

ESTIMACIÓN DE ERROR A POSTERIORI PARA PROBLEMAS ELÍPTICOS CON SINGULARIDADES EN EL BORDE

Marta B. Bergallo*, Carlos E. Neuman*, and Victorio E. Sonzogni†

*Departamento de Matemática (FIQ) Universidad Nacional del Litoral
Santiago del Estero 2829, 3000 Santa Fe, Argentina
e-mail: bergallo@fiqus.unl.edu.ar,

†Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC)
Universidad Nacional del Litoral
Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina
e-mail: sonzogni@intec.edu.ar

Key Words: Estimaciones de error, Mallas compuestas, Singularidades de borde.

Abstract.

Composite mesh methods that deal with the construction of numerical models where two or more finite element meshes of different granularities are superimposed over the whole domains of the problem where studied by the authors in the past five years. The focus of this work is stressed on elliptic problems where border singularities, and the associated lowering of order, are present.

Estimation of residues and errors for some examples are treated in this paper: (1) the test problems based on variants of the Laplace equation in domains where the geometry leads to the lowering of the order; (2) the elliptic stationary equations derived from advection-diffusion problem with boundary conditions of Robin type, where in these cases the singularities are associated with the boundary conditions.

The second set of examples are associated to problems drawn from Chemical Engineering with the aim of providing reasonable a posteriori error estimates.

Our numerical model is composed by different finite element meshes and the properties of the problem are obtained by adding those of the component meshes multiplied by a participation factor.

1 INTRODUCCIÓN

En los últimos años los autores han estudiado métodos de mallas compuestas asociados a la construcción de modelos numéricos donde dos o más mallas de elementos finitos de diferentes granularidades se superponen sobre el dominio del problema (ver el artículo¹ donde se comienza a tratar el problema que se estudia en este).

En este trabajo se estiman residuos y errores para dos tipos de ejemplos: (1) problemas test que se basan en variantes de la ecuación de Laplace en dominios donde la geometría produce una disminución del orden de convergencia, y (2) sistemas de ecuaciones elípticas estacionarias que provienen de problemas de advección-difusión con condiciones de borde del tipo mixto (Robin) en las que las singularidades están asociadas con las condiciones de borde.

El segundo conjunto de ejemplos está asociado a problemas reales provenientes de la Ingeniería Química con el propósito de dar estimaciones de error a posteriori, o, eventualmente, obtener soluciones numéricas mejoradas.

El modelo numérico se compone de diferentes mallas de elementos finitos y las propiedades del problema se obtienen sumando en forma conveniente las de las mallas que lo componen multiplicadas por un factor de participación. En este trabajo obtenemos resultados que relacionan nuestros estimadores basados en residuos con los clásicos provenientes de la literatura.

2 MÉTODO DE MALLAS COMPUESTAS Y ESTIMACIÓN DEL ERROR

El modelo numérico se compone de dos mallas de elementos finitos, generalmente una es obtenida a partir de la otra mediante un refinamiento, y las propiedades del modelo completo resultan de combinar las de las mallas componentes multiplicadas por un factor de participación.

Los estimadores de error son del tipo basado en el cálculo de residuos. Para citas bibliográficas y detalles de notación ver el artículo citado.¹

2.1 La malla compuesta

Las principales características de las dobles mallas utilizadas en este trabajo son las siguientes:

1. mallas de elementos triangulares
2. la malla más fina es la refinada de la más gruesa por el procedimiento de dividir los triángulos en cuatro por los puntos medios de los lados
3. los nodos comunes conectan las dos mallas
4. la malla doble tiene la suma de elementos de las intervinientes y el mismo número de nodos que la más fina

5. el factor de participación de cada malla es igual para el cálculo de residuos
6. el factor de participación de cada malla depende del orden local del método para el proceso de mejoramiento de soluciones numéricas

El problema en forma de operador $Lu = f$ se puede aproximar mediante

$$L_i u_{h_i} = f_i, \quad i = 1, 2 \quad (1)$$

donde $h_1 = 2h_2$ y h_i es la norma de la malla M_{h_i} , $i = 1, 2$. En el caso de la mezcla con factores iguales se tiene

$$(L_{1 \rightarrow 2} + L_2) u_{h_1 h_2} = (f_{1 \rightarrow 2} + f_2) \quad (2)$$

donde el símbolo $L_{1 \rightarrow 2}$ representa la inmersión de la matriz L_1 en los lugares correctos de L_2

2.2 Estimación del error

Se calculan los residuos

$$r_i = L_i u_{h_1 h_2} - f_i \quad (3)$$

y la solución $u_{h_1 h_2}$ se adapta a la dimensión de las matrices involucradas. La solución de doble malla se encuentra entre las soluciones correspondientes a las mallas individuales. La suma de los valores absolutos de los residuos esta directamente relacionada con la diferencia entre las dos aproximaciones y a sus errores absolutos. La idea es que la estimación puede realizarse con un solo cálculo para la malla doble.

