

MÉTODOS ADAPTATIVOS DE ELEMENTOS FINITOS CON SOLUCIONES INEXACTAS

Gloria Simonetti^a, Amal Azzam^a y Carlos Zuppa^a

^a*Departamento de Matemática, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco 917, 5700 San Luis, Argentina*

Palabras clave: Método adaptivo, elementos finitos, solución inexacta.

Resumen. Analizamos aquí el caso más simple y estandar del método adaptivo de elementos finitos con soluciones finitas inexactas donde las soluciones se obtienen mediante algún método iterativo. A pesar de la expectativa de ahorro en el trabajo computacional, los experimentos numéricos muestran que asintóticamente el cálculo con las soluciones exactas continua siendo el más eficiente.

1. INTRODUCCION

En las últimas décadas, la adaptatividad de mallas ha adquirido una importancia cada vez más relevante para mejorar la precisión de los resultados numéricos en diversos problemas científicos y de ingeniería. La idea básica es refinar la malla solamente en los lugares donde el indicador de error es alto con el propósito de obtener mayor precisión en la solución usando un número óptimo de grados de libertad.

Sea Ω un dominio acotado en \mathbb{R}^d , $d \geq 2$, con frontera Lipschitz $\partial\Omega$. Consideraremos el problema modelo de Dirichlet con condiciones de borde homogéneas:

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\mathbf{A} \nabla u) &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= 0 && \text{on } \partial\Omega, \end{aligned} \quad (1)$$

con solución exacta $u_{\mathcal{L}}$, where $\mathbf{A} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ is Lipschitz, la matriz $\mathbf{A}(x)$ es simétrica con autovalores entre $0 < a_* \leq a^* < \infty, \forall x \in \bar{\Omega}$.

Suponemos que Ω es poliedral particionado por una triangulación conforme \mathcal{T}_0 . En lo sucesivo, cualquier triangulación conforme \mathcal{T} que consideremos, es derivada de \mathcal{T}_0 a través de refinamientos por bisección. Denotaremos con $\{x_{\mathcal{T},i}\}_{i=1}^N$ el conjunto de nodos de la triangulación \mathcal{T} y, dado cualquier elemento $T \in \mathcal{T}$, h_T es la longitud $|T|^{1/d}$.

El espacio de elementos finitos asociado es

$$\mathbb{V}(\mathcal{T}) := \{V \in H^1(\Omega) \mid V|_T \in \mathbb{P}_1(T), T \in \mathcal{T}, V|_{\partial\Omega} \equiv 0\},$$

donde \mathbb{P}_1 es el espacio de polinomios de grado ≤ 1 .

La aproximación numérica en forma débil del problema (1) consiste en encontrar $U_{\mathcal{T}} \in \mathbb{V}_{\mathcal{T}}$ tal que

$$\mathcal{B}[U_{\mathcal{T}}, V] := \int_{\Omega} \mathbf{A} \nabla U_{\mathcal{T}} \cdot \nabla V = \int_{\partial\Omega} f V, \quad \forall V \in \mathbb{V}_{\mathcal{T}}. \quad (2)$$

Para $\bar{\omega} \subset \Omega$ y $u \in H^1(\bar{\omega})$, denotamos $\|u\|_{\mathcal{B},\bar{\omega}} := \mathcal{B}[u, u]^{1/2}$. $\|u \cdot\|_{\mathcal{B}} := \|u\|_{\mathcal{B},\Omega}$ es una norma equivalente a la standard de $H^1(\Omega)$.

La versión adaptativa de FEM consiste en el ciclo (Morin et al., 2007)

RESOLVER \rightarrow **ESTIMAR** \rightarrow **MARCAR** \rightarrow **REFINAR**.

