

Cálculo de Dosimetría Mediante Elementos Finitos con Adaptabilidad Automática hp en Tres Dimensiones

Ignacio Gómez-Revuelto⁽¹⁾, David Pardo⁽²⁾, Luis E. García-Castillo⁽³⁾, Jason Kurtz⁽⁴⁾
igomez@diac.upm.es, dzubiaur@gmail.com, luise@tsc.uc3m.es, kurtzj@ices.utexas.edu

⁽¹⁾ Dep. Ingeniería Audiovisual y Comunicaciones, Universidad Politécnica de Madrid
E.U.I.T. de Telecomunicación, Ctra. Valencia, Km. 7. 28031 Madrid.

⁽²⁾ Basque Center for Applied Mathematics e IKERBASQUE

⁽³⁾ Dep. Teoría de la Señal y Comunicaciones, Universidad Carlos III de Madrid

⁽⁴⁾ Institute for Computational Engineering and Sciences, The University of Texas at Austin

Abstract—In this communication the effect of the electromagnetic radiation on *in vitro* cell cultures is analyzed using a self-adaptive hp -Finite Element Method (hp -FEM) in three dimensions. Computer dosimetry is a challenging problem as it involves complex geometries with high contrast electromagnetic materials. hp -FEM produces exponential convergence rates in terms of the energy-norm error of the solution against the problem size (number of degrees of freedom), even in the presence of singularities. Thus, accurate electromagnetic solutions of complex problems, as computer dosimetry for *in vitro* experiments, can be obtained. Furthermore, the use of self-adaptive techniques provides solutions, with a user pre-specified degree of accuracy from a initial very coarse mesh without any *a priori* knowledge of the problem solution.

I. INTRODUCCIÓN

El método de los Elementos Finitos (MEF) [1] se basa en una formulación variacional derivada de una ecuación diferencial y un conjunto de condiciones de frontera que determinan la solución del problema. Típicamente, el dominio general se divide en subdominios donde se utilizan funciones polinómicas para aproximar la solución. La unión de cada subdominio con el espacio que generan las funciones que *viven* sobre él se le denomina elemento finito. La discretización del problema se basa en determinar este conjunto de elementos finitos y a dicha discretización se le denomina malla.

Encontrar la malla que proporcione la mejor aproximación a la geometría y a la solución se denomina adaptabilidad. La adaptabilidad en p consiste en determinar el grado de los polinomios estando prefijado los subdominios en que se divide el problema, ver figura 1(c). La adaptabilidad en h consiste en modificar la partición del dominio global en subdominios cuando el orden de los polinomios se ha fijado de antemano, figura 1(b). La adaptabilidad hp consiste en determinar al mismo tiempo el tamaño de los subdominio y el orden de los polinomios, figura 1(d). Esta adaptabilidad es la más potente porque permite obtener velocidades de convergencia exponenciales, incluso aunque existan

singularidades en la solución, en la norma de energía. Por contra, las adaptabilidades en h o en p obtienen velocidades de convergencia algebraicas (la adaptabilidad en p puede obtener convergencia exponencial para situaciones muy particulares de soluciones *suaves* en todo el dominio). La adaptabilidad hp produce mejor aproximación que las adaptabilidades en h o en p para un número de incógnitas prefijado; o dado un error prefijado, la adaptabilidad hp necesita menos grados de libertad que las adaptabilidades en h o en p . La adaptabilidad es automática cuando este procedimiento se realiza sin ayuda del usuario y permite obtener mallados óptimos para el análisis del problema a partir de mallados simples (no es necesario que el usuario tenga un conocimiento *a priori* de la solución).

En la presente comunicación se presenta la adaptabilidad automática hp aplicada a problemas electromagnéticos cerrados. Dicha adaptabilidad fue ya presentada a problemas electromagnéticos cerrados y abiertos en 2D en [2], [3]. Como se detallará en el apartado III, el paso de 2D a 3D no es trivial ya que la complejidad computacional del problema aumenta significativamente.

