

Una forma de aproximar el error en el método EFG

Ángel J. Martín

Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Montes
Universidad Politécnica de Madrid
Ramiro Maetzu, s/n, 28040 Madrid, España
Tel.: 34-91-336 42 96; Fax: 34-91-543 95 57
e-mail: ajmf@montes.upm.es

Luis Gavete, Beatriz Alonso y Antonio Ruiz

Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas
Universidad Politécnica de Madrid
c/Rios Rosas 21, 28003 Madrid, España
Tel.: 34-91-336 64 66; Fax: 34-91-336 32 30
e-mail: gavete@dmarn.upm.es

Resumen

Se describe un procedimiento para obtener una aproximación del error a posteriori cuando se utiliza el método de Galerkin libre de elementos (EFG), que es un método sin malla basado en la aproximación por mínimos cuadrados móviles. El método utilizado es sencillo y permite estimar el error con exactitud. Se resuelven diferentes ejemplos correspondientes al caso de la ecuación de Laplace y de elasticidad lineal.

Palabras clave: *método sin malla, mínimos cuadrados móviles, método de Galerkin libre de elementos, aproximación de error.*

A POSTERIORI ERROR APROXIMATION IN THE ELEMENT FREE GALERKIN METHOD

Summary

In this paper we present a procedure to estimate the error in the Element Free Galerkin (EFG) method, whose evaluation is computationally simple and can be readily implemented in existing EFG codes. The method is very simple in terms of economy and gives a good performance. The quality of the estimation of the error is demonstrated by numerical examples in the cases of Laplace and linear elasticity equations.

Keywords: *meshless, moving least squares, element free Galerkin method, error approximation.*

INTRODUCCIÓN

Algunos métodos sin malla han sido recientemente desarrollados. El método de elementos difusos propuesto por Nayroles *et al.*¹ es una nueva forma de resolución de ecuaciones en derivadas parciales. En este método sólo es necesaria una red de nodos y una descripción de la frontera para la implementación de la formulación de Galerkin. Las funciones se ajustan en cada posición por medio de una aproximación por mínimos cuadrados móviles ponderados.

Belytschko *et al.*² desarrollaron una implementación mejorada (método EFG o método de Galerkin libre de elementos) basada en el uso de aproximaciones por mínimos cuadrados móviles como la definida por Lancaster y Salkauskas³. Belytschko y sus colaboradores emplearon en su trabajo una estructura de celdas auxiliares para llevar a cabo la integración numérica, así como multiplicadores de Lagrange para el tratamiento de la condición de contorno esencial.

Otras formulaciones de métodos sin malla que se pueden destacar son el método de Diferencias Finitas Generalizadas (DFG) de Liszka y Orkisz⁴ y el denominado método de Puntos Finitos, desarrollado por Oñate, Idelsohn, Zienkiewicz y Taylor⁵ en el que utilizan una aproximación por mínimos cuadrados ponderados fijos junto con un método de colocación puntual, realizando aplicaciones al análisis de problemas de fluidos entre otras. El método EFG tiene algunas ventajas importantes comparadas con el Método de Elementos Finitos (MEF), ya que incluye la eliminación de algunos problemas ligados al mallado en dominios complejos además de las mejoras obtenidas en la continuidad de la solución en las derivadas. Por otra parte hay que tener en cuenta que el método de aproximación utilizado no es una interpolación, lo que implica mayor dificultad para imponer las condiciones esenciales de contorno. En este trabajo, para imponer las condiciones esenciales de contorno usamos un principio variacional restringido con una función de penalización (Gavete *et al.*⁶).

El objeto de la estimación del error para los métodos sin malla es importante para el uso real de métodos sin malla en el cálculo práctico. La contribución de este trabajo es el desarrollo de un procedimiento de aproximación del error "a posteriori" en el método EFG/penalización.

MÉTODO EFG

En el método EFG la función $u^h(\mathbf{x})$ se aproxima de forma local por

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m p_i(\mathbf{x}) a_i(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{a}(\mathbf{x}) \quad (1)$$

donde m es el número de términos de la base completa de monomios utilizada y $a_i(x)$ son sus coeficientes, los cuales, como se indica, son funciones de las coordenadas \mathbf{x} .

Los coeficientes $a_i(\mathbf{x})$ son obtenidos por medio del ajuste de mínimos cuadrados ponderados en aproximaciones locales, mediante minimización de la diferencia entre la aproximación local y la función. Partimos de

$$J = \sum_{I=1}^n w(d_I) [\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_I) \mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_I]^2 \quad (2)$$

donde $w(d_I) = w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I)$ es una función de peso con soporte compacto y

$$\mathbf{u}^T = (u_1, u_2, \dots, u_n) \quad (3)$$

Para encontrar los coeficientes \mathbf{a} , obtenemos el mínimo de J mediante

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{A}(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) - \mathbf{H}(\mathbf{x})\mathbf{u} = 0 \quad (4)$$

donde

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n(x)} w(d_i)\mathbf{p}(\mathbf{x}_i)\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_i) \quad (5)$$

$$\mathbf{H} = [w(d_1)\mathbf{p}(\mathbf{x}_1), \dots, w(d_n)\mathbf{p}(\mathbf{x}_n)] \quad (6)$$

así

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{H}(\mathbf{x})\mathbf{u} \quad (7)$$

La variable u^h puede ser expresada como

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{n(x)} \Phi_I(\mathbf{x})u_I \quad (8)$$

donde

$$\Phi_I(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{H}_I(\mathbf{x}) \quad (9)$$

con \mathbf{H}_I siendo la columna I de \mathbf{H} y $\Phi_I(\mathbf{x})$ las denominadas funciones de forma. Las derivadas primeras se calculan como

$$\frac{\partial u^h(\mathbf{x})}{\partial x} = \sum_{I=1}^{n(x)} \frac{\partial \Phi_I(\mathbf{x})}{\partial x} u_I \quad (10)$$

y las derivadas parciales $\partial \Phi_I(\mathbf{x})/\partial x$ se obtienen de acuerdo con Belytschko *et al.*².