ESTIMAR: el estimador de error *a posteriori* en este trabajo es el Residual standard.

$$\eta_{\mathcal{T}}^2(U_{\mathcal{T}}) := \sum_{T \in \mathcal{T}} \eta_{\mathcal{T}}^2(T, U_{\mathcal{T}}),$$

MARCAR: el marcado de los triángulos que se han de refinar se efectua de acuerdo al ya clásico procedimiento en (Dörfler, 1996) quien fue el primero en demostrar convergencia del ciclo de adaptatividad en el caso multidimensional: se elige un subconjunto \mathcal{S} de \mathcal{T} tal que

$$\sum_{T \in \mathcal{S}} \eta_{\mathcal{T}}^2(T, U_{\mathcal{T}}) \geq \theta^2 \eta_{\mathcal{T}}^2(U_{\mathcal{T}}),$$

donde $0 < \theta < 1$.

Iterando este proceso se obtiene una sucesión $(\mathcal{T}_n, U_{\mathcal{T}_n})_{n>0}$ tal que $\mathcal{T}_0 \leq \mathcal{T}_1 \leq \dots \leq \mathcal{T}_n \leq \dots$ y

$$\|u_{\mathcal{L}} - U_n\|_{H^1(\Omega)} \rightarrow 0.$$

En cada uno de los pasos, se debe resolver el sistema algebraico lineal (2) y esta es la parte computacional más costosa.

En este trabajo estudiamos el proceso adaptativo con soluciones del sistema finito inexactas o aproximadas $\tilde{U}_n := U_n + \xi_n$, $\xi_n \in \mathbb{V}(\mathcal{T}_n)$. Tenemos en mente la resolución por métodos iterativos de un sistema lineal, por ejemplo el método BICGSTAB (bi-gradiente conjugado estabilizado) (van der Vorst, 1992), de manera que \tilde{U}_n se obtiene parando el método iterativo después de unas pocas iteraciones, con el objetivo de arribar con el menor costo computacional a una malla óptima para el cálculo exacto con un error estimado.

En este trabajo explicitamos una condición suficiente de manera que el esquema adaptativo converge con soluciones inexactas. Esta cuestión también fue tratada en (Stevenson, 2007), pero nuestra condición es más explícita y se expresa en la forma:

$$\mathcal{B}[\xi_{n+1}, \xi_{n+1}] \leq \beta_{n+1} \mathcal{B}[\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n],$$

con constantes adecuadas β_n .

Desde un punto de vista computacional sin embargo, es difícil relacionar, como explicaremos más adelante, el término $\mathcal{B}[\xi_{n+1}, \xi_{n+1}]$ con el residual relativo de los esquemas iterativos. Como alternativa, en este trabajo estudiamos experimentalmente relajaciones de la tolerancia para obtener la solución \tilde{U}_{n+1} , con condición inicial \tilde{U}_n . Los resultados experimentales muestran que con una tolerancia relativamente grande, por ejemplo 1.0e-3, el esquema iterativo realiza muy pocas iteraciones y la solución obtenida es excelente para el estimador de error y marca adecuadamente los elementos que necesitan refinamiento. Esto permite avanzar en el esquema adaptativo con muy poco gasto computacional hasta obtener una malla adecuada \mathcal{T}_N con un tolerancia del estimador de error prefijada. Esto es, el estimador de error para \tilde{U}_n proporciona resultados similares en eficacia al de la solución exacta U_n , $n = 0, \dots, N-1$. Llegados a este punto se calcula la solución exacta U_N . Es posible conjeturar entonces que utilizando este esquema arribamos a la solución U_N con trabajo computacional sensiblemente menor.

Sin embargo, los experimentos numéricos indican que el trabajo computacional total es asintóticamente más eficiente cuando se resuelve exactamente en cada paso. Esto es, cuando se usan esquemas iterativos para la solución del sistema algebraico, la resolución exacta en cada paso de la adaptatividad es aconsejable y no tiene los problemas teóricos asociados a la resolución inexacta. Esto se debe fundamentalmente a que en este caso el número de iteraciones para la solución del problema algebraico se mantiene estable.

