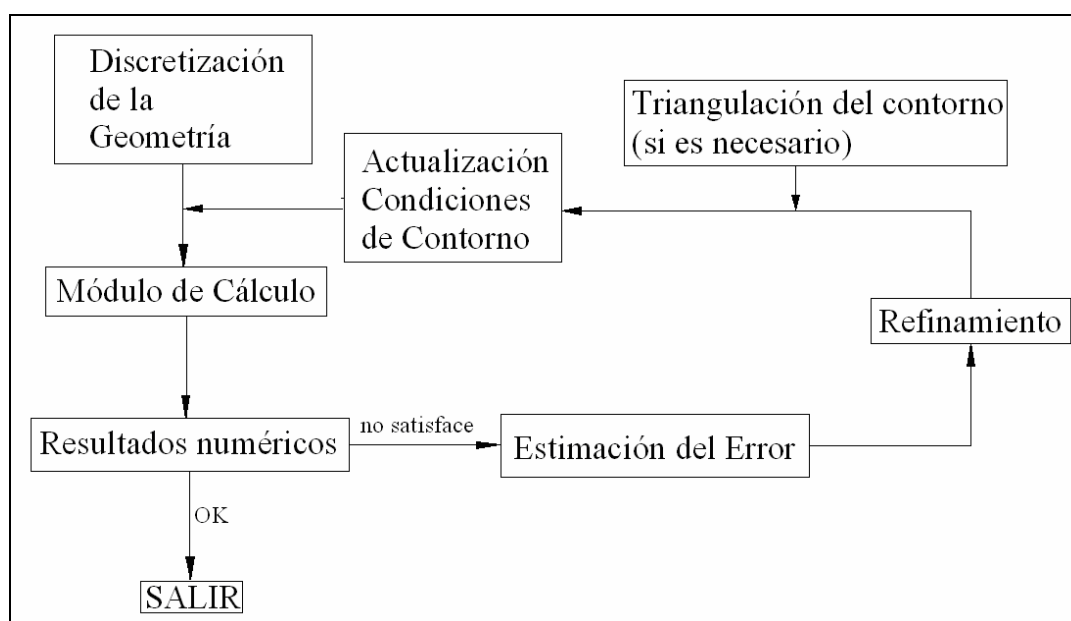


Figura 4. Diagrama de bloques de proceso adaptivo.

## 4. EJEMPLOS

La validación y estudio de la capacidad de los estimadores del error propuestos, se analizan mediante el desarrollo de ejemplos elásticos. En estos, las técnicas de estimación del error y posteriormente de refinamiento, se implementan en la programación del MPF, para de esta manera definir un proceso adaptivo de solución.

### 4.1 Disco bajo compresión diametral

El siguiente problema plano consiste en someter un disco a una carga puntual colineal,  $P=1.0$ , a lo largo de su diámetro  $D=0.5$ , como lo muestra la Figura 5. La geometría de este problema es de especial interés y es usada en ensayos normados (ASTM D-4123 1987) para materiales bituminosos y frágiles, normalmente conocido como “test brasileño” o de tensión indirecta.