La adaptabilidad automática hp permite el análisis preciso de problemas electromagnéticos complejos como el del cálculo de dosimetría en experimentos *in vitro* [4]. En estos problemas existen materiales con geometrías complejas y parámetros electromagnéticos muy dispares. La adaptabilidad automática hp permite obtener la solución del problema (con precisión prefijada) con un mínimo número de incógnitas y sin necesitar conocer *a priori* la solución del problema.

II. FORMULACIÓN VARIACIONAL, DISCRETIZACIÓN Y ADAPTABILIDAD hp

La formulación variacional se obtiene a partir de las ecuaciones de Maxwell y las condiciones de frontera que definen el problema. Para ello se multiplica la ecuación de onda por una función test arbitraria, se integra por partes y se imponen las condiciones de frontera. El problema queda definido por: encontrar

$\mathbf{E} \in \mathbf{H}(\text{curl})$ tal que $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E} = 0$ sobre Γ_D y

$$\begin{aligned} & \int (\nabla \times \mathbf{F}) \cdot \left(\frac{1}{f_r} \nabla \times \mathbf{E} \right) d\Omega - k_0^2 \int \mathbf{F} \cdot g_r \mathbf{E} d\Omega \\ & + \frac{\gamma}{f_r} \int_{\Sigma_{\Gamma_p^i}} (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}) d\Gamma \\ & = 2 \frac{\gamma}{f_r} \int_{\Gamma_p^{\text{inc}}} (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{U}^{\text{inc}}) d\Gamma \quad (1) \end{aligned}$$

para todo $\mathbf{F} \in \mathbf{H}(\text{curl})$ tal que $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F} = 0$ sobre Γ_D . Γ_D y Γ_N corresponden, respectivamente a las superficies donde se imponen las condiciones de Dirichlet y Neumann. Γ_p^i es la superficie correspondiente a la puerta de guía i -ésima y Γ_p^{inc} denota la puerta/s excitada/s.

La discretización de la formulación variacional implica introducir espacios de dimensión finita, en este caso, $\mathbf{W}_{hp} \subset \mathbf{W}$. La clave en la construcción de dichos espacios es que se respete la condición de conmutatividad del diagrama de Rham [5]. Para ello, se cuenta con una metodología que permite, a partir de funciones de polinomios escalares de orden $p + 1$ generar las funciones de base correspondientes a \mathbf{W}_{hp} que satisfagan automáticamente dicha condición. Dicha metodología se describe con detalle en [6].

Una vez obtenida la discretización hp en la malla inicial (que debe ser regular –sin nodos colgantes–, ver figura 1(a)), se activa una estrategia automática de adaptabilidad que produce una sucesión de mallas hp que logran una disminución del error de la solución de forma exponencial. Las mallas que se generan sí pueden tener nodos colgantes de tipo irregular-1, ver figura 1(d). La estrategia de adaptabilidad se basa en

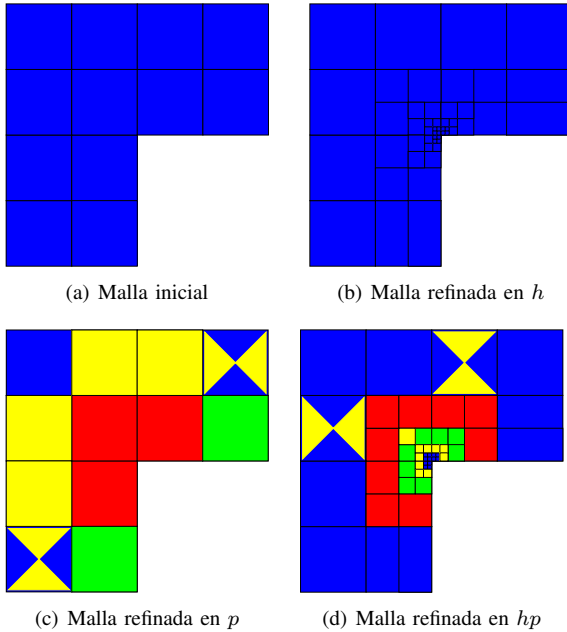


Fig. 1. Diferentes clases de refinamiento. El color indica el orden del polinomio p de los elementos. Nota: Las mallas son únicamente con fines ilustrativos y ellas no han sido obtenidas con el código.

