

ESTIMACION DEL ERROR DE DISCRETIZACION CON PRINCIPIOS VARIACIONALES MULTICAMPO: I. ELASTICIDAD

FRANCISCO J. BELTRAN

y
ENRIQUE ALARCON

*Departamento de Mecánica Estructural y Construcciones
Industriales, E.T.S. de Ingenieros Industriales,
José Gutiérrez Abascal, 2 - 28006 Madrid.*

RESUMEN

Desarrollos recientes para encajar dentro de un marco variacional la llamada Formulación Libre sugieren la posibilidad de introducir un nuevo tipo de estimador de error para cálculos por elementos finitos. Este estimador se basa en una diferencia entre ciertos funcionales multicampo, que toman el mismo valor para la solución exacta del problema. En el presente artículo, dividido en dos partes, se introduce la formulación del estimador para problemas de elasticidad y de flexión de placas según las hipótesis clásicas de Kirchhoff. Se presentan también algunos ejemplos para dar idea de los comportamientos numéricos observados.

SUMMARY

Recent developments to fit the so called Free Formulation into a variational framework have suggested the possibility of introducing a new category of error estimates for finite element computations. These error estimates are based on differences between certain multifield functionals, which give the same value for the true solution. In the two parts of the present paper the formulation of such estimates is introduced for elasticity and plate bending problems respectively. In order to give an idea of the numerical performance of these new error measures several examples are also presented.

INTRODUCCION

Dentro del estado actual de aplicación del método de los elementos finitos en el ámbito de la ingeniería, resulta difícil exagerar la necesidad de contar con estimadores del error de discretización que sean a la vez fiables y económicos. Estas medidas, que evalúan *a posteriori* la precisión de una solución aproximada, son interesantes por sí mismas como índices de calidad, pero además constituyen un elemento fundamental en los llamados procesos adaptables. Dichos procesos parten de una discretización muy somera que se enriquece sucesivamente hasta alcanzar una solución con calidad predefinida. Es precisamente esta capacidad de adaptarse al problema concreto

Recibido: Octubre 1990

salvando errores de discretización la que, en opinión de los autores, constituye una ayuda inestimable para el ingeniero que se vale del método de los elementos finitos para comprobar sus diseños, sin ser a la vez un especialista en el mismo.

La necesidad de estimadores de error fiables y económicos ha sido reconocida por un gran número de investigadores en la pasada década. Se ha invertido un gran esfuerzo en su desarrollo, no sólo por parte de matemáticos, sino también por parte de ingenieros, que ven en ellos la posibilidad de introducir técnicas objetivas de control de calidad en los cálculos por elementos finitos. Una panorámica de este esfuerzo puede encontrarse en Babuska et al¹, aunque esta referencia debería completarse con algún trabajo más reciente².

Los estimadores de error propuestos en la literatura pueden clasificarse dentro de las tres categorías generales siguientes:

- a) Estimadores construidos a partir del campo de residuos asociado a la solución aproximada^{3,4,5}.
- b) Estimadores basados en la extrapolación de sucesivas soluciones aproximadas⁶.
- c) Estimadores obtenidos utilizando las diferencias entre el campo de tensiones (en sentido generalizado) derivado de la solución aproximada y un campo de tensiones "proyectado" o "alisado", que se considera de un orden de precisión superior².

Los estimadores de la categoría *a* son los que aparecieron en primer lugar. Los residuos son campos que se obtienen al sustituir la solución aproximada en las ecuaciones diferenciales que gobiernan el problema y resultan, en general, muy costosos de evaluar numéricamente. Es por esta razón que los estimadores dentro de esta categoría, aunque efectivos, suelen requerir un esfuerzo de cálculo desproporcionado.

Para calcular los estimadores de la categoría *b* se supone generalmente que la norma energética de las soluciones aproximadas converge hacia el valor correspondiente a la solución exacta de un modo conocido. Basta así calcular un determinado número de soluciones aproximadas para poder extrapolar y hacer una predicción del valor de la norma energética exacta. El inconveniente práctico es precisamente la necesidad de calcular varias soluciones. Aunque el método es muy adecuado cuando se utiliza dentro de procesos adaptables con refinamiento completo.