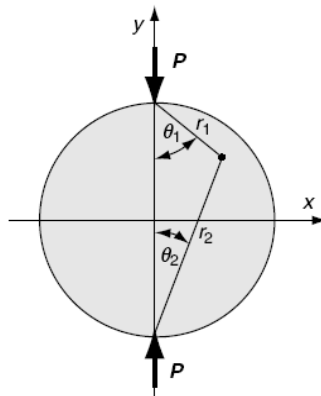


Figura 5. Disco bajo compresión diametral

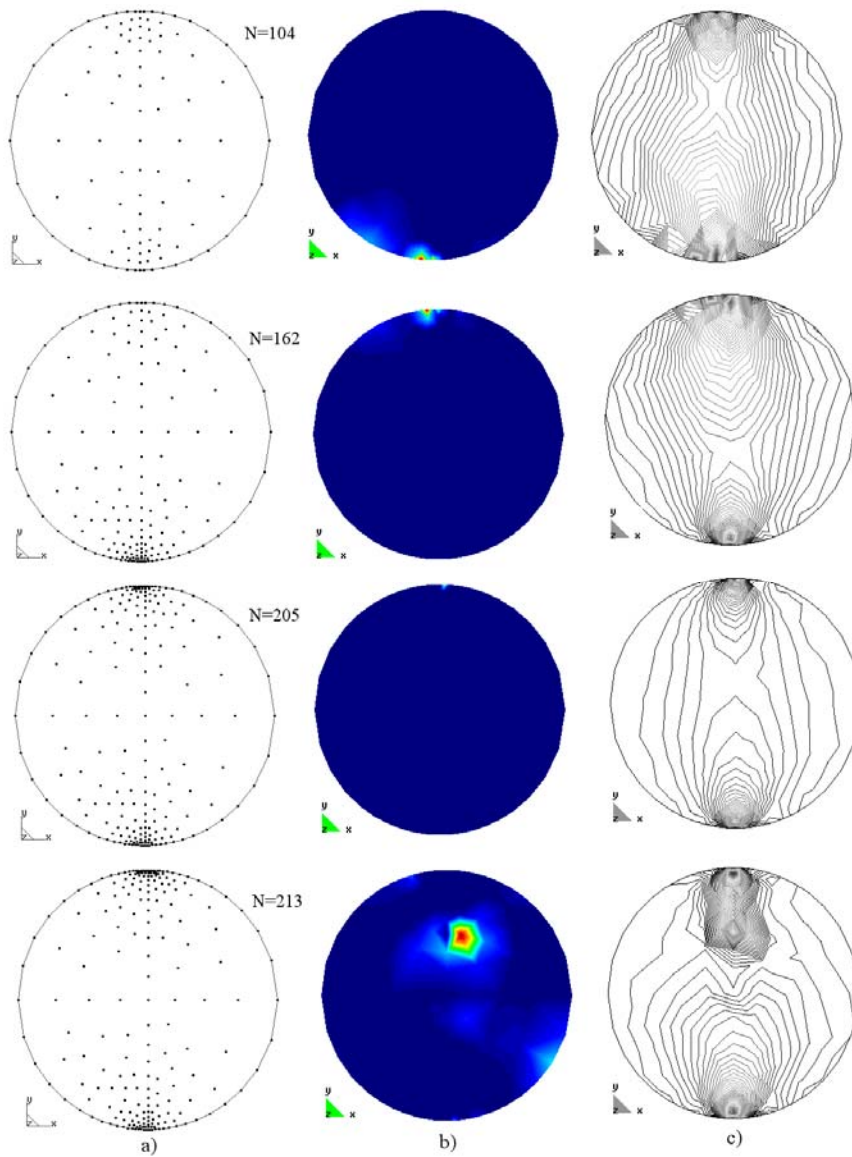


Figura 6. Disco bajo compresión diametral, a) discretización, b) indicador del error y c) isolíneas de esfuerzo cortante máximo para  $N=104, 162, 205$  y  $213$  puntos