2. ADAPTATIVIDAD CON SOLUCIONES INEXACTAS

Para el análisis de la convergencia del proceso adaptativo, la siguiente condición de ortogonalidad juega un rol importante:

$$\mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - U_n, u_{\mathcal{L}} - U_n] = \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - U_{n+1}, u_{\mathcal{L}} - U_{n+1}] + \mathcal{B}[U_{n+1} - U_n, U_{n+1} - U_n].$$

Esta igualdad claramente no se verifica si usamos en cambio \tilde{U}_n . En efecto

$$\begin{aligned} \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_n, u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_n] &= \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}, u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}] + \mathcal{B}[\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n] \\ &\quad + 2\mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n]. \end{aligned}$$

Procederemos ahora a calcular el molesto término residual

$$\begin{aligned} \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n] &= \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - U_{n+1} - \xi_{n+1}, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n] \\ &= -\mathcal{B}[\xi_{n+1}, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n], \end{aligned}$$

ya que $u_{\mathcal{L}} - U_{n+1}$ es ortogonal a $\mathbb{V}(\mathcal{T}_{n+1})$ y $\tilde{U}_n \in \mathbb{V}(\mathcal{T}_{n+1})$.

Por Cauchy-Schwartz, tenemos

$$|\mathcal{B}[\xi_{n+1}, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n]| \leq \mathcal{B}[\xi_{n+1}, \xi_{n+1}]^{1/2} \mathcal{B}[\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n]^{1/2}.$$

Así que, si

$$\mathcal{B}[\xi_{n+1}, \xi_{n+1}]^{1/2} \leq \beta_{n+1} \mathcal{B}[\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n]^{1/2}, \tag{3}$$

obtenemos

$$2|\mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n]| \leq 2\beta_{n+1} \mathcal{B}[\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n].$$

En consecuencia,

$$\begin{aligned} \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_n, u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_n] &\geq \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}, u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}] + \mathcal{B}[\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n] \\ &\quad - 2|\mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n]| \\ &\geq \mathcal{B}[u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}, u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_{n+1}] + \gamma_{n+1} \mathcal{B}[\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n, \tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n], \end{aligned}$$

donde hemos puesto $\gamma_{n+1} = 1 - 2\beta_{n+1}$.

Nota 1 En el paso $n + 1$, la solución \tilde{U}_{n+1} se obtiene mediante la iteración del método iterativo que estamos utilizando, por ejemplo BICGSTAB, con condición inicial \tilde{U}_n . Como la solución iterada tiende a la solución exacta U_{n+1} y $\mathcal{B}[\xi_{n+1}, \xi_{n+1}]^{1/2}$ es el residual, salvo en el caso singular donde se verifica $U_{n+1} = \tilde{U}_n$, con un número suficiente de iteraciones es siempre posible obtener la condición (3) con β_{n+1} tan chico como se quiera.

Cuando $\beta_n \rightarrow 0$, es de esperar que el comportamiento del proceso adaptativo con las soluciones inexactas cumple las mismas condiciones de convergencia que el normal. De hecho, usando técnicas del trabajo (Morin et al., 2007) es posible probar:

Teorema 2 Sea $U_0 = \tilde{U}_0$ la solución exacta del problema finito en \mathcal{T}_0 y $(\mathcal{T}_n, \tilde{U}_n, \beta_n)_{n \geq 1}$ la tripleta obtenida por el proceso adaptativo de manera que $\beta_n \leq 1/4$. Entonces el proceso converge, esto es

$$\|u_{\mathcal{L}} - \tilde{U}_n\|_{H^1(\Omega)} \rightarrow 0.$$

La prueba de este resultado será objeto de un trabajo próximo.

Desde un punto de vista computacional sin embargo, la verificación de la condición (3) ofrece una dificultad: sea

$$B_n U = F_n$$

el sistema algebraico asociado a (2) en el paso enésimo. Salvo eventuales errores en la integración numérica, tenemos

$$\mathcal{B}[\xi_n, \xi_n] = B_n \xi_n \cdot \xi_n,$$

y no disponemos explícitamente de esta cantidad.

En los esquemas iterativos solo podemos calcular el residual

$$R(\tilde{U}_n) = B_n \tilde{U}_n - F_n = B_n (\tilde{U}_n - U_n) = B_n \xi_n,$$

pero no conocemos ξ_n .

Efectuaremos entonces experimentos numéricos con la relajación de la tolerancia en el residual relativo.