Los estimadores de la categoría *c* son los más recientes y quizás los que pueden acoplarse más fácilmente a la estructura de los programas de cálculo habituales. La principal dificultad está aquí en obtener la solución "alisada" de tensiones en forma consistente con la hipótesis de que tiene un orden de aproximación superior.

Por otro lado, trabajos recientes de Felippa^{7,8,9} para proporcionar fundamento variacional a la Formulación Libre de Bergan¹⁰ sugieren la posibilidad de introducir una nueva categoría de estimadores. El concepto fundamental es que si un determinado problema puede resolverse utilizando indistintamente varios principios variacionales que se derivan unos de otros mediante la técnica de los multiplicadores de Lagrange, entonces todos los funcionales asociados toman el mismo valor para la solución exacta del problema¹¹. De este modo, para una solución aproximada, parece que podría utilizarse una cierta diferencia entre el valor de distintos funcionales para estimar el error cometido. La principal dificultad consiste en identificar una tal diferencia que sea fácilmente calculable dentro del entorno convencional de un programa de elementos

finitos y que además proporcione un estimador aceptable, al menos desde el punto de vista ingenieril. Ello exige, en general, la utilización de elementos con formulación mixta o híbrida.

Los autores han trabajado en el sentido arriba indicado para construir estimadores de error aplicables a problemas de elasticidad (problemas C^0) y flexión de placas (problemas C^1)¹², aunque el concepto expresado parece más general y aplicable a cualquier problema que admita un planteamiento variacional. Los estimadores de esta categoría resultan de difícil aplicación cuando se emplean elementos derivados en la forma clásica, con un principio variacional de un solo campo independiente. Debe notarse a este respecto que en el esfuerzo investigador actual para el desarrollo de nuevos elementos, sobre todo en problemas de placas y láminas, se tiende a emplear técnicas asociadas a principios variacionales multicampo. Baste con citar por ejemplo la propia Formulación Libre (FF) o las formulaciones ANS ("Assumed Natural Strain")^{13,14} y ANDES ("Assumed Natural Deviatoric Strain")¹⁵. Es en este contexto donde los estimadores apuntados resultarían más útiles.

En los párrafos que siguen se sintetiza la investigación realizada por los autores en problemas de elasticidad. Se presenta el estimador de error propuesto y se resume brevemente la formulación de los elementos utilizados junto con el mismo. También, para dar una idea del comportamiento numérico de la medida del error propuesta, se proporciona un ejemplo concreto con solución analítica conocida, de modo que se pueden comparar los errores reales con los estimados.

La segunda parte de este trabajo se dedicará a la extensión de estas ideas a problemas de flexión de placas.

NOTACION

Para establecer la notación se plantea aquí el problema de la elasticidad lineal.

Sea un cuerpo elástico sometido a unas acciones estáticas y que ocupa un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. El cuerpo está limitado por una superficie S que se descompone en dos partes $S = S_d \cup S_t$. El vector normal exterior a S se denota por \mathbf{n} .

Sobre S_d se conocen los desplazamientos $\bar{\mathbf{d}}$, mientras que sobre S_t son conocidas las tensiones $\bar{\mathbf{t}}$. También es dato el campo \mathbf{b} de fuerzas por unidad de volumen sobre Ω . Las incógnitas del problema son: el campo \mathbf{u} de desplazamientos en Ω , el campo \mathbf{e} de deformaciones infinitesimales en Ω y el campo σ del tensor de tensiones en Ω .

Cuando se utilizan principios variacionales para resolver el problema se trabaja con campos independientes o primarios, que están sujetos a variaciones, y con campos dependientes o derivados, que se obtienen a partir de aquellos. La solución se determina tomando variaciones con respecto a los campos independientes. En este trabajo se adoptará la notación de Felippa⁹ para distinguir entre campos dependientes e independientes. Un campo que pueda variarse independientemente se denotará colocando una tilde "˜" sobre el símbolo correspondiente, por ejemplo: $\tilde{\sigma}$, $\tilde{\mathbf{u}}$... En los campos derivados la dependencia se identificará colocando como superíndice el símbolo del campo primario. Así por ejemplo se tiene:

$$\mathbf{e}^u = \frac{1}{2}(\nabla + \nabla^t) \tilde{\mathbf{u}} \quad \text{y} \quad \boldsymbol{\sigma}^u = \mathbf{D} \mathbf{e}^u \quad (1)$$

donde ∇ representa el operador gradiente y \mathbf{D} es el tensor de constantes elásticas. De este modo, los símbolos sin tilde ni superíndice \mathbf{u} , \mathbf{e} , $\boldsymbol{\sigma}$ se reservan para los campos solución exacta del problema.