Las fórmulas de aproximación (8) y (10) se utilizan junto con la formulación de Galerkin para resolver las ecuaciones en derivadas parciales de segundo orden que representan diferentes problemas, como la ecuación de Laplace o el problema de elasticidad lineal. En este caso, en cada punto hay que emplear ambas aproximaciones para los valores de la función (ecuación de Laplace) o bien los desplazamientos en cada punto (elasticidad).

APROXIMACIÓN DEL ERROR

Utilizaremos la clásica norma de la energía y en cada dominio de integración la evaluaremos de la misma forma que se hace en el método de elementos finitos con la aproximación del error. En este trabajo usaremos como estimador del error “a posteriori” la diferencia entre dos aproximaciones: la usada en el método EFG para calcular los gradientes (10) y otra calculada por el método de mínimos cuadrados móviles usando el desarrollo en serie de Taylor (Gavete *et al.*⁷).

Un desarrollo de Taylor alrededor de un punto $u_0 = u(x_0, y_0)$ puede ser expresado de la forma

$$u = u_0 + h \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{u_0} + k \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{u_0} + 0(\rho^2) \quad (11)$$

donde $u = u(x, y)$, $h = x - x_0$, $k = y - y_0$ y $\rho = \sqrt{h^2 + k^2}$.

La ecuación (11) y todas las fórmulas siguientes serán limitadas a las derivadas de primer orden y problemas en dos dimensiones. En cualquier caso, la extensión a otros problemas es obvia.

Consideremos la norma B

$$B = \sum_{i=1}^N \left[\left(u_0 - u_i + h_i \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{u_0} + k_i \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{u_0} \right) w_i \right]^2 \quad (12)$$

donde $u_i = u(x_i, y_i)$ (con $i = 1, \dots, N$ puntos usados como valores de la función, obtenidos por medio del método EFG con la fórmula (8)), $h_i = x_i - x_0$, $k_i = y_i - y_0$ y w_i son funciones de peso de soporte compacto usadas en el método EFG.

La solución puede ser obtenida minimizando la norma B

$$\frac{\partial B}{\partial \mathbf{D}\mathbf{u}} = 0 \quad (13)$$

$$\mathbf{D}\mathbf{u}^T = \left\{ u_0 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{u_0}, \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{u_0} \right\} \quad (14)$$

donde (14) son los valores correspondientes a un punto (x_0, y_0) de integración en el dominio.

Así llegamos a un conjunto de tres ecuaciones con tres incógnitas por cada punto.

$$\begin{pmatrix} \Sigma w_i^2 & \Sigma w_i^2 h_i & \Sigma w_i^2 k_i \\ \Sigma w_i^2 h_i & \Sigma w_i^2 h_i^2 & \Sigma w_i^2 h_i k_i \\ \Sigma w_i^2 k_i & \Sigma w_i^2 h_i k_i & \Sigma w_i^2 k_i^2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} u_0 \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{u_0} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{u_0} \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma u_i w_i^2 \\ \Sigma u_i w_i^2 h_i \\ \Sigma u_i w_i^2 k_i \end{pmatrix} \quad (15)$$

Resolviendo y calculando los valores de u_i ($i = 1, \dots, n$) en los nodos del dominio por el método EFG, calculamos las primeras derivadas usando la fórmula (15), considerando los r puntos ($r \geq 2$) para cada cuadrante en el área vecina de cada uno de los puntos de integración (tomando cada punto de integración como origen de coordenadas), usando el criterio de cuatro cuadrantes (Figura 1).

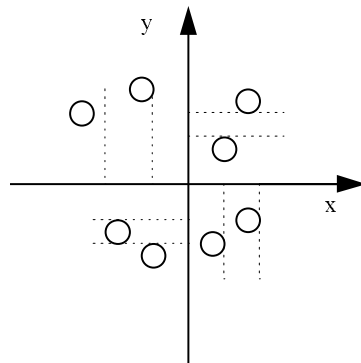


Figura 1. Criterio de los cuatro cuadrantes, con $r = 2$

El error en términos de norma de la energía se calcula de la siguiente forma, teniendo en cuenta que en cada punto de integración tenemos dos conjuntos de valores diferentes de las derivadas primeras; uno obtenido por el método EFG $\boldsymbol{\varepsilon}$ y el otro $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ usando la fórmula (15) y la Figura 1.

$$\|e\|_{\Omega_i}^2 = \left[\int_{\Omega_i} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^e)^T \mathbf{D} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^e) d\Omega \right] \quad (16)$$

$$\|w\|_{\Omega_i}^2 = \left(\int_{\Omega_i} \boldsymbol{\varepsilon}^{eT} \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}^e d\Omega \right) \quad (17)$$

donde \mathbf{D} es la matriz constitutiva del material que es función del módulo de elasticidad E y de la relación de Poisson ν en el caso de elasticidad lineal, y en general, de los coeficientes que multiplican a las derivadas de segundo orden en las ecuaciones en derivadas parciales, como las ecuaciones de Laplace o Poisson. Aunque la norma es definida para todo el dominio, señalamos que su cuadrado puede ser obtenido como sumatorio de cada contribución de las celdas de integración Ω_i , en que se ha dividido el dominio. Así

$$\|e\|_{\Omega}^2 = \sum_i \|e\|_{\Omega_i}^2 \quad \|w\|_{\Omega}^2 = \sum_i \|w\|_{\Omega_i}^2 \quad (18)$$

El error relativo ν y el índice de efectividad θ están definidos por

$$\nu = 100 \frac{\|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{w}\|} \quad \theta = \frac{\|e\|}{\|E\|} \quad (19)$$

donde $\|E\|$ es el error exacto.