la proyección del error de interpolación. La definición matemática del operador interpolador basado en proyección puede verse en [7]. Es importante resaltar que el diagrama de Rham conmuta con dicho operador [5], lo que es fundamental para probar diversas propiedades relacionadas con la estabilidad y la convergencia del MEF en electromagnetismo. Para poder interpolar el error hay que conocer la solución exacta. Para ello, se reemplaza la solución exacta por una solución aproximada significativamente más precisa que la solución de MEF. Ello se consigue usando una malla fina (resultado de refinar uniformemente en h y subir el grado a $p + 1$ de los elementos de la malla actual –malla gruesa–). De este modo, se evita el uso de estimaciones *a posteriori*. Los pasos necesarios para la elección de la siguiente malla se detallan en [8], [9].

III. COMPLEJIDAD COMPUTACIONAL EN 3D

La adaptabilidad automática hp en 2D ya ha sido presentada para problemas electromagnéticos cerrados y abiertos en 2D en [2], [3]. Como la estructura de datos y procedimientos utilizados es 2D y 3D son muy parecidos, el paso de a 3D parece directo y sencillo. Nada más alejado de la realidad porque la complejidad computacional en 3D es muy superior a la de 2D.

El número de incógnitas para resolver un problema en 3D es notablemente superior al de 2D. Para un cuadrado en 2D (cubo en 3D) de longitud prefijada l , el número de elementos pasa de ser $\sim l^2$ en 2D a $\sim l^3$ en 3D. Este aumento en el número de elementos se ve magnificado por el número de grados de libertad que cada elemento posee (la relación para un elemento isotrópico de orden p es $N^{3D}/N^{2D} = 1.5(p + 1)$).

El orden de complejidad computacional en el cálculo directo de la matriz elemental asociada a cada elemento es de p^9 en 3D frente a p^6 en 2D. La magnitud p^9 proviene de que el número de grados de libertad por elemento es del orden p^3 con lo cual la matriz elemental tiene p^6 entradas. En el cálculo de la integral numérica de cada elemento hay que realizar p^3 operaciones. Este orden se reduce a p^7 mediante el empleo del algoritmo de factorización de la suma [9], [10] en el caso de transformaciones geométricas afines con respecto al elemento de referencia.

El siguiente problema donde la complejidad computacional aumenta considerablemente de 2D a 3D ocurre al seleccionar los elementos que hay que refinar y el tipo de refinamiento que hay que realizar. La complejidad computacional para calcular el error en cada elemento es de p^6 en 3D frente a p^4 en 2D. Este cálculo hay que realizarlo para una de las posibles elecciones de refinamiento que hay, que para los refinamientos en h se pasa de 4 en 2D a 8 en 3D. Para cada opción de refinamiento en h seleccionada hay p^2 opciones de refinamiento en 2D frente a p^3 en 3D. Afortunadamente, no hay que testear todas las posibles opciones de refinamiento en p , ya que mediante un algoritmo se seleccionan las más prometedoras.

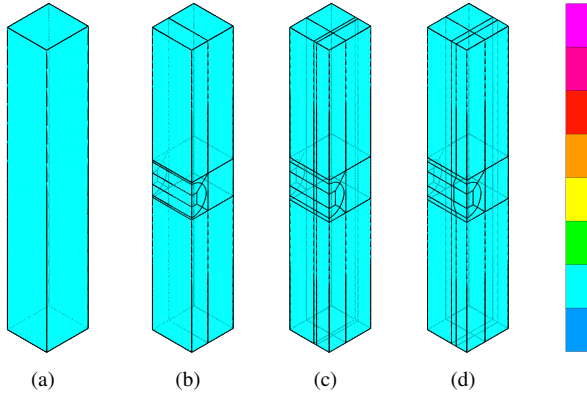


Fig. 2. Mallados iniciales para el análisis del problema de la guiaonda vacía: (a) único hexaedro, (b) cilindro, (c) disco plano y (d) disco con menisco.