La escritura de las integrales de volumen y de superficie se abreviará colocando el integrando entre paréntesis o entre corchetes respectivamente. El dominio de integración se indicará mediante un subíndice:

$$(f)_{\Omega} \equiv \int_{\Omega} f \, d\Omega \quad , \quad [f]_{S_i} \equiv \int_{S_i} f \, dS \quad (2)$$

En el caso de que f y g sean funciones tensoriales se define la notación:

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g})_{\Omega} \equiv \int_{\Omega} \mathbf{f} : \mathbf{g} \, d\Omega \quad (3)$$

y análogamente para las integrales de superficie, en cuyo caso se emplearán corchetes.

PLANTEAMIENTO VARIACIONAL

El principio variacional más conocido de los que pueden utilizarse para resolver el problema elástico es el principio de la energía potencial mínima, el cual establece que de entre todos los campos de desplazamiento $\tilde{\mathbf{u}}$ que satisfacen la restricción $\tilde{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{d}}$ en S_d , la solución \mathbf{u} del problema elástico es la que hace mínima la energía potencial total Π_P :

$$\Pi_P(\tilde{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}^u, \mathbf{e}^u)_{\Omega} - (\mathbf{b}, \tilde{\mathbf{u}})_{\Omega} - [\bar{\mathbf{t}}, \tilde{\mathbf{u}}]_{S_i} \quad (4)$$

Este principio de la energía puede generalizarse utilizando la técnica de los multiplicadores de Lagrange^{11,16}. Aplicando dicha técnica a un principio variacional se eliminan restricciones para el (los) campo (s) primario (s) del funcional asociado a través de la introducción de nuevos campos, llamados multiplicadores de Lagrange. Si se parte del principio de la mínima energía potencial, se obtiene de este modo toda una familia de principios variacionales derivados que, en general, permiten resolver el problema elástico haciendo estacionarios (ya no minimizando) nuevos funcionales.

Uno de los principios más generales que pueden obtenerse así es el de Hu-Washizu¹⁶. Según este principio los campos solución \mathbf{u} , \mathbf{e} , $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{t} , donde \mathbf{t} es el campo de tensiones en el contorno S_d , hacen estacionario el funcional:

$$\begin{aligned} \Pi_W(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{e}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \tilde{\mathbf{t}}) = & \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}^e, \tilde{\mathbf{e}})_{\Omega} + (\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u - \tilde{\mathbf{e}})_{\Omega} - (\mathbf{b}, \tilde{\mathbf{u}})_{\Omega} - \\ & - [\tilde{\mathbf{t}}, \tilde{\mathbf{u}}]_{S_i} + [\tilde{\mathbf{t}}, \bar{\mathbf{d}} - \tilde{\mathbf{u}}]_{S_d} \end{aligned} \quad (5)$$

sin ninguna restricción para los campos independientes.

Si en (5) se toman campos $\tilde{\mathbf{e}}$ que no sean independientes, sino que puedan obtenerse a partir de los campos de tensiones $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ mediante el tensor de constantes elásticas, es decir:

$$\tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e}^\sigma = \mathbf{D}^{-1}\tilde{\boldsymbol{\sigma}} \quad \text{en } \Omega \quad (6)$$

y además se relacionan los campos $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ y $\tilde{\mathbf{t}}$ mediante:

$$\tilde{\mathbf{t}} = \mathbf{t}^\sigma = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{n} \quad \text{en } S_d \quad (7)$$

se obtiene el funcional:

$$\begin{aligned} \Pi_R(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) = & -\frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^\sigma)_\Omega + (\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u)_\Omega - (\mathbf{b}, \tilde{\mathbf{u}})_\Omega - \\ & - [\tilde{\mathbf{t}}, \tilde{\mathbf{u}}]_{S_t} + [\tilde{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{n}, \bar{\mathbf{d}} - \tilde{\mathbf{u}}]_{S_d} \end{aligned} \quad (8a)$$