3 PROBLEMAS TEST: LA ECUACIÓN DE LAPLACE

En primer término se considera el problema definido por la ecuación de Laplace en un dominio contenido en el cuadrado unitario del que se elimina un ángulo con vértice en el centro y de distintas amplitudes desde casi cero (aproximación de una fisura) hasta un valor que supera apenas π . La apertura del ángulo retracts produce que el vértice del mismo constituya un punto singular en el borde del dominio. Las condiciones de frontera en todos los casos son del tipo Dirichlet.

En las secciones siguientes se consideran varios casos de ángulo de apertura y en la última se analizan los órdenes de los métodos a partir de las normas de los errores para las distintas mallas.

3.1 Ángulo $\pi/2$

En la tabla 1 se presentan los errores de la malla fina respecto de la solución exacta para el dominio con ángulo de $\pi/2$. Se consideran las normas de la energía, la norma en el espacio L_2 y la norma del supremo en función del número de nodos de la malla. En la columna correspondiente a la norma en el espacio L_2 se puede observar el orden

superlineal correspondiente a la apertura del ángulo. En este caso el orden teórico es $3/2$ lo que coincide con el resultado experimental.

Comparado con los valores de la norma L_2 de la tabla 1 se tienen los correspondientes errores para una mezcla de mejoramiento de la solución (coeficiente $5/3$): para 519 nodos es $7.2e-4$ y para 1981 nodos es $2.3e-4$ en ambos casos se obtiene un factor de aproximadamente $1/2$ con el mismo esfuerzo computacional. El coeficiente de combinación entre las mallas que mejora la solución se obtiene a partir del orden del método. El valor óptimo del coeficiente es 1.46.

El estudio de los residuos se remite al caso del ejemplo siguiente puesto que el comportamiento es similar.

Table 1: Errores de la malla fina respecto de la solución exacta para el dominio con ángulo de $\pi/2$. En la columna correspondiente a la norma en el espacio L_2 se puede observar el orden superlineal correspondiente a la apertura del ángulo

Nodos	$\ u - u_h\ _E$	$\ u - u_h\ _{L_2}$	$\ u - u_h\ _{L_\infty}$
142	$3.2e-4$	$3.24e-3$	$1.1e-2$
519	$1.3e-4$	$1.3e-3$	$7.3e-3$
1981	$5.45e-5$	$5.1e-4$	$4.7e-3$
5025		$2.01e-4$	$3.0e-3$

3.2 Ángulo muy pequeño: fisura

En la tabla 2 se presentan los errores de la malla fina respecto de la solución exacta para el dominio con ángulo casi nulo (fisura) con el fin, como en la sección anterior de estimar el orden del método. Se consideran las normas de la energía, la norma en el espacio L_2 y la norma del supremo en función del número de nodos de la malla. En la columna correspondiente a la norma en el espacio L_2 se puede observar el orden lineal correspondiente a la apertura casi nula del ángulo. En este caso el orden teórico se aproxima a 1.

En las figuras 1 y 2 se comparan los residuos correspondientes al dominio con ángulo casi nulo con el error exacto de malla doble correspondiente al mismo dominio. Se observa que, como sucede en el caso del error, los residuos detectan el vértice generador de la singularidad. El fin del cálculo de los residuos es detectar los elementos que tienen los mayores errores. En este caso los elementos en el entorno de la singularidad son los que presentan los errores con mayor peso local y los residuos acompañan ese comportamiento.

La norma del supremo de los residuos está superada uniformemente en este caso por la correspondiente del error exacto.

Table 2: Errores de la malla fina respecto de la solución exacta para el dominio con ángulo casi nulo (fisura). En la columna correspondiente a la norma en el espacio L_2 se puede observar el orden lineal correspondiente a la apertura casi nula del ángulo

Nodos	$\ u - u_h\ _E$	$\ u - u_h\ _{L_2}$	$\ u - u_h\ _{L_\infty}$
97	$6.6e-3$	$1.63e-2$	$4.27e-2$
345	$3.6e-3$	$8.02e-3$	$3.47e-2$
1297	$1.9e-3$	$3.96e-3$	$2.61e-2$
5025		$1.97e-3$	$1.9e-2$

3.3 Ángulo muy cercano a π , caso no convexo

Los casos precedentes son los clásicos en la verificación de un método adaptado a la detección de errores locales. En este trabajo presentamos el caso en que el dominio es prácticamente un rectángulo con un pequeño ángulo entrante o saliente con vértice en el centro del cuadrado unitario. Este caso es interesante porque, pese a que el orden es aproximadamente 2, y podría pensarse que la singularidad desaparece, ello no es así y el error y nuestro método la detectan. Se tiene sin embargo un mejoramiento uniforme de las soluciones debido a que la singularidad es mucho menos demandante. Comparar al respecto los valores de los errores en las diferentes tablas presentadas.

En primer término se considera el caso de dominio no convexo y en la siguiente sección el caso convexo.

En la tabla 3 se presentan los errores de la malla doble respecto de la solución exacta para el dominio con ángulo $\pi - \varepsilon$ (caso no convexo). Se consideran las normas de la energía, la norma en el espacio L_2 y la norma del supremo en función del número de nodos de la malla. En la columna correspondiente a la norma en el espacio L_2 se puede observar el orden aproximadamente cuadrático correspondiente a la apertura del ángulo. En este caso el factor de participación entre las mallas que resulta óptimo para el orden obtenido es de aproximadamente $4/3$.