3. EXPERIMENTOS NUMERICOS

Discutiremos aquí la evolución del ciclo de adaptatividad para resolver numéricamente diversos modelos bidimensionales. Los modelos que hemos usado son

3.1. Modelo 1

Problema de Dirichlet:

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\mathbf{A} \nabla u) &= f & \text{in } \Omega = (0, 1) \times (0, 1), \\ u|_{\partial\Omega} &= \bar{u}, \end{aligned}$$

donde f es elegida de manera que la solución exacta es

$$\bar{u}(x, y) = \arctan(50xy - 0,5).$$

3.2. Modelo 2

Dominio L: problema de Dirichlet

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\mathbf{A} \nabla u) &= f & \text{en } \Omega, \\ u|_{\partial\Omega} &= \bar{u}, \end{aligned}$$

en el dominio $\Omega = (-1, 1)^2 \setminus [0, 1]^2$ con solución exacta

$$\bar{u}(r, \theta) = r^{\frac{2}{3}} \sin\left(\frac{2}{3}\theta\right).$$

3.3. Modelo 3. Problema de fractura

Consideramos el problema de Dirichlet

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\mathbf{A} \nabla u) &= f & \text{en } \Omega, \\ u|_{\partial\Omega} &= \bar{u}, \end{aligned}$$

en el dominio $\Omega = \{|x| + |y| < 1\} \setminus \{0 \leq x \leq 1, y = 0\}$, con solución exacta, escrita en coordenadas polares,

$$\bar{u}(r, \theta) = r^{\frac{1}{2}} \sin \frac{\theta}{2} - \frac{1}{4} r^2.$$

Nota 3 Como es típico, debemos resolver la singularidad del borde $(0, 1] \times \{0\}$ mediante la duplicación de nodos en \mathcal{T}_0 e impidiendo la conexión de elementos en ese segmento.

En los experimentos hemos utilizado

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a(x, y) & 0 \\ 0 & a(x, y) \end{pmatrix},$$

con $a(x, y) = 5 - x^2 - y^2$.

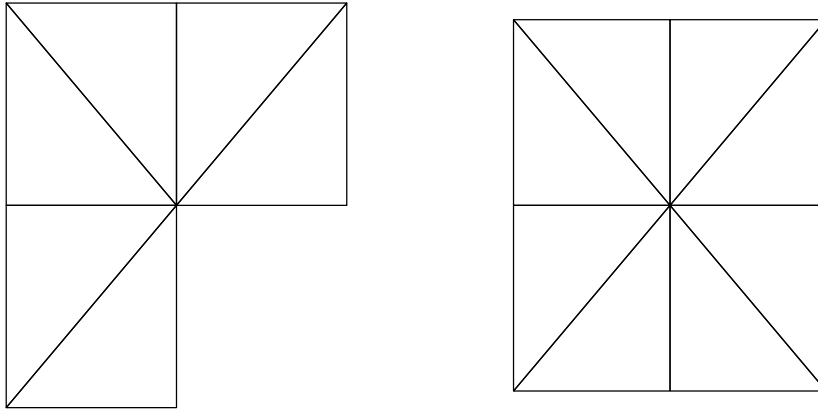


Figura 1: Malla inicial modelos 2,1

3.4. Las mallas \mathcal{T}_0 de inicio del ciclo de adaptatividad

En todos los casos las mallas de partida son realmente minimales.

La figura 1 muestra las mallas \mathcal{T}_0 para los modelos 2 y 1 respectivamente.

De igual modo, para el modelo 3 usamos una malla de partida minimal cuyos nodos son exactamente los puntos que definen el dominio.

3.5. Resolución del sistema algebraico

Resolvemos el sistema $B_n \tilde{U}_n = F_n$ mediante el método iterativo BICGSTAB con condición inicial la prolongación de \tilde{U}_{n-1} con tolerancia para el residual relativo igual a

$$tole(n) = (1 - \alpha_n)1,0e - 3 + \alpha_n 1,0e - 8,$$

$0 \leq \alpha_n \leq 1$. La elección $\alpha_n = 1$ es la solución exacta.

La elección $\alpha_n = 0$ genera en general pocas iteraciones y produce una solución aproximada \tilde{U}_n que es apropiada para la estimación de error y marcar los elementos que deben ser refinados.