Los campos de desplazamientos $\tilde{\mathbf{u}}$ pueden tomarse de forma que cumplan la condición de contorno $\tilde{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{d}}$ en S_d , con lo que Π_R se escribe:

$$\Pi_R(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) = -\frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^\sigma)_\Omega + (\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u)_\Omega - (\mathbf{b}, \tilde{\mathbf{u}})_\Omega - [\tilde{\mathbf{t}}, \tilde{\mathbf{u}}]_{S_t} \quad (8b)$$

y los campos solución \mathbf{u} , $\boldsymbol{\sigma}$ harán estacionario el funcional (8b) si éste se define entre campos $\tilde{\mathbf{u}}$ que cumplan la condición de contorno expresada. Este es el principio variacional de Hellinger-Reissner¹⁷. Nótese que el funcional potencial total (4) y el funcional de Hellinger-Reissner (8b) son particularizaciones del funcional parametrizado:

$$\Pi_\gamma(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) = (1 - \gamma) \Pi_P(\tilde{\mathbf{u}}) + \gamma \Pi_R(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) = \quad (9)$$

$$= (1 - \gamma) \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}^u, \mathbf{e}^u)_\Omega - \gamma \frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^\sigma)_\Omega + \gamma (\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u)_\Omega - (\mathbf{b}, \tilde{\mathbf{u}})_\Omega - [\tilde{\mathbf{t}}, \tilde{\mathbf{u}}]_{S_t}$$

con $\gamma \in \mathbb{R}$, $0 \leq \gamma \leq 1$.

Puede pensarse entonces en un principio variacional parametrizado, intermedio entre el de la energía potencial mínima y el de Hellinger-Reissner, ya que los campos solución \mathbf{u} , $\boldsymbol{\sigma}$ harán estacionario el funcional (9) cuando éste se defina entre campos $\tilde{\mathbf{u}}$, $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ tales que $\tilde{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{d}}$ en S_d .

Los funcionales parametrizados del tipo de (9) fueron introducidos por Felippa⁹. Para problemas de elasticidad pueden establecerse principios variacionales asociados a funcionales con hasta tres parámetros independientes¹⁸. Si se emplean estos principios para obtener soluciones aproximadas por la técnica de los elementos finitos, se comprende que determinadas combinaciones de parámetros pueden proporcionar resultados de más calidad que cuando se utilizan los principios variacionales clásicos. De hecho principios parametrizados se están empleando con éxito para formular elementos de alto rendimiento¹⁸.

ESTIMADOR DE ERROR

Todos los funcionales recogidos más arriba toman el mismo valor para los campos solución exacta del problema elástico: \mathbf{u} , $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{e} , \mathbf{t} . Este hecho es una propiedad general del método de los multiplicadores de Lagrange¹¹. Se tiene pues que:

$$\Pi_P(\mathbf{u}) = \Pi_W(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{e}, \mathbf{t}) = \Pi_R(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}) = \Pi_\gamma(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}) = \Pi \quad (10)$$

donde Π es el potencial exacto para el problema.

Se plantea entonces la cuestión de si es posible aprovechar las diferencias entre los valores que toman los funcionales, para una solución aproximada, como estimadores del error de discretización cometido. Dar respuesta a esta pregunta ha sido la motivación principal de la investigación llevada a cabo por los autores.

En primer lugar deberá definirse la medida del error de discretización que pretende ser estimada. Cuando se busca la solución al problema elástico con el principio de la energía potencial mínima se trabaja con un solo campo incógnita: el campo de desplazamientos. Se puede definir entonces un campo de errores \mathbf{er} como:

$$\mathbf{er} = \tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u} \quad (11)$$

donde $\tilde{\mathbf{u}}$ es una solución aproximada para el campo de desplazamientos y \mathbf{u} es la solución exacta.

La magnitud del campo de errores \mathbf{er} suele medirse en este caso mediante su norma energética³:

$$\|\mathbf{er}\|^2 = (\boldsymbol{\sigma}^{er}, \mathbf{e}^{er})_\Omega \quad (12)$$

y es esta norma la que generalmente tratan de aproximar los estimadores de error convencionales. Por otro lado, resulta que si $\tilde{\mathbf{u}}$ es un campo cinemáticamente admisible, es decir, si:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{d}} \quad \text{en } S_d \quad (13)$$

entonces^{9,12}:

$$\Pi_P(\tilde{\mathbf{u}}) - \Pi = \frac{1}{2} \|\mathbf{er}\|^2 \quad (14)$$

es decir, la magnitud del campo de errores \mathbf{er} , medida por su norma energética, puede obtenerse por diferencia entre el potencial exacto y el funcional aproximado.