Table 3: Errores de la malla doble respecto de la solución exacta para el dominio con ángulo $\pi - \varepsilon$ (caso no convexo). En la columna correspondiente a la norma en el espacio L_2 se puede observar el orden aproximadamente cuadrático correspondiente a la apertura del ángulo.

Nodos	$\ u - u_h\ _E$	$\ u - u_h\ _{L_2}$	$\ u - u_h\ _{L_\infty}$
373	$4.8e-11$	$4.2e-7$	$3.2e-6$
1417	$1.1e-11$	$1.2e-7$	$1.6e-6$
5521	$2.7e-12$	$3.5e-8$	$8.2e-7$

En las figuras 3 y 4 se representan para su comparación el error exacto de malla fina correspondiente al dominio con ángulo cercano a π (caso no convexo) y el error exacto

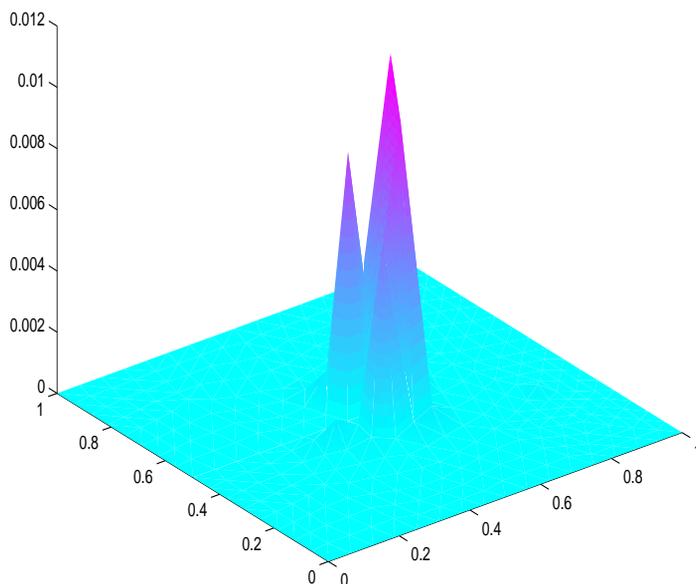


Figure 1: Residuos correspondientes al dominio con ángulo casi nulo (fisura). Se observa que los residuos detectan el vértice generador de la singularidad. Comparar con la figura2

de malla doble con factor de participación $4/3$ correspondiente al mismo dominio. Se observa el mejoramiento de la solución debida al proceso implícito de extrapolación con el coeficiente adecuado.

3.4 Ángulo muy cercano a π , caso convexo

En este caso, que complementa el precedente, el dominio es practicamente un rectángulo con un pequeño ángulo entrante con vértice en el centro del cuadrado unitario. Es decir que estamos en presencia de un polígono convexo. Sin embargo, aún en este caso, se detecta el efecto del vértice. Es de destacar que la solución exacta del problema es una función que por lo menos está en el espacio H^2 , a diferencia de la solución de la sección previa, la cual pertenece al espacio H^{1+s} , con $0 < s < 1$.

En la tabla siguiente se muestran los errores de la malla doble respecto de la solución exacta medidos en las normas de la energía, en la del espacio L_2 y la del supremo, en función del número de nodos de la malla. Aquí el orden del método es 2.

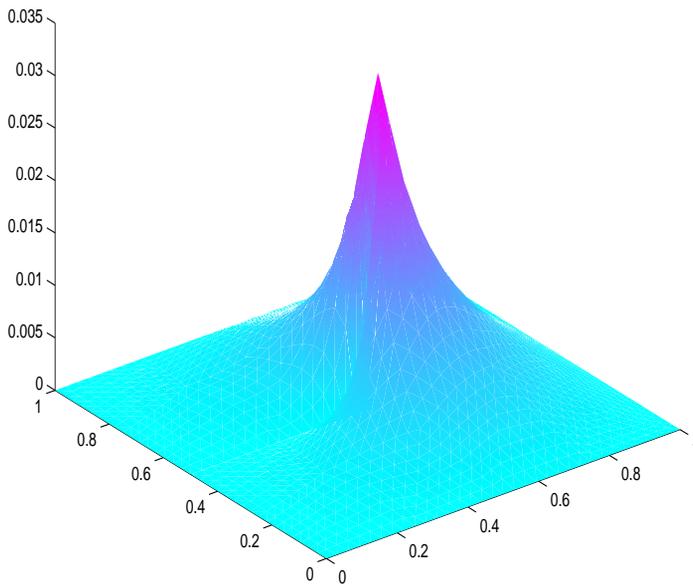


Figure 2: Error exacto de malla doble correspondiente al dominio con ángulo casi nulo (fisura). Se observa que los errores son mayores en la vecindad del vértice generador de la singularidad. Comparar con la figura 1

Como complemento del ejemplo previo, en las figuras 5 y 6 se comparan los residuos con los errores exactos correspondientes a la malla doble, en las que se pueden observar que, a pesar de la suavidad de la solución, la zona de mayores errores sigue siendo la del entorno del vértice saliente.