RESULTADOS NUMÉRICOS

Para mostrar el comportamiento del estimador del error, se estudiarán las ecuaciones de Laplace y de la elasticidad en algunos casos con solución analítica conocida. Las siguientes funciones de peso han sido las empleadas en las pruebas realizadas:

a) Función de peso polinomial (*spline* cuártica):

$$w_i(d) = \begin{cases} 1 - 6 \left(\frac{d}{dm}\right)^2 + 8 \left(\frac{d}{dm}\right)^3 - 3 \left(\frac{d}{dm}\right)^4 & d \leq dm \\ 0 & d > dm \end{cases} \quad (20)$$

b) Función de peso polinomial (*spline* cúbica):

$$w_i(d) = \begin{cases} \frac{2}{3} - 4 \left(\frac{d}{dm}\right)^2 - 4 \left(\frac{d}{dm}\right)^3 & \text{para } d \leq \frac{1}{2}dm \\ \frac{4}{3} - 4 \left(\frac{d}{dm}\right) + 4 \left(\frac{d}{dm}\right)^2 - \frac{4}{3} \left(\frac{d}{dm}\right)^3 & \text{para } \frac{1}{2}dm < d \leq dm \\ 0 & \text{para } d > dm \end{cases} \quad (21)$$

donde $d = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$ y dm es el radio de influencia.

Se ha utilizado el método EFG con funciones de forma lineales y principios variacionales con funciones de penalización (parámetro de penalización $\alpha = 10^{15}$), tal y como se describe en Gavete *et al.*⁶ para forzar las condiciones de contorno esenciales.

a) Domino en forma de L

A continuación se resuelve un problema con una singularidad en la esquina. Se considera la ecuación de Laplace en un dominio en forma de L, con el origen de coordenadas en la esquina no convexa. Los lados del contorno que parten del origen de coordenadas cumple las condiciones de contorno homogéneas de Dirichlet, mientras que el resto de los lados cumple condiciones de contorno no homogéneas (Figura 2). Se escogen las condiciones de contorno de tal forma que la solución exacta es $u(r, \theta) = r^2/3 \sin(2\theta/3)$ en coordenadas polares centradas en el origen. Éste es un caso típico de singularidad en el origen. Se utiliza el conocimiento de la solución exacta para evaluar el comportamiento del método de aproximación del error, con dos casos de distribución regular de puntos (Figura 2), utilizando las funciones de peso previamente definidas. El radio de influencia r_{inf} ha sido calculado mediante $r_{inf} = \alpha d_I$, donde d_I es la distancia al tercer nodo más cercano al nodo I y α es una constante de valor 2.

Los resultados obtenidos mediante el estimador del error utilizando funciones de peso (20) y (21) son los que reflejan las Figuras 3 y 4, respectivamente. El índice de efectividad se representa en la Figura 5 y las desviaciones de los índices de efectividad para cada celda de integración en el caso de función de peso *spline* cuártica se muestran en la Figura 6.