Por analogía, cuando se trabaja con el principio asociado a un funcional multicampo, por ejemplo $\Pi_\Omega(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}})$, se puede definir la magnitud del error mediante la diferencia $\Pi_\Omega(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) - \Pi$ entre el valor del funcional para la solución aproximada y el potencial exacto. O también puede seguir utilizándose la diferencia $\Pi_P(\tilde{\mathbf{u}}) - \Pi$ entre el potencial total y el potencial exacto. Las medidas del error expresadas por estas diferencias son las que tratarán de aproximarse por un estimador.

Se propone como estimador del error de discretización la diferencia:

$$\epsilon = \Pi_P(\tilde{\mathbf{u}}) - \Pi_\gamma(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) \quad (15)$$

asociada a los campos aproximados $\tilde{\mathbf{u}}$ y $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$, donde $\tilde{\mathbf{u}}$ es un campo cinemáticamente admisible.

Nótese que la presencia de dos campos independientes $\tilde{\mathbf{u}}$, $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ en (15) obliga en general a trabajar con formulaciones mixtas para poder disponer de ambos campos a la hora del cálculo del estimador. Por otro lado, la diferencia (15) es relativamente sencilla de calcular ya que:

$$\begin{aligned} & \Pi_P(\tilde{\mathbf{u}}) - \Pi_\gamma(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) = \\ & = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}^u, \mathbf{e}^u)_\Omega - \frac{1}{2}(1 - \gamma)(\boldsymbol{\sigma}^u, \mathbf{e}^u)_\Omega + \frac{1}{2}\gamma(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^\sigma)_\Omega - \gamma(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u)_\Omega = \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{2}\gamma(\boldsymbol{\sigma}^u, \mathbf{e}^u)_\Omega + \frac{1}{2}\gamma(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^\sigma - \mathbf{e}^u)_\Omega - \frac{1}{2}\gamma(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u)_\Omega = \\ & \quad \frac{1}{2}\gamma(\boldsymbol{\sigma}^u - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u - \mathbf{e}^\sigma)_\Omega \end{aligned}$$

Es decir, basta con una sola integración extendida a todo el dominio Ω . Integración que puede hacerse sumando las contribuciones de las "parcelas", subdominios o elementos Ω_i en que se divida Ω :

$$\epsilon = \sum_i \epsilon_i = \sum_i \frac{1}{2}\gamma(\boldsymbol{\sigma}^u - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{e}^u - \mathbf{e}^\sigma)_{\Omega_i} \quad (17)$$

y las contribuciones ϵ_i son medidas del error local.

En una discretización por elementos finitos los subdominios Ω_i son los elementos, y los valores:

$$\eta_i = \frac{\epsilon_i}{\text{vol}_i} \quad (18)$$

con vol_i = volumen del elemento, representan densidades de error que pueden utilizarse como indicadores de los elementos de la malla donde un refinamiento sería más ventajoso.

Por último, hay que señalar que, de acuerdo con (16), si la relación tensiones-deformaciones es definida positiva y $\gamma > 0$ entonces el estimador propuesto nunca resulta negativo: $\epsilon \geq 0$.

DISCRETIZACION POR EL M.E.F.

La utilización por el estimador de error propuesto en los párrafos anteriores resulta sencilla cuando, para la resolución aproximada del problema elástico, se utiliza el principio variacional asociado al funcional parametrizado $\Pi_\gamma(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}})$. Si se utiliza el método de los elementos finitos, esto significa emplear elementos basados en el principio variacional parametrizado. En el presente trabajo se ha optado por desarrollar en primer lugar estos elementos ya que, una vez disponibles, el cálculo del estimador resulta inmediato a partir de su definición. Seguidamente se proporcionan las líneas generales de la formulación a partir del principio variacional parametrizado, y las condiciones que debe cumplir la discretización para obtener estimadores aceptables. Los detalles pueden encontrarse en Beltrán¹².