Las normas infinito de residuos y errores exactos son muy similares.

En la figura 7 se representa la solución del problema test sobre la que se superpone la malla de elementos y, en color, el error exacto lo que permite localizar los nodos y lados afectados por el vértice singular y toda su área de influencia.

3.5 Órdenes de los métodos

En la figura 8 se representan los errores medidos en las normas infinito y L_2 para diferentes mallas, en función del número de nodos lo que amplía los valores presentados en las tablas 1 y 2. En la misma se ubican, además, los puntos correspondientes a los errores asociados al

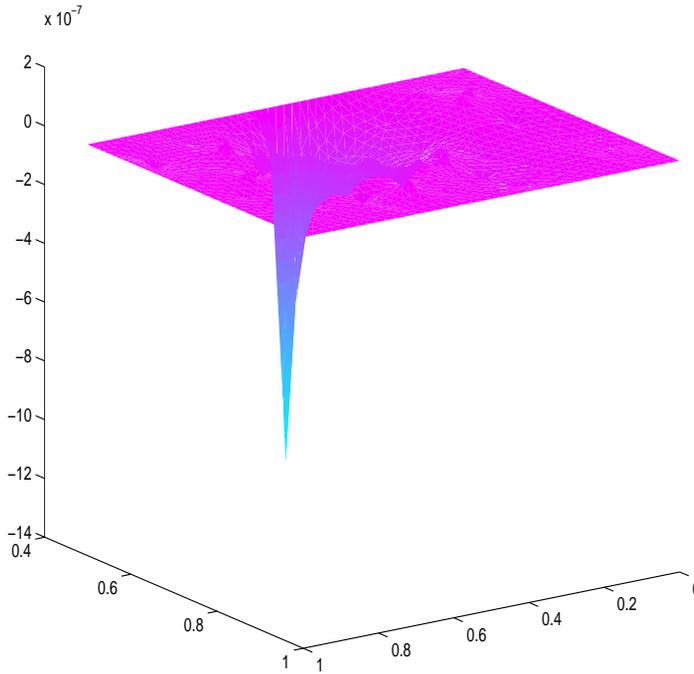


Figure 3: Error exacto de malla fina correspondiente al dominio con ángulo cercano a π (caso no convexo). Se observa que los errores son mayores en la vecindad del vértice generador de la singularidad.

dominio de la fisura sobre mallas refinadas adaptativamente. Se observa un mejoramiento natural pues con un número de elementos similar, se obtiene un error dos órdenes más pequeño.

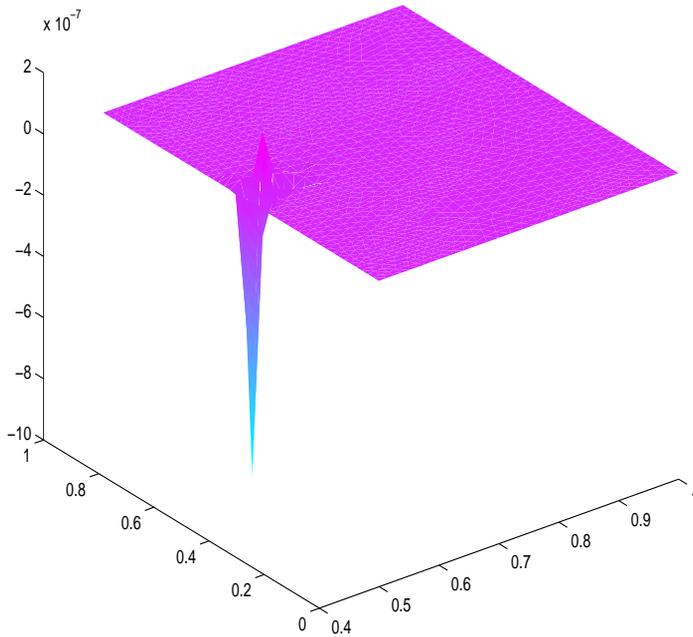


Figure 4: Error exacto de malla doble con factor de participación $4/3$ correspondiente al dominio con ángulo cercano a π (caso no convexo). Se observa que los errores son mayores en la vecindad del vértice generador de la singularidad. Comparar con la figura3, se observa el mejoramiento de la solución debida al proceso implícito de extrapolación

Table 4: Errores de la malla doble respecto de la solución exacta para el dominio con ángulo $\pi + \varepsilon$ (caso convexo). En la columna correspondiente a la norma en el espacio L_2 se puede observar el orden aproximadamente cuadrático correspondiente a la apertura del ángulo

Nodos	$\ u - u_h\ _E$	$\ u - u_h\ _{L_2}$	$\ u - u_h\ _{L_\infty}$
371	$4.4e-11$	$4.4e-7$	$3.1e-6$
1413	$1.0e-11$	$1.3e-7$	$1.4e-6$
5513	$2.5e-12$	$3.7e-8$	$7.4e-7$