IV. RESULTADOS

En esta sección se presentan algunos resultados donde se muestra la convergencia exponencial del error en energía respecto al número de incógnitas. Esto significa que en la región asintótica el error disminuye con respecto al número de incógnitas de acuerdo con la expresión $\epsilon = C \exp(-\beta N_{\text{dof}}^\alpha)$. Según la teoría [11] $\alpha = \frac{1}{3}$ en 2D y $\alpha = \frac{1}{5}$ en 3D. Por tanto, si se dibuja el error en escala logarítmica versus N_{dof}^α se debe obtener una línea recta.

El objetivo es analizar una placa Petri rellena de una solución de Ringer. La placa Petri se introduce en una guiaonda rectangular cuyas dimensiones son $a = 95$ mm por $b = 45$ mm y su longitud es $L = 300$ mm. El modo de excitación es el TE_{10} y la frecuencia de trabajo es $f_T = 1.5f_c$ siendo f_c la frecuencia de corte del modo TE_{10} . Un disco circular dieléctrico simula el comportamiento de la solución introducida en la placa Petri que se sitúa en el centro de la guiaonda, a una altura de 27.5 mm. desde la cara inferior. El disco se coloca horizontal con una altura 3 mm y radio $R_0 = 16.9$ mm. Debido a las fuerzas de adhesión, la superficie que delimita el liquido no es plana sino que tiene forma de menisco. Para este problema, la superficie superior se pueda aproximar por

$$h_m(\rho) = h + 2\Delta h e^{-\frac{R_0}{c}} \left(\cosh\left(\frac{\rho}{c}\right) \right), |\rho| \leq R_0 \quad (2)$$

donde ρ es la distancia al eje del disco, h es la altura en el centro del disco, $\Delta h = 2.51$ mm es el incremento de altura del borde al centro, $c = 2.01$ mm determina la rapidez de caída de la superficie y $R_0 = 16.9$ mm es el radio del disco Petri [4].

La figura 2 representa las distintas mallas iniciales para el estudio de una guiaonda vacía. Todas las mallas iniciales utilizan elementos de segundo orden en donde los colores muestran el orden de los elementos del mallado acorde con la escala que aparece en la parte derecha de la figura 2 (va desde azul oscuro que corresponde a $p = 1$ hasta magenta para $p = 8$). Se ha elegido este problema porque la solución analítica es conocida y se han utilizado varias mallas iniciales

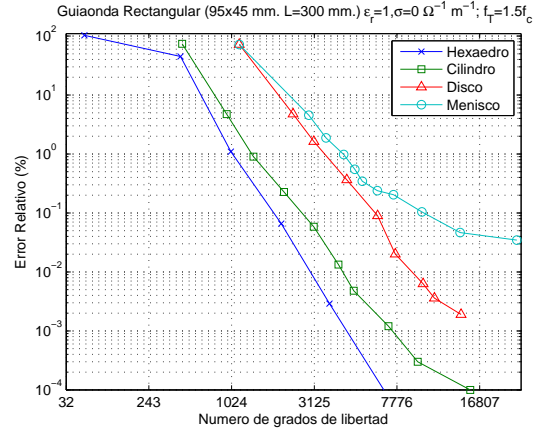


Fig. 3. Convergencia del error relativo en función del número de incógnitas. El parámetro utilizado ha sido la malla inicial

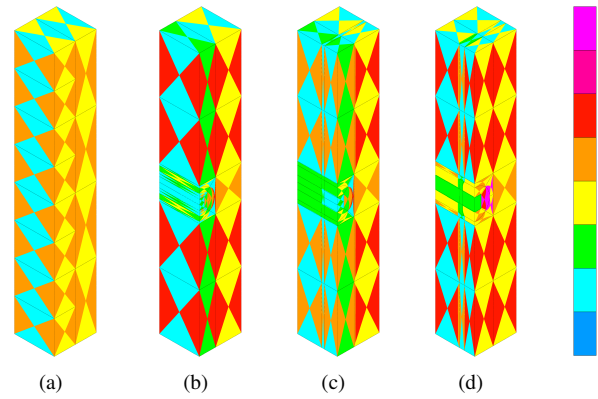


Fig. 4. Mallados obtenidos para un error relativo del 0.1% en la guiaonda vacía: (a) hexaedro, (b) cilindro, (c) disco plano y (d) disco con menisco.

distintas para comprobar como la geometría de la malla inicial influye en la exactitud de la solución. Nótese que la malla inicial 2(a) es la adecuada para resolver el problema de la guía vacía, mientras que la malla 2(d) lo es para resolver la placa Petri dentro de la guiaonda.