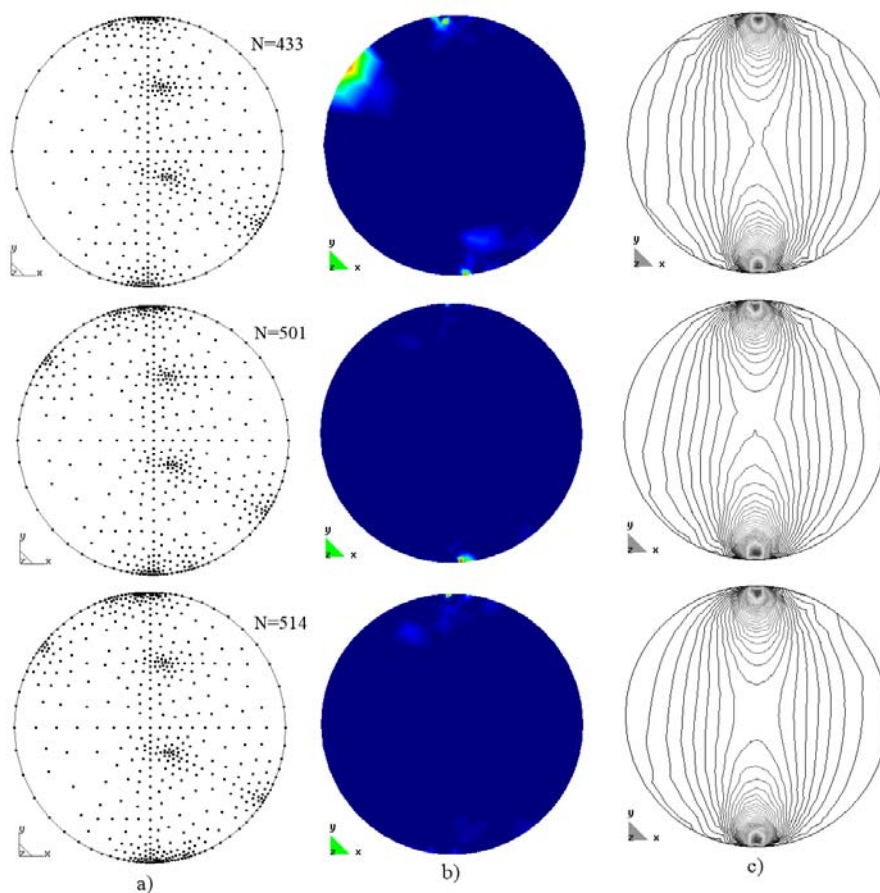


Figura 7. Disco bajo compresión diametral, a) discretización, b) indicador del error y c) isólineas de esfuerzo cortante máximo para  $N=433$ , 501 y 514 puntos

Luego, considerando una condición de tensión plana, un material con  $E=1.0$  y  $\nu=0.25$ , se discretiza el disco inicialmente con  $N=104$  puntos, adaptando posteriormente la ubicación de nuevos puntos a los valores del error obtenidos, lo que se muestra en las Figuras 6 y 7, tendiendo a la distribución esperada, Figura 8, para el esfuerzo cortante máximo.

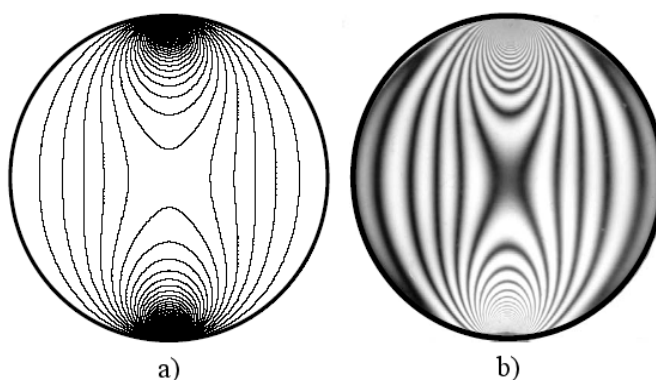


Figura 8. Contornos de esfuerzo cortante máximo para disco bajo compresión diametral, a) teórico y b) de análisis fotoelástico.

Además, en la Figura 9 se observan los resultados para  $N=5.851$  del esfuerzo cortante máximo calculado numéricamente.