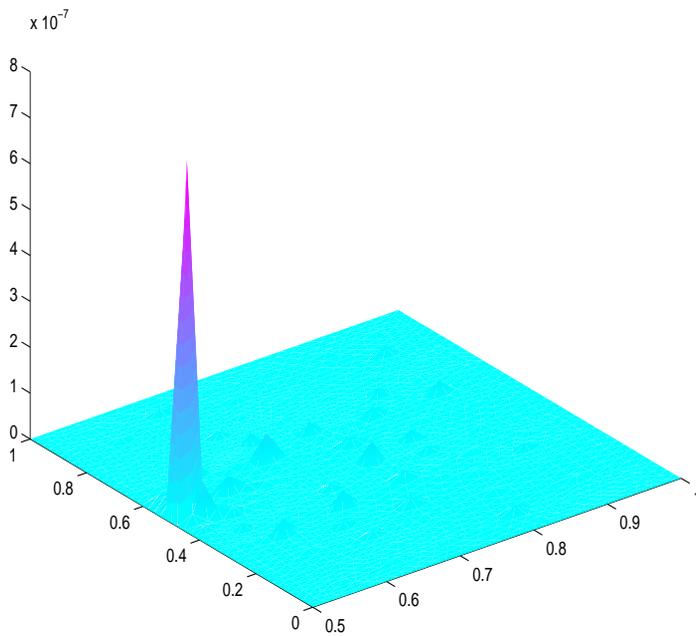


Figure 5: Residuos correspondientes al dominio con ángulo cercano a π (caso convexo). Se observa que los errores son mayores en la vecindad del vértice generador de la singularidad aunque el dominio es un polígono convexo. Comparar con la figura 6

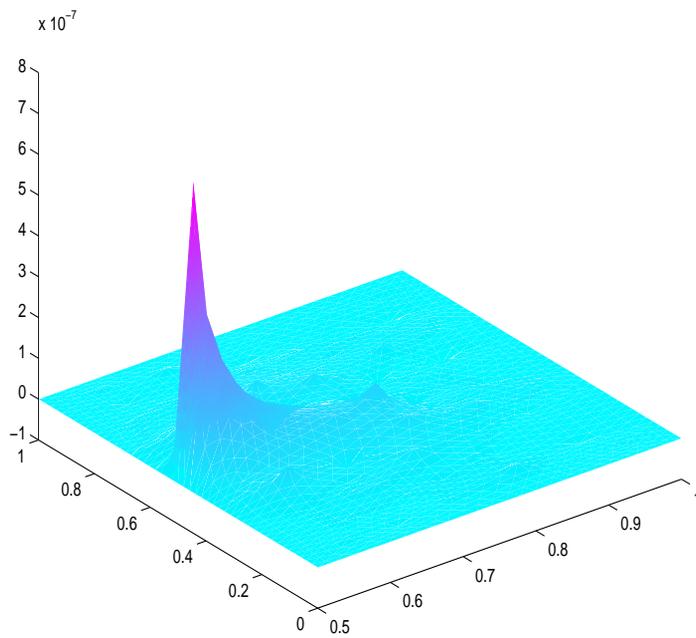


Figure 6: Errores exactos de doble malla correspondientes al dominio con ángulo cercano a π (caso convexo). Se observa que los errores son mayores en la vecindad del vértice generador de la singularidad aunque el dominio es un polígono convexo.

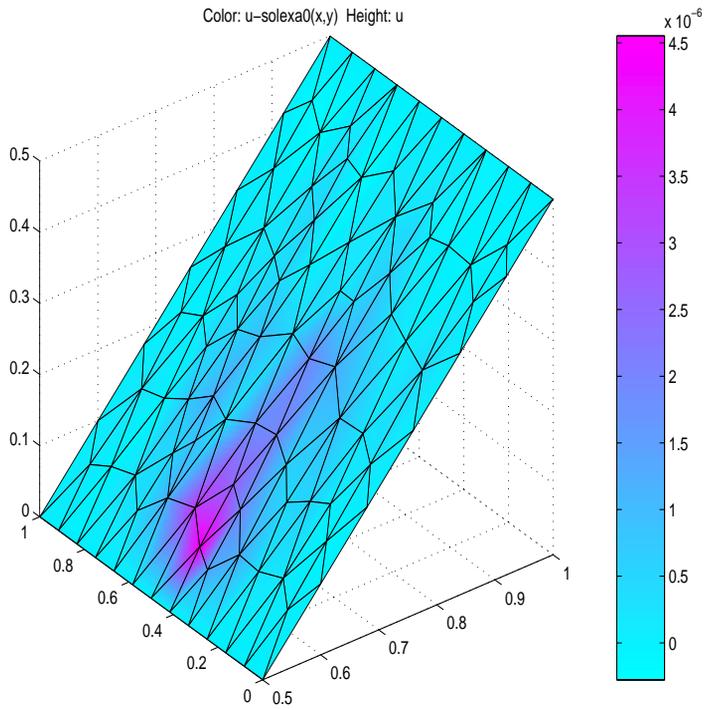


Figure 7: Solucion del problema test para el dominio con ángulo cercano a π (caso convexo) sobre la que se superpone la malla de elementos y, en color, el error exacto lo que permite localizar los nodos y lados afectados por el vértice singular y toda su área de influencia, cabe destacar que se trata de un polígono convexo.