Al número de iteraciones que realiza BICGSTAB en el paso n -ésimo lo denotaremos con $Ib(n)$.

3.6. Descripción del experimento

Fijada una tolerancia TLE para el error del estimador, efectuamos el proceso adaptativo hasta la condición de parada $\eta(\mathcal{T}_N) \leq TLE$, con diversas elecciones de $tole(n)$. Llegado a este punto, dejamos correr BICGSTAB hasta encontrar la solución finita exacta.

En el inicio del ciclo partimos también de la solución exacta, esto es, $\tilde{U}_0 = U_0$.

El trabajo computacional se calcula de la manera siguiente:

$$Work := \sum_{n=1}^N NZ(n) \cdot Ib(n),$$

donde $NZ(n)$ es la cantidad de elementos no nulos de la matriz rala B_n . Las elecciones de α_n , $1 \leq n \leq N - 1$, se realizaron de estas tres formas:

- Inexacto: $\alpha_n = 0$.
- Variable: $\alpha_n = TLE/\eta_n$.
- Exacto: $\alpha_n = 1$.

3.7. Resultados

Nota 4 En todos los modelos se verifican las mismas propiedades que queremos remarcar, así que mostraremos gráficas solamente para uno de ellos.

El primer resultado experimental sorprendente que queremos remarcar aquí, y que seguramente requiere ser investigado con cuidado, es que aún en el caso inexacto, cuando BICGSTAB realiza generalmente pocas iteraciones, el estimador de error $\eta_{\mathcal{T}_n}^2(\tilde{U}_n)$ es casi idéntico al estimador del proceso exacto $\eta_{\mathcal{T}_n}^2(U_n)$ y el marcado de elementos para refinar es adecuado. Esto sucede aunque claramente el error energía no cumple esta propiedad. La figura 2 tipifica en un ejemplo este comportamiento.

La figura 3 muestra en escala logarítmica el comportamiento típico de la evolución del trabajo computacional

Los resultados obtenidos muestran que el método adaptativo con soluciones exactas es asintóticamente más eficiente. En todo caso, el eventual ahorro en el trabajo computacional no es significativo frente a las complicaciones teóricas de los métodos inexactos. La figura 4 muestra la evolución típica del número de iteraciones que realiza BICGSTAB, mientras que en el caso inexacto este número crece radicalmente en el último paso (el cálculo de la exacta final), en el caso exacto se mantiene estable.

REFERENCIAS

- Willy Dörfler. A convergent adaptive algorithm for poisson's equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33:1106–1124, 1996.
- P. Morin, K. G. Siebert, y A. Veese. A basic convergence result for conforming adaptive finite element methods. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 18:707–737, 2007.
- Rob Stevenson. Optimality of a standard adaptive finite element method. *Found. Comput. Math.*, 7/2:245–269, 2007.
- H. A. van der Vorst. Bi-cgstab: A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13/2:631–644, 1992.