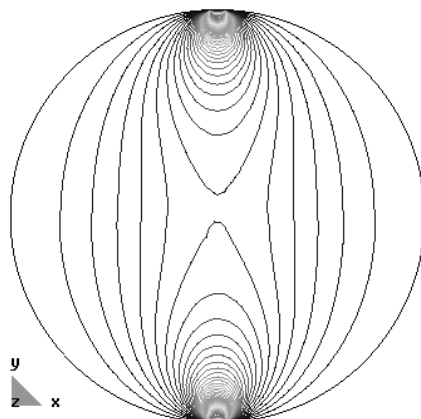


Figura 9. Contornos de esfuerzo cortante máximo numérico para disco bajo compresión diametral con  $N=5.851$

## 5. CONCLUSIONES

Se han propuesto metodologías de estimación del error cometido en la aproximación, y de generación de puntos para aumentar el grado de libertad del problema alrededor del punto con el mayor error relativo. Estas técnicas han sido evaluadas con ejemplos numéricos 2D para comprobar una buena tendencia en lo que análisis adaptivo de solución se refiere. Luego de comprobada esta, se procederá a extender las virtudes a un análisis tridimensional con piezas sólidas más reales.

En cuanto al estimador del error, se han propuesto 2 métodos basados ambos en la diferencia entre el valor obtenido en la aproximación y la contribución nodal  $u^h$  correspondiente. Se comprueba que efectivamente estos estimadores entregan indicios de error de interpolación numérica, con lo que al entregar la información de dónde se comete el mayor relativo, sólo corresponde incluir nuevos puntos alrededor de esta zona geométrica.

Por otro lado, se desarrolló un algoritmo generador de puntos. Una vez ubicado(s) el punto con mayor error relativo, esta rutina genera nuevos puntos a incluir alrededor de este, para de esta manera aumentar los grados de libertad del problema. Este generador basado en la triangulación de Delaunay y en refinamiento  $h$  y  $p$ , el cual está incluido en el programa de cálculo del MPF, está un actual desarrollo y se esperan nuevos resultados, extrapolando el desarrollo a geometrías 3D.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el soporte entregado para la realización del presente trabajo a la Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica del gobierno de Chile, mediante el Proyecto **FONDECYT 1040371**; y a la Dirección General de investigación y Postgrado DGIP de la Universidad Técnica Federico Santa María, mediante el proyecto interno **USM 250521**.

Los autores también agradecen al Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería CIMNE, por el uso del *pre/post procesador GiD* en la discretización de las geometrías utilizadas.

## BIBLIOGRAFÍA

- Oñate E, Idelsohn S, Zienkiewicz OC, Taylor RL. A Finite Point Method in Computational Mechanics. Applications to Convective Transport and Fluid Flow. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 1996.
- Oñate E, Idelsohn S. A Mesh-Free Finite Point Method for Advective-Diffusive Transport and Fluid Flow Problems. *Computational Mechanics* 1998; 21: 283-292.
- Oñate E, Sacco C, Idelsohn S. A Finite Point Method for Incompressible Flow Problems. *Comput. Visual. Sci.* 2000; 3: 67-75.
- Oñate E, Perazzo F, Miquel J. A finite point method for elasticity problems. *Computers & Structures* 2001; 79: 2151-2163.
- Löhner R, Sacco C, Oñate E, Idelsohn S. A Finite Point Method for Compressible Flow. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2002; 53: 1765-1779.
- Boroomand B, Tabatabaei AA, Oñate E. Simple modifications for stabilization of the finite point method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2005; 63: 351-379.
- Rabczuk T, Belytschko T. Adaptivity for structured meshfree particle methods in 2D and 3D. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2004; 63: 1559-1582.
- Löhner R. Applied CFD Techniques. *J. Wiley & Sons* 2001.
- Oñate E., Arteaga J., García J. y Flores R., Error estimation and mesh adaptivity in incompressible viscous flows using a residual power approach, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(4-6), 339-362. 2006
- Moore P. Effects of basis selection and h-refinement on error estimator reliability and solution efficiency for high-order methods in three space dimensions, *Internacional Journal of Numerical Analysis and Modeling*. Vol. 3, 21-51. 2006.