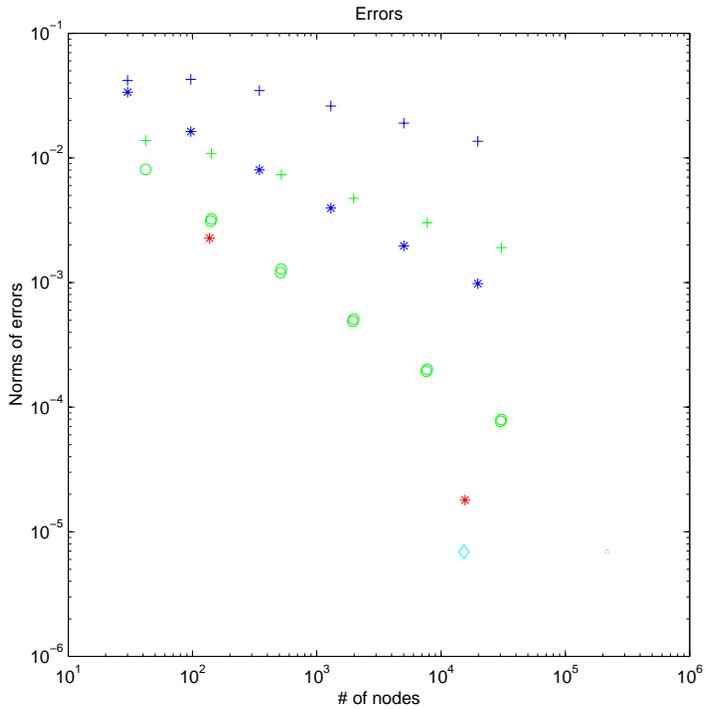


Figure 8: Normas de los errores: +(azul): norma infinito del error del problema fisura, *(azul): norma L_2 del error del problema fisura, +(verde): norma infinito del error del problema con ángulo $\pi/2$, o(verde): norma L_2 del error del problema con ángulo $\pi/2$, *(rojo): norma L_2 del error del problema fisura pero refinada la malla en función de la estimación de errores, lo mismo el \diamond (celeste). De las pendientes de las curvas en norma L_2 se pueden deducir los órdenes del método para cada dominio.

4 SISTEMA DE ECUACIONES ELÍPTICAS

Los reactores catalíticos del tipo monolito pueden modelarse mediante sistemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que representan los balances de energía y de materia en el seno del reactor. El sistema completo es muy complejo, razón por la cual se ataca en la práctica mediante simplificaciones que faciliten su estudio matemático conservando algunas de las características y propiedades del sistema original.

Las primeras simplificaciones, que no son esenciales, pero sí muy convenientes, llevan a considerar un sistema en dos dimensiones espaciales (se trata de pensar en la simetría que poseen los reactores que estudiamos) que puede llevarse a tres modificando el código de programación, esta es una simplificación que está asociada a facilitar la realización de las pruebas de modelado en una computadora relativamente modesta. Cuando se desea atacar el problema tridimensional debe migrarse a un soporte computacional más potente. Asimismo se considera solamente una especie representativa de los productos que son procesados por el reactor: esto reduce el sistema de ecuaciones a dos, una para la distribución de temperaturas, y la otra para la concentración de la especie activa.

Los primeros pasos en el análisis matemático del problema se orientan a estudiar estas ecuaciones desacopladas, las propiedades de las soluciones para coeficientes simplificados que permitan estimar el comportamiento de las soluciones en los rangos de operación y el comportamiento que puede esperarse cuando las ecuaciones se acoplen.

En el dominio en que se estudia el problema, la presencia del catalizador se reduce en el modelo a la pared superior, allí se produce la reacción química y procesos de transferencia de calor que conducen a condiciones de frontera del tipo de Robin con un término de cambio de concentración o de calor y otro término de transferencia de calor en la pared. En el sector de entrada al dominio ingresa la mezcla que debe purificarse y allí se plantean condiciones de frontera del tipo Dirichlet con concentración y temperatura dadas. En una etapa posterior se plantea considerar un sistema de regulación donde la información producida por este reactor modelo sirve para definir una acción de control sobre el motor que produce el material con componentes que deben ser procesados. En los restantes lados del dominio la condición de Neumann homogénea es la que representa la condición física que admite la simetrización del problema y la prolongación del mismo.

La longitud del reactor es variable. En los ejemplos tomamos la distancia adimensionalizada unitaria por simplicidad. Cuanto más extenso es el reactor en mayor medida se produce la reacción de eliminación de la especie blanco y, de este modo, la longitud media de los dominios se puede tomar como un parámetro para el ajuste del diseño.

La ecuación simplificada que modela el proceso estacionario correspondiente a la concentración w de una especie química (e.g. propano) en un ambiente rico en oxígeno es

$$-\Delta w + auw = 0 \tag{4}$$

donde a es un parámetro y u es la temperatura del dominio (tomamos el cuadrado unitario).