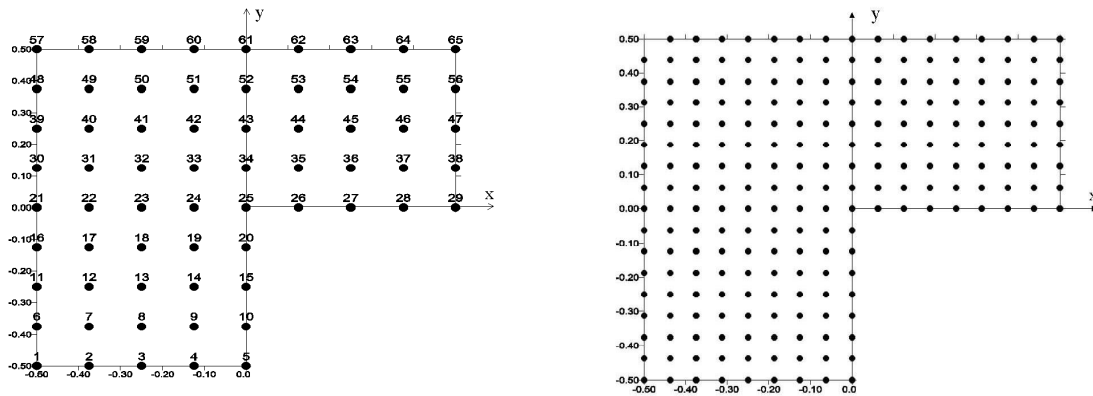


Figura 2. Dominio en forma de L con mallas regulares. A y B

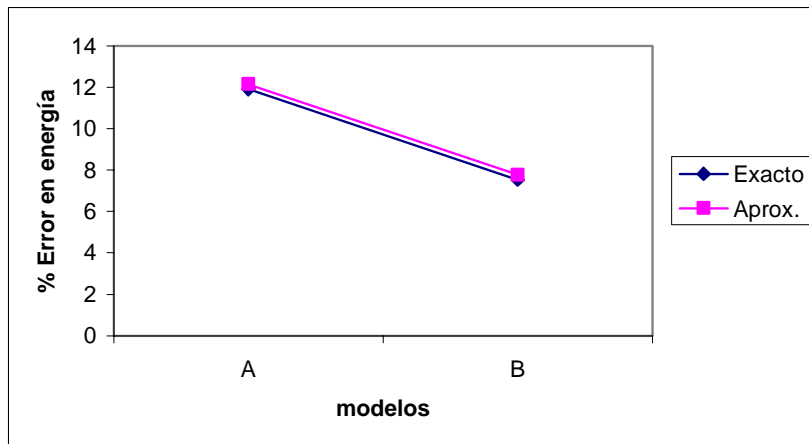


Figura 3. Estimador del error. *Spline* cuártica. Orden de integración 4×4

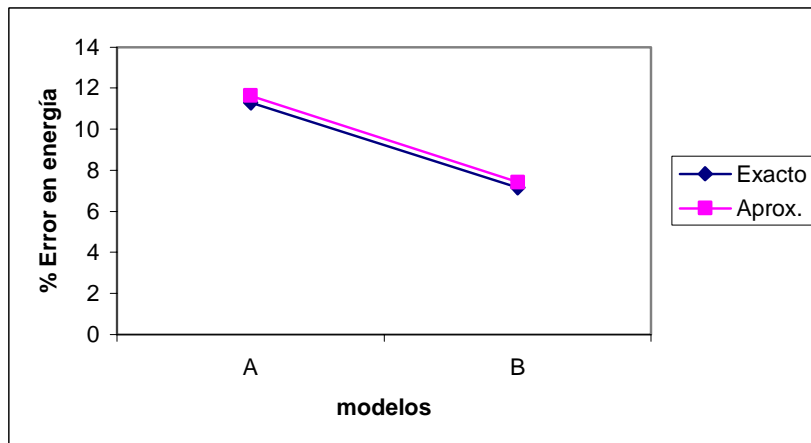


Figura 4. Estimador del error. *Spline* cúbica. Orden de integración 4×4

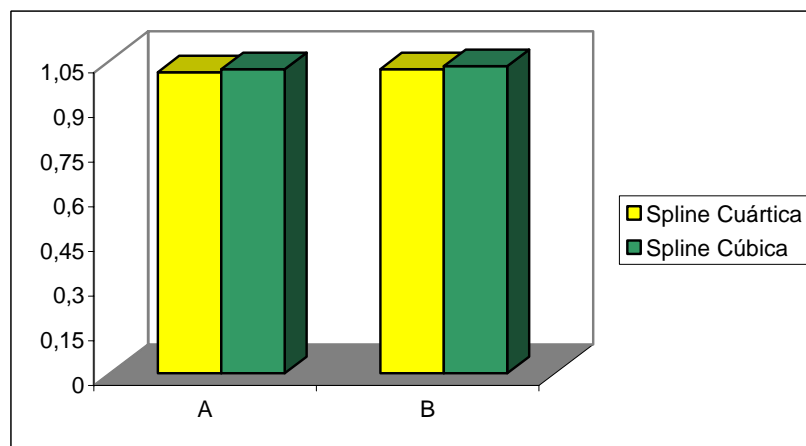


Figura 5. Índice de efectividad

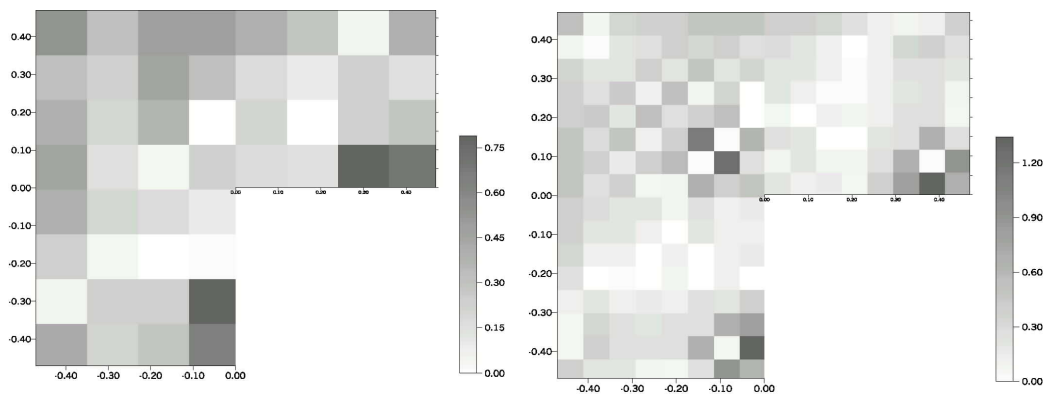


Figura 6. Desviaciones del índice de efectividad

b) Caso de solución logarítmica

Se considera a continuación como solución de la ecuación de Laplace

$$u = \log(x^2 + y^2) \quad (22)$$

siendo $\Omega =]0, 01; 1, 01[\times]0, 01; 1, 01[$.

En la Figura 7 se muestran diferentes nubes de nodos así como las celdas de integración.