En la figura 3 se representa la convergencia del error relativo en la norma de la energía en función del número de incógnitas utilizadas. El eje de abscisas se presenta escalado algebraicamente según $N_{\text{dof}}^{\frac{1}{5}}$, aunque las etiquetas muestran el valor real. Siendo el problema físico el mismo, complicar la geometría del mallado inicial reduce la convergencia del método.

Las mallas obtenidas para un error relativo del 0.1% se muestran en la figura 4. Nótese como en la malla 4(a) la densidad de grados de libertad aumenta donde la variación del campo electromagnético es mayor, mientras en el resto de las mallas hay que emplear un número significativo de incógnitas para aproximar la geometría de la malla inicial.

El siguiente paso es sustituir la permitividad relativa del vacío por la de la solución Ringer ($\epsilon_r = 77$) en el disco plano y el disco con menisco; las mallas iniciales utilizadas coinciden con las de guiaonda vacía, ver

TABLE I
VARIACIÓN DEL $|S_{11}|$ Y $|S_{21}|$ CON RESPECTO AL NÚMERO DE
GRADOS DE LIBERTAD

Incog.	Iter.	$ S_{11} $	$ S_{21} $
1148	0	0.54958076	0.83473433
2564	1	0.03196761	0.99906358
3439	2	0.03585315	0.99914560
4334	3	0.03463740	0.99936362
6505	4	0.03458310	0.99939479
16437	5	0.03495511	0.99938550
26773	6	0.03499580	0.99938587
41168	7	0.03502785	0.99938484
	AM	0.03517859	0.99938104

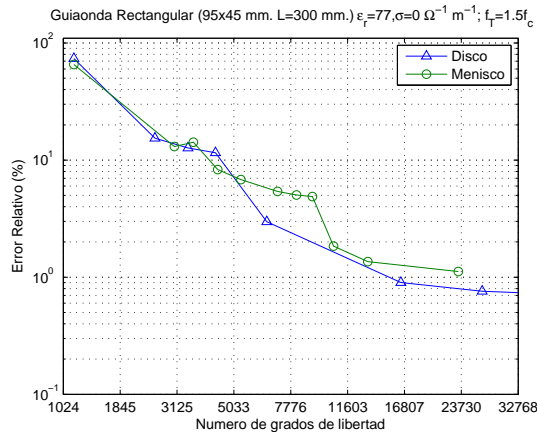


Fig. 5. Convergencia del error en la guía rectangular con cilindro dieléctrico (plano y con menisco) sin pérdidas

mallas 2(c) y 2(d). Para el disco plano, la variación del módulo de los parámetros de *scattering* ($|S_{11}|$ y $|S_{21}|$) con respecto al número se incógnitas utilizadas se detalla en la tabla I. Con el fin de verificar los resultados, en la tabla I también se proporciona el módulo de los parámetros S obtenidos con una técnica de Análisis Modal (AM) [12].

La figura 5 muestra la convergencia del error relativo en la norma de la energía para los discos con dieléctrico sin pérdidas. En la figura 6 se representa la mallas obtenidas para un error relativo del 1%. La alta permitividad del dieléctrico reduce la convergencia del método y aproxima la convergencia del disco plano con la del disco con menisco.

También se ha considerado las pérdidas de la solución Ringer. Para ello se ha seleccionado un dieléctrico con ($\epsilon_r = 77$ y $\sigma = 2.3 \Omega^{-1}m^{-1}$) [4]. Los resultados obtenidos son muy similares a los obtenidos con un dieléctrico sin pérdidas.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se ha desarrollado durante una estancia del primer autor en el BCAM (*Basque Center for Applied Mathematics*) en Bilbao (España) financiada por la Secretaría General Universidades del Ministerio de Educación de España (Programa Salvador de Madariaga). Los autores quieren agradecer el apoyo de Ministerio de Ciencia e Innovación de España bajo el proyecto TEC2007-65214/TCM.