Las correspondientes condiciones de frontera en el catalizador, pared superior, son

$$\partial w / \partial \eta + buw = 0 \quad (5)$$

donde el símbolo $\partial w / \partial \eta$ corresponde a la derivada normal de w y b corresponde a un parámetro. Las restantes son las mencionadas precedentemente.

La ecuación simplificada de la distribución de temperaturas en el dominio que utilizamos es

$$-\Delta u + cwu = 0 \quad (6)$$

donde c es un parámetro.

En este caso las condiciones de frontera en el catalizador son

$$\partial u / \partial \eta - dwu = -f(u) \quad (7)$$

donde d es un parámetro y $f(u)$ es una función de la temperatura correspondiente a los procesos de transmisión del calor.

Para resolver el problema después de haber realizado pruebas con las ecuaciones desacopladas y coeficientes constantes se ataca su resolución mediante un método iterativo. Se inicializa con una distribución de la concentración proveniente del sistema desacoplado. Se resuelve la ecuación de temperaturas utilizando las concentraciones iniciales y se estudian sus residuos locales con el fin de refinar eventualmente la malla utilizada. El resultado de este proceso es una distribución de temperaturas y una estimación del error correspondiente. El siguiente paso consiste en resolver la ecuación de concentraciones utilizando la distribución hallada de temperaturas. Se calculan los residuos asociados a la solución de la ecuación de concentraciones y con ellos se estiman los errores. La información es utilizada para el refinamiento eventual de la malla. Se comparan las nuevas distribuciones con las anteriores y el proceso continúa hasta alcanzar un nivel aceptable de discrepancia.

En el ejemplo numérico que se expone a continuación las ecuaciones son

$$-\Delta u - 0.3wu = 0 \quad \text{en } [0, 1]^2 \quad (8)$$

con las condiciones de frontera $u = 1$ para todo $0 < y < 1$ y $x = 0$, $\partial u / \partial \eta - 0.28wu = -0.3$ para todo $0 < x < 1$ e $y = 1$, y condiciones homogéneas de Neumann en los restantes dos lados, y

$$-\Delta w = 0 \quad \text{en } [0, 1]^2 \quad (9)$$

con las condiciones de frontera $w = 1$ para todo $0 < y < 1$ y $x = 0$, $\partial w / \partial \eta + uw = 0$ para todo $0 < x < 1$ e $y = 1$, y también condiciones homogéneas de Neumann en los restantes dos lados.

En la figura 9 se representa la distribución de temperaturas y en la figura 10 se representa la distribución de concentraciones.

Se omite el análisis de residuos de la distribución de temperaturas y en la figura 11 se representan los residuos correspondientes a las concentraciones. Es posible observar que

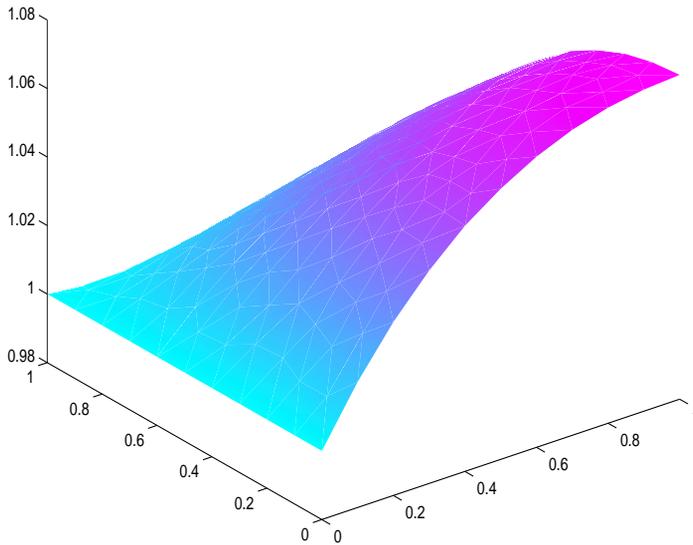


Figure 9: Distribución de temperaturas.

el mapa de residuos detecta el vértice con la singularidad proveniente de la yuxtaposición de las condiciones de frontera de Dirichlet y de Robin (adyacencias del vértice $(0, 1)$)

En la figura 12 se representan las estimaciones del error mediante el método de Zienkiewicz y Zhu. En la misma se puede observar que el máximo error se manifiesta en una posición coincidente con la anterior, detectando en modo análogo la singularidad.

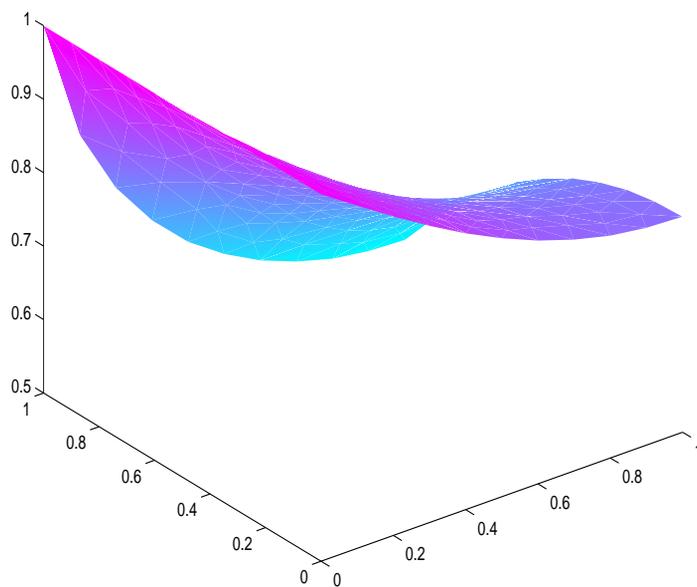


Figure 10: Distribución de concentraciones.