Siguiendo la práctica habitual, las componentes de los campos tensoriales de deformaciones y tensiones se agrupan en vectores columna y el tensor de coeficientes elásticos se convierte en una matriz cuadrada simétrica, esto es $\boldsymbol{\sigma}$, e representan a partir de aquí vectores, y \mathbf{D} una matriz cuadrada.

Si se considera el dominio Ω dividido en un cierto número de subdominios o elementos Ω_i , la hipótesis básica es que el campo de desplazamientos $\tilde{\mathbf{u}}$ y el campo de tensiones $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ pueden expresarse dentro de un elemento mediante una combinación lineal de modos de desplazamiento interno y modos internos de tensión respectivamente:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{N} \mathbf{q} \quad \text{en } \Omega_i \quad (19)$$

y

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{A} \mathbf{a} \quad \text{en } \Omega_i \quad (20)$$

donde la matriz \mathbf{N} recoge los modos de desplazamiento interno o funciones de forma generalizadas, la matriz \mathbf{A} contiene los modos de tensión, y los vectores \mathbf{q} y \mathbf{a} reúnen las amplitudes de los modos de desplazamiento y tensión respectivamente.

El número total de modos de desplazamiento interno (el número de componentes del vector \mathbf{q}) debe ser igual al número n de grados de libertad externos o nodales del elemento. El vector que reúne estos n grados de libertad o desplazamientos nodales se denotará por \mathbf{v} . La relación cinemática entre las amplitudes de los modos internos de desplazamiento \mathbf{q} y los desplazamientos nodales \mathbf{v} se obtiene fácilmente particularizando la relación (19) para los distintos nodos:

$$\mathbf{v} = \mathbf{G} \mathbf{q} \quad (21)$$

donde \mathbf{G} es una matriz cuadrada de orden n .

Los modos de desplazamiento interno \mathbf{N} deben elegirse linealmente independientes en el sentido de que la relación (21) sea invertible:

$$\mathbf{q} = \mathbf{H} \mathbf{v} \quad (22)$$

Los campos secundarios o derivados de $\tilde{\mathbf{u}}$ y $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ son:

$$\mathbf{e}^u = \frac{1}{2}(\nabla + \nabla^t)\mathbf{N} \mathbf{q} = \mathbf{B} \mathbf{q} \quad \text{en } \Omega_i \quad (23)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^u = \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{q} \quad \text{en } \Omega_i \quad (24)$$

y

$$\mathbf{e}^\sigma = \mathbf{D}^{-1} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{a} \quad \text{en } \Omega_i \quad (25)$$

Si las relaciones (19), (20) y (23) a (25) se introducen en el funcional parametrizado (9), se obtiene su forma algebraica o discretizada:

$$\begin{aligned} \Pi_\gamma(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) &= \sum_i \Pi_{\gamma_i} = \frac{1}{2}(1-\gamma) \sum_i \mathbf{q}^t (\mathbf{B}^t \mathbf{D} \mathbf{B})_{\Omega_i} \mathbf{q} - \\ &- \frac{1}{2} \gamma \sum_i \mathbf{a}^t (\mathbf{A}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{A})_{\Omega_i} \mathbf{a} + \gamma \sum_i \mathbf{a}^t (\mathbf{A}^t \mathbf{B})_{\Omega_i} \mathbf{q} - \\ &- \sum_i (\mathbf{b}^t \mathbf{N})_{\Omega_i} \mathbf{q} - \sum_i [\bar{\mathbf{t}}^t \mathbf{N}]_{S_i} \mathbf{q} \end{aligned} \quad (26)$$

donde \mathbf{q} y \mathbf{a} son las amplitudes de modos de desplazamiento y tensión dentro del elemento i .

Debe notarse que la obtención del funcional Π_γ para el dominio completo como suma de los valores para los subdominios Ω_i (ecuación (26)) sólo puede hacerse cuando los campos $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ y $\boldsymbol{\sigma}^u$ adoptan valores finitos en los contornos interelementales. Así pues, la relación (26) tiene implícita la hipótesis de que el campo $\tilde{\mathbf{u}}$ es continuo a través de las fronteras de los elementos.