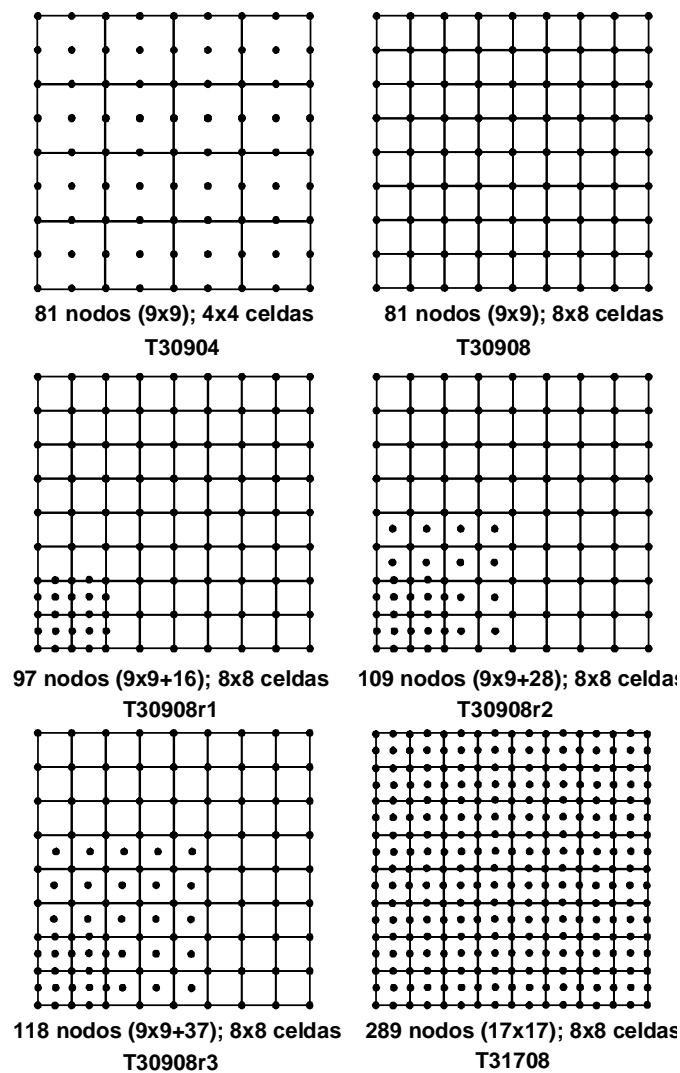


Figura 7. Nubes de puntos y celdas de integración

Se han llevado a cabo pruebas en un conjunto de modelos consecutivamente refinados para comprobar el comportamiento del estimador de error. La Figura 7 muestra cada una de las mallas utilizadas. En este caso el radio de influencia ha sido calculado mediante $r_{\text{inf}} = \alpha d_I$, donde d_I es la distancia al tercer nodo más cercano al nodo I y α es una constante de valor 2. Cada modelo ha sido diseñado con un grado de refinamiento creciente respecto del anterior modelo (Figura 7). Los resultados han quedado reflejados en las Figuras 8, 9 y 10.

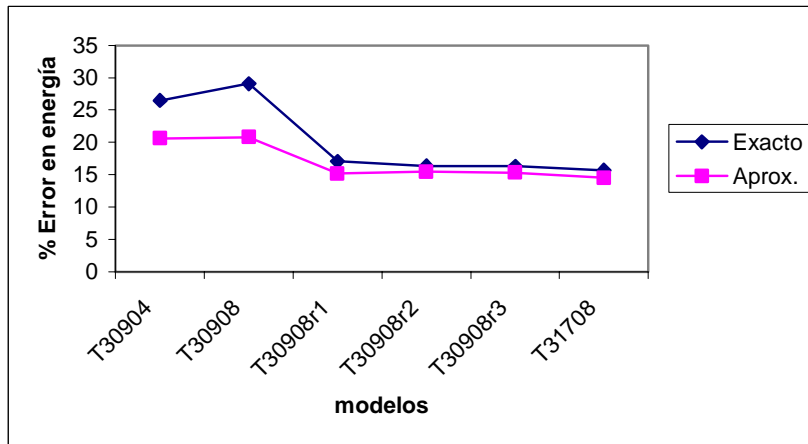


Figura 8. Estimación del error. *Spline* cuártica

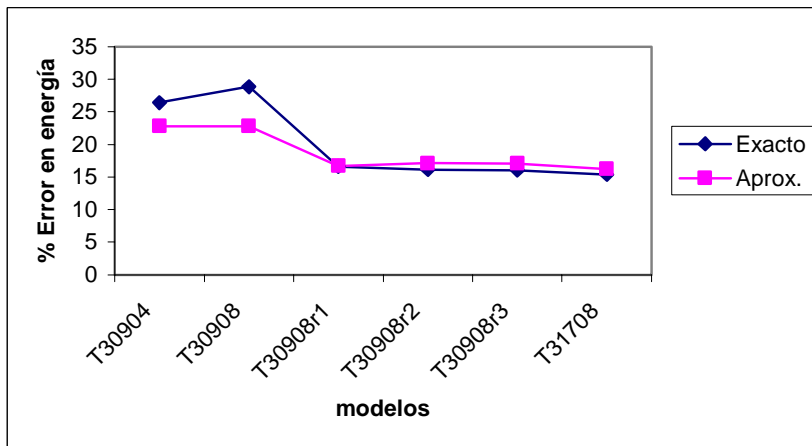


Figura 9. Estimador del error. *Spline* cúbica

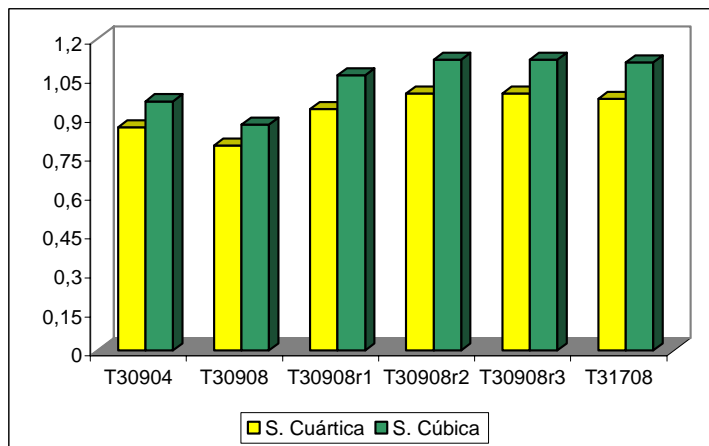


Figura 10. Índice de efectividad

A pesar de que todos los resultados se han mostrado consecutivamente, los modelos refinados sucesivamente han sido escogidos haciendo uso de la estimación del error y de los resultados obtenidos en los modelos previos.

El índice de efectividad global representa el comportamiento del estimador del error global. Sería deseable que el estimador del error facilitara no sólo una aproximación del error global fiable, sino también una aproximación fiable del error en cada celda, lo cual es particularmente importante para el refinamiento en análisis adaptativos.