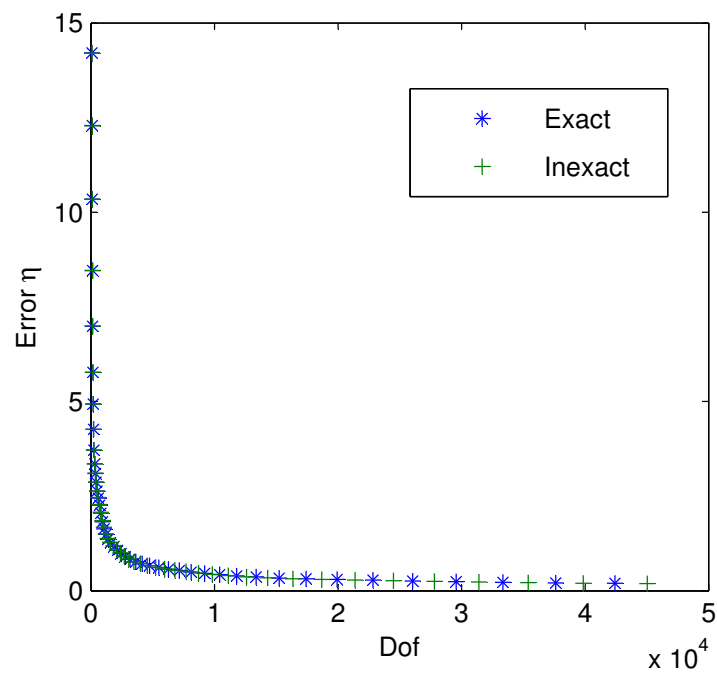


Figura 2: Modelo 1. Estimador de error

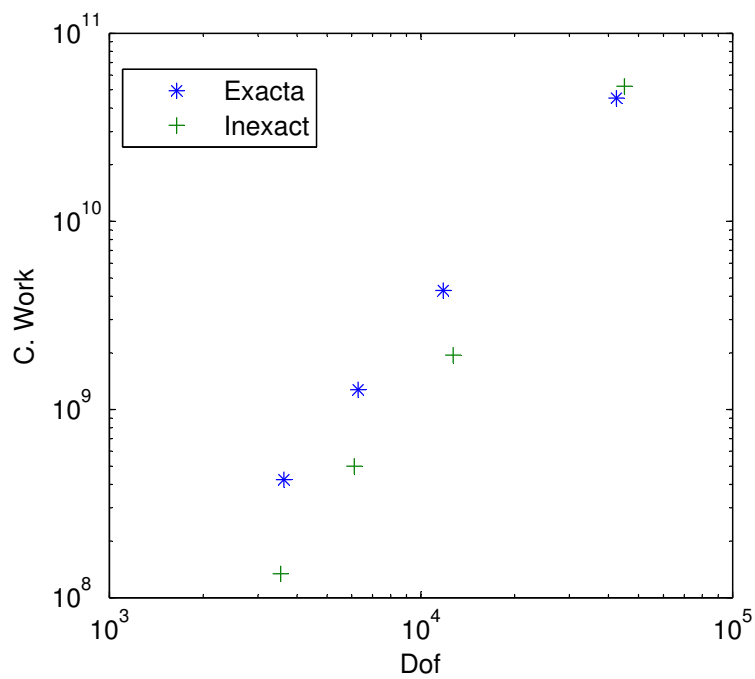


Figura 3: Modelo 1: TLE = 0.8,0.6,0.4,0.2

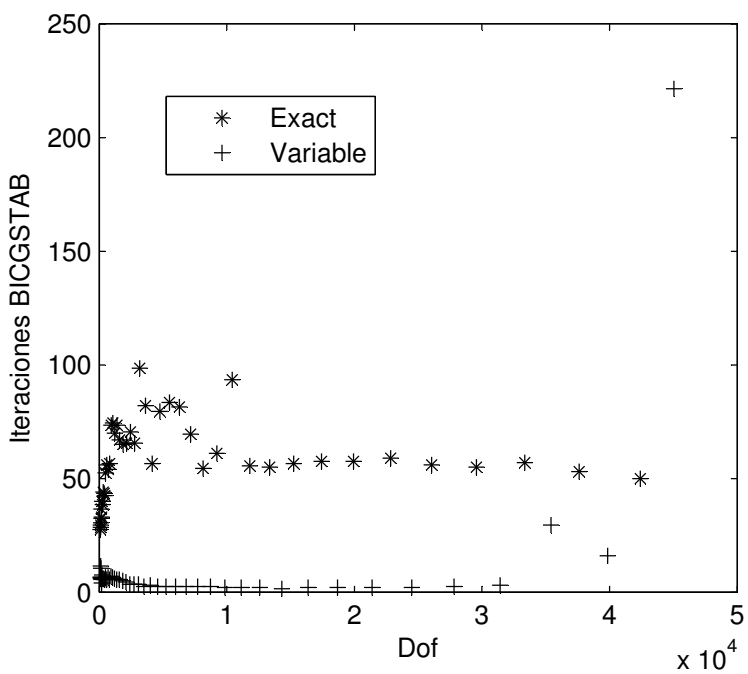


Figura 4: Modelo 1. TLE=0.2