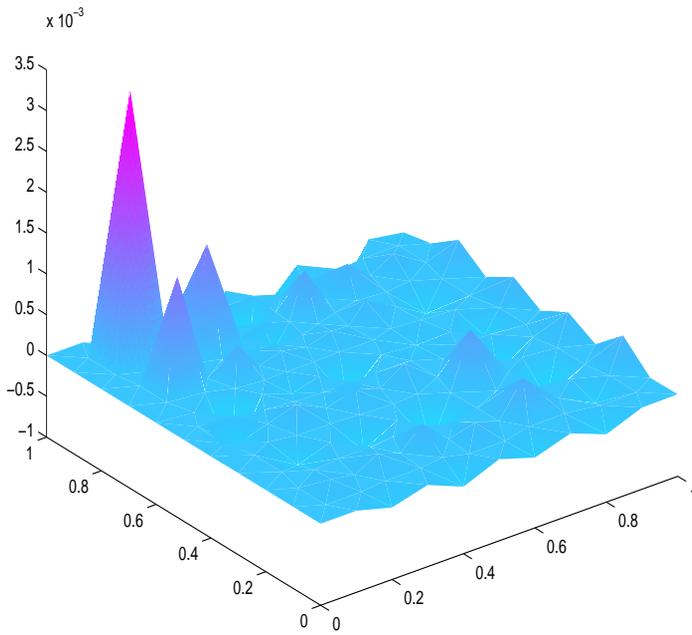


Figure 11: Residuos para la concentración w .

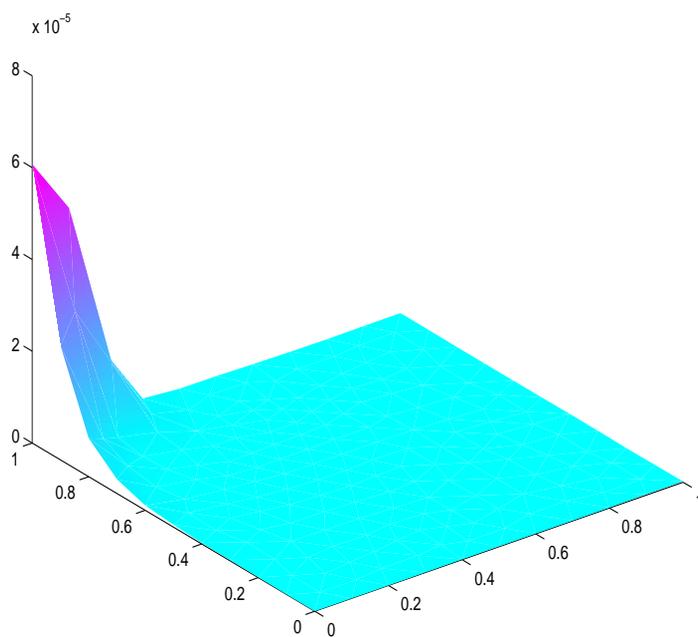


Figure 12: Errores de Zienkiewicz-Zhu para la distribución de concentraciones.

5 CONCLUSIONES

Se ha continuado el estudio, comenzado en el artículo¹ citado, de la utilización de mallas de elementos finitos compuestas o mixtas para detectar los mayores errores en problemas elípticos con singularidades en la frontera. Dos o más mallas de elementos finitos se hacen coexistir en el dominio del problema. Cada una de ellas tiene distintiva precisión intrínseca y, como en nuestro modelo cada una está afectada de un peso o factor de participación, de la combinación entre las mallas es posible, mediante un postprocesamiento cuya complejidad es menor que el del problema resuelto, estimar errores de discretización a posteriori.

En el artículo previo se había continuado la presentación de un estimador de error semicuantitativo basado en el algoritmo de doble malla. En este trabajo se muestra que la localización de los errores y, en buena medida, la valuación de los mismos, permite detectar de manera precisa la correspondiente localización de las singularidades en el borde.

Es interesante notar que, aún en dominios poligonales convexos, el estimador es eficiente aunque no está relacionado en este caso con el orden del método utilizado.

Cuando las singularidades provienen de la yuxtaposición de condiciones de frontera en sectores adyacentes de la misma con propiedades de suavidad no compatibles, el método también es eficiente aun en casos en que el problema no es lineal.

6 AGRADECIMIENTO

Trabajo realizado con el apoyo del proyecto CAID 12/H168 de la UNL, Santa Fe

REFERENCES

- [1] M. Bergallo, C.E. Neuman, and V. Sonzogni. Study of fem errors for elliptic 2d problems with border singularities. *Mecánica Computacional*, **20**, 430–437 (2001).