Las desviaciones de los índices de efectividad para cada uno de los modelos de la Figura 7 se ilustran en la Figura 11 para el caso de función de peso Spline cuártica.

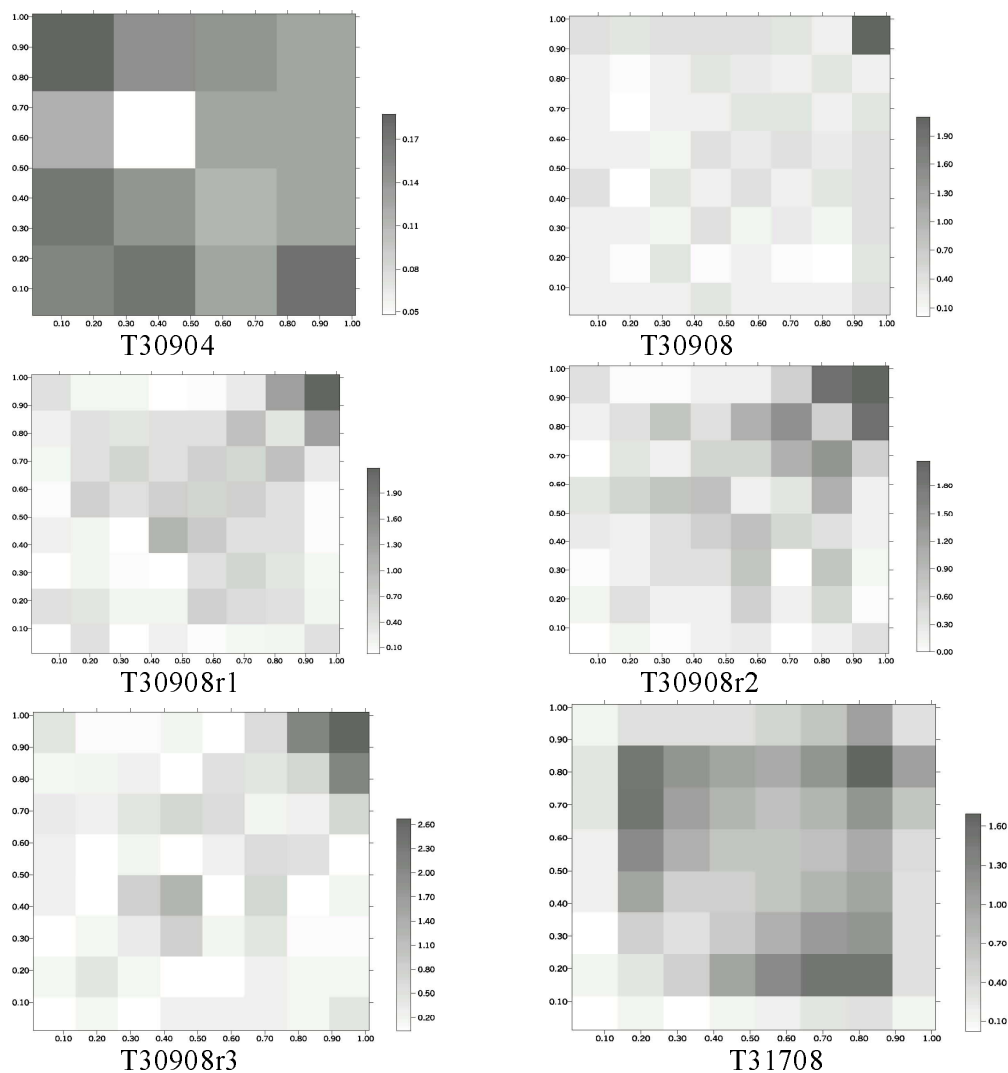


Figura 11. Desviaciones de los índices de efectividad para el estimador del error

En las Figuras 12, 13 y 14 pueden observarse los resultados obtenidos utilizando, al mismo tiempo, radio de influencia variable y tamaños variables de las celdas de integración en función de la densidad local de los nodos, con un orden de integración 4×4 para el estimador del error. Se han aplicado como límites para la división de las celdas de 9 y 30 nodos en 4 y 16 subceldas, respectivamente.