Igualmente, los autores quieren agradecer a S. Llorente Romano de la Universidad Carlos III de Madrid por haber facilitado los resultados de Análisis Modal.

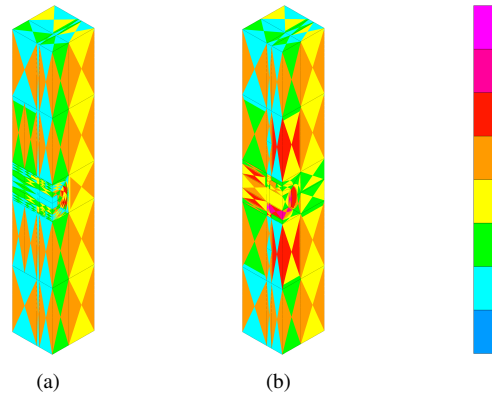


Fig. 6. Mallas obtenidas para un error relativo del 1% en la guíaonda con disco dieléctrico: (a) disco plano y (b) disco con menisco.

REFERENCES

- [1] M. Salazar-Palma, T. K. Sarkar, L. E. García-Castillo, T. Roy, and A. R. Djordjevic, *Iterative and Self-Adaptive Finite-Elements in Electromagnetic Modeling*. Norwood, MA: Artech House Publishers, Inc., 1998.
- [2] L. E. García-Castillo, D. Pardo, and L. F. Demkowicz, "Energy-norm based and goal-oriented automatic hp adaptivity for electromagnetics, application to the analysis of H-plane and E-plane rectangular waveguide discontinuities," *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 12, Part. 2, pp. 3039–3049, Dec. 2008, doi:10.1109/TMTT.2008.2007096.
- [3] I. Gómez-Revuelto, L. E. García-Castillo, D. Pardo, and L. F. Demkowicz, "A two-dimensional self-adaptive hp finite element method for the analysis of open region problems in electromagnetics," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 43, no. 4, pp. 1337–1340, Apr. 2007.
- [4] L. D. Angulo, S. G. Garcia, M. F. Pantoja, C. C. Sanchez, and R. G. Martín, "Improving the SAR distribution in petri-dish cell cultures," *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, vol. 24, no. 5-6, pp. 815–826, 2010.
- [5] L. F. Demkowicz, P. Monk, L. Vardapetyan, and W. Rachowicz, "De Rham diagram for hp finite element spaces," *Computer and Mathematics with Applications*, vol. 39, no. 7-8, pp. 29–38, 2000.
- [6] M. Ainsworth and J. Coyle, "Conditioning of hierarchic p -version nédélec elements on meshes of curvilinear quadrilaterals and hexahedra," *SIAM Journal of Mathematical Analysis*, vol. 41, no. 2, pp. 731–750, 2003.
- [7] L. F. Demkowicz, "Polynomial exact sequences and projection-based interpolation with application to maxwell equations," in *Mixed Finite Elements, Compatibility Conditions, and Applications*, D. Boffi and L. Gastaldi, Eds., vol. 1939. Springer Berlin, 2008, pp. 101–158.
- [8] W. Rachowicz, D. Pardo, and L. F. Demkowicz, "Fully automatic hp -adaptivity in three dimensions," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 195, no. 37-40, pp. 4186–4842, Jul. 2006.
- [9] L. Demkowicz, J. Kurtz, D. Pardo, M. Paszynski, W. Rachowicz, and A. Zdunek, *Computing with hp Finite Elements. II Frontiers: Three Dimensional Elliptic and Maxwell Problems with Applications*. Chapman & Hall/CRC Press, Taylor and Francis, 2008.
- [10] J. M. Melenk, K. Gerdes, and C. Schwab, "Fully discrete hp finite elements: fast quadrature," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, no. 32-33, pp. 4339–4364, May 2001.
- [11] I. Babuška and B. Guo, "Approximation properties of the hp -version of the finite element method," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 133, pp. 319–346, 1996.
- [12] S. Llorente-Romano, B. Gimeno, V. E. Boria, and M. Salazar-Palma, "Characterization of resonances by polar expansion of generalized admittance matrix," in *Accepted in Proc. 40th European Microwave Conference*, 2010.