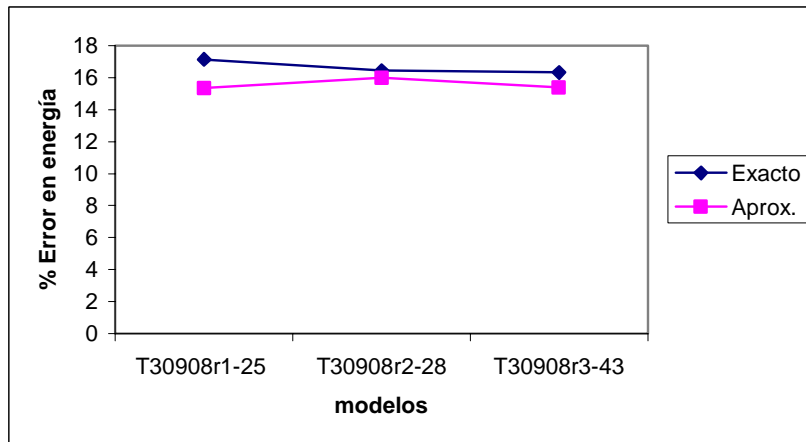


Figura 12. Estimador del error. *Spline* cuártica. Número de celdas variable

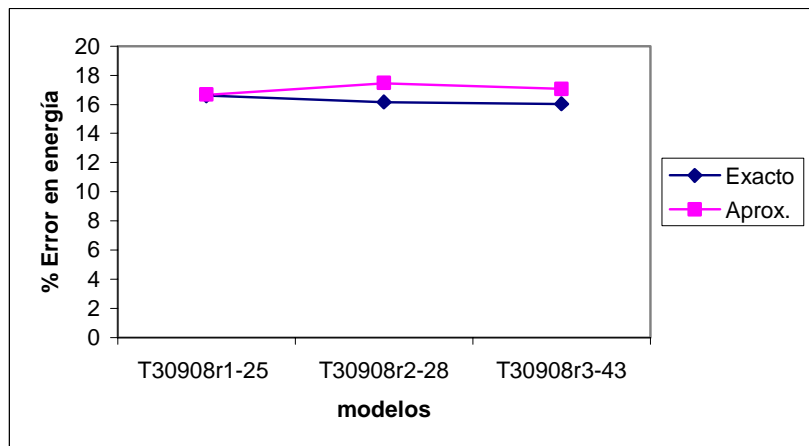


Figura 13. Estimador del error. *Spline* cúbica. Número de celdas variable

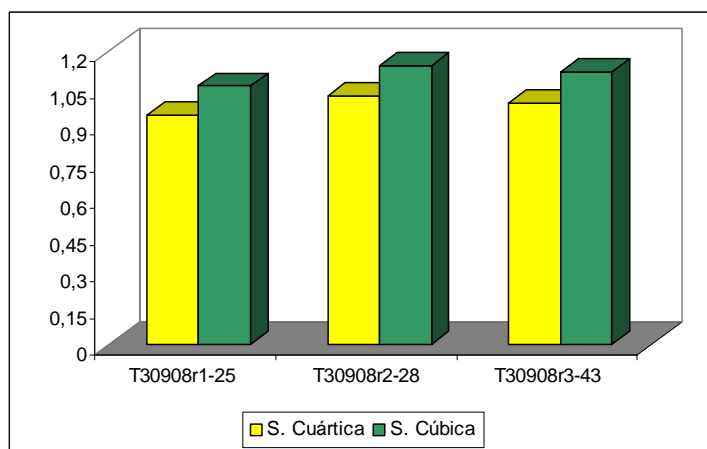


Figura 14. Índice de efectividad

c) Caso de placa con agujero

A continuación se ha estudiado un caso de elasticidad lineal con la función de peso Spline cuártica. La solución exacta para una placa infinita con un agujero sometido a tracción uniforme en la dirección del eje x se presenta en Timoshenko y Goodier⁸.

Sólo se modeliza el cuadrante superior del problema, como se muestra en la Figura 15, con dimensiones $a = 1$ y $b = 5$. Se utilizan los parámetros siguientes: $E = 1000$, $\nu = 0,3$ con condiciones de deformación plana. Los desplazamientos correspondientes a la solución exacta se aplican en la frontera del modelo. Se utilizan tres discretizaciones de 30, 72 y 255 nodos, como se muestra en la Figura 16. Se utilizan celdas de integración triangulares con siete puntos de integración. El radio del dominio de influencia r_{inf} se calcula con $r_{inf} = \alpha d_I$, siendo d_I la distancia al cuarto nodo más cercano al nodo I y α se fija con valor 1,5. Los resultados obtenidos se presentan en las Figura 17 y 18.

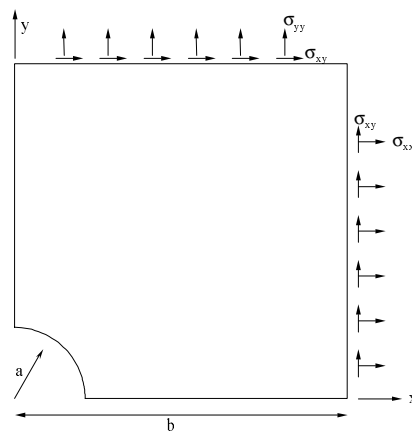


Figura 15. Placa con agujero

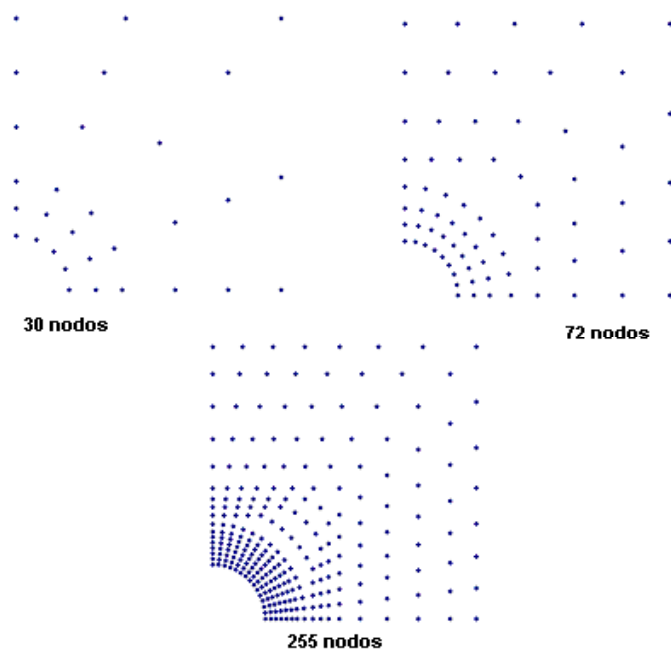


Figura 16. Modelos utilizados

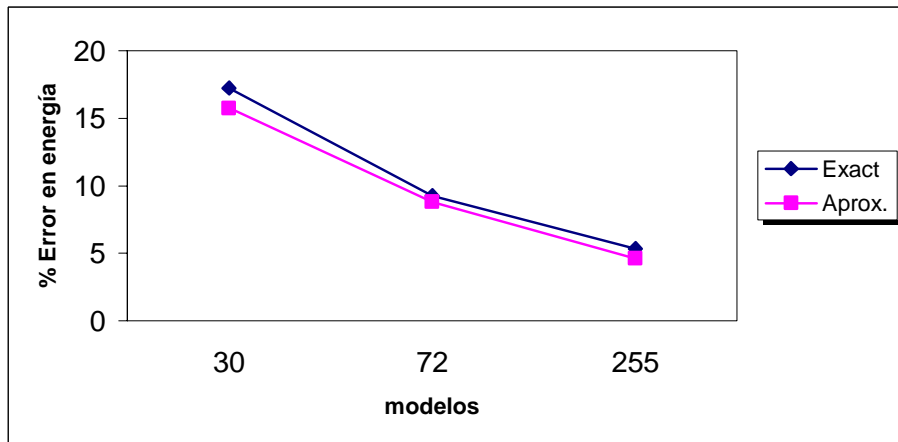


Figura 17. Error (%) en norma de la energía

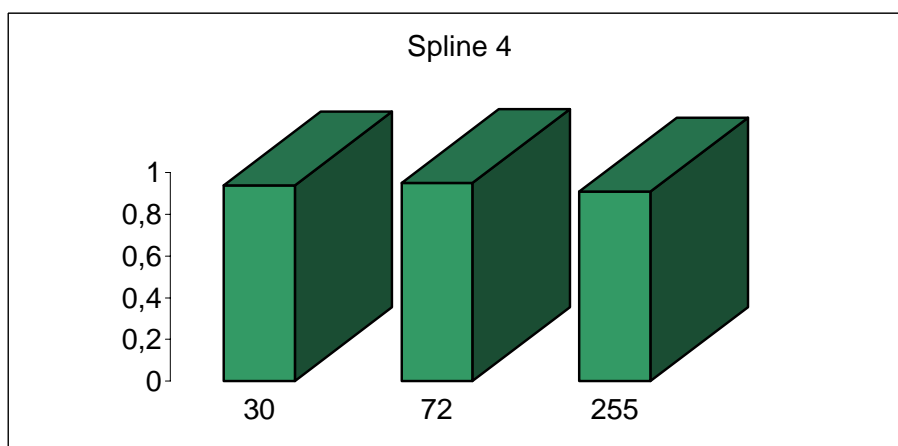


Figura 18. Índice de efectividad

El error relativo y el índice de efectividad se pueden determinar para cada celda de integración. La desviación del índice de efectividad se define como

$$d_i = |1 - \theta_i| \quad (23)$$

Definimos el índice de calidad de la aproximación local del error como:

$$QI = \frac{100 \sum_{i=1}^{i=nc} r_i}{nc} \quad (24)$$

siendo nc el número de celdas de integración, $r_i = 1$ si $d_i < 0,4$ y $r_i = 0$ si $d_i \geq 0,4$.

El índice de calidad de la aproximación local del error para cada uno de los modelos de la Figura 16, viene dado en la Figura 19, donde un pequeño círculo negro se ha incluido en el centro de las celdas de integración con $d_i < 0,4$, ($i = 1, \dots, nc$).

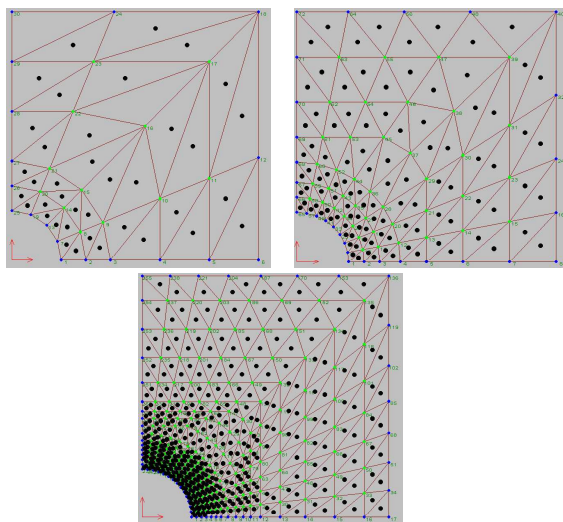


Figura 19. Celdas con $d_i < 0,4$

CONCLUSIONES

En el método EFG es obviamente importante que la aproximación del error pueda ser estimada. El procedimiento descrito en este trabajo es sencillo y puede ser aplicado a diferentes ecuaciones en derivadas parciales, como el caso de elasticidad lineal y la ecuación de Laplace. El cálculo de la aproximación del error se realiza con exactitud. Los resultados numéricos obtenidos muestran que el índice de efectividad es razonablemente cercano a la unidad.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el soporte recibido de proyecto CGL 2004-04095/CLI.

REFERENCIAS

- 1 B. Nayroles, G. Touzot y P. Villon, "Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements", *Computational Mechanics*, Vol. **10**, pp. 307–318, (1992).
- 2 T. Belytschko, Y.Y. Lu y L. Gu, "Element-free Galerkin Methods", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. **37**, pp. 229–256, (1994).
- 3 P. Lancaster y K. Salkauskas, "Surfaces generated by moving least squares methods", *Math. Comput.*, Vol. **37**, pp. 141–158, (1981).
- 4 J. Liszka y Orkisz, "The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics", *Computers and Structures*, Vol. **11**, pp. 83–95 (1980).
- 5 E. Oñate, S. Idelsohn, O.C. Zienkiewicz y R.L. Taylor, "A finite point method in computational mechanics. Applications to convective transport and fluid flow", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. **39**, pp. 3839–3866, (1996).
- 6 L. Gavete, J.J. Benito, S. Falcon y A. Ruiz, "Implementation of essential boundary conditions in a meshless method", *Communications in Numerical Methods in Engineering*, Vol. **16**, pp. 409–421, (2000).
- 7 L. Gavete, J.L. Cuesta y A. Ruiz, "A procedure for approximation of the error in the EFG method", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. **53**, pp. 677–690, (2002).
- 8 S. Timoshenko y J.N. Goodier, "*Theory of Elasticity*", McGraw-Hill, (1987).