Si se introducen las siguientes definiciones para representar las integrales que aparecen en (26):

$$\mathbf{K}_u = (\mathbf{B}^t \mathbf{D} \mathbf{B})_{\Omega_i}, \quad \mathbf{C} = (\mathbf{A}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{A})_{\Omega_i} \quad (27)$$

$$\mathbf{Q}^t = (\mathbf{A}^t \mathbf{B})_{\Omega_i}, \quad \mathbf{f}_q^t = (\mathbf{b}^t \mathbf{N})_{\Omega_i}, \quad \mathbf{f}_s^t = [\bar{\mathbf{t}} \mathbf{N}]_{S_i}$$

la parte del funcional correspondiente a un elemento genérico es:

$$\begin{aligned} \Pi_{\gamma_i}(\mathbf{q}, \mathbf{a}) &= \frac{1}{2}(1-\gamma) \mathbf{q}^t \mathbf{K}_u \mathbf{q} - \frac{1}{2} \gamma \mathbf{a}^t \mathbf{C} \mathbf{a} + \\ &+ \gamma \mathbf{a}^t \mathbf{Q}^t \mathbf{q} - \mathbf{f}_q^t \mathbf{q} - \mathbf{f}_s^t \mathbf{q} \end{aligned} \quad (28)$$

y al hacerla estacionaria con respecto a \mathbf{q} y \mathbf{a} se obtienen las dos siguientes ecuaciones matriciales:

$$\begin{aligned}
1) \quad & \frac{\partial \Pi_{\gamma_i}}{\partial \mathbf{q}} = 0 && \text{(equilibrio)} \\
& (1 - \gamma) \mathbf{K}_u \mathbf{q} + \gamma \mathbf{Q} \mathbf{a} - \mathbf{f}_q - \mathbf{f}_s = 0 && (29) \\
2) \quad & \frac{\partial \Pi_{\gamma_i}}{\partial \mathbf{a}} = 0 && \text{(compatibilidad interna)} \\
& \mathbf{C} \mathbf{a} = \mathbf{Q}^t \mathbf{q} && (30)
\end{aligned}$$

A partir de (29) y (30), utilizando además la relación (22), se llega a:

$$\left\{ (1 - \gamma) \mathbf{H}^t \mathbf{K}_u \mathbf{H} + \gamma \mathbf{H}^t \mathbf{Q} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Q}^t \mathbf{H} \right\} \mathbf{v} = \mathbf{H}^t (\mathbf{f}_q + \mathbf{f}_s) \quad (31)$$

donde el término entre corchetes del primer miembro es la matriz de rigidez elemental y el segundo miembro es el vector elemental de cargas.

Dentro de la discretización del principio variacional parametrizado que se acaba de describir, los modos de desplazamiento en \mathbf{N} y los modos de tensión en \mathbf{A} deben cumplir una serie de requisitos. Además de la continuidad del campo de desplazamientos $\tilde{\mathbf{u}}$ a través de las fronteras interelementales y de la necesidad de que los modos sean capaces de reproducir al menos campos de movimientos de sólido rígido y de tensión constante, debe tenerse en cuenta el principio de limitación de Fraeijs de Veubeke¹⁹. Este principio tiene consecuencias cuando los modos $\mathbf{D} \mathbf{B}$ correspondientes al campo de tensiones derivado σ^u :

$$\sigma^u = \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{q} \quad (32)$$

pueden obtenerse como combinación lineal de los modos \mathbf{A} utilizados para interpretar el campo de tensiones independiente $\tilde{\sigma}$. Es decir, cuando cualquier columna de $\mathbf{D} \mathbf{B}$ puede ponerse como combinación lineal de las columnas de \mathbf{A} . En estos casos el principio de limitación viene a establecer que la aproximación al campo de tensiones dada por $\tilde{\sigma}$ no puede ser mejor que la obtenida mediante el campo σ^u , a pesar de haberse incluido un número igual o superior de modos de tensión en la primera⁷. Puede verse entonces¹² que la matriz de rigidez elemental dada en (31) resulta independiente del parámetro γ y que el estimador propuesto, calculado según (17), siempre se anula.

ELEMENTOS DESARROLLADOS

Siguiendo las líneas generales expuestas en los párrafos anteriores, se han desarrollado cuatro elementos para problemas de elasticidad bidimensional (Figura 1). En estos elementos los modos de desplazamiento interno \mathbf{N} se consideran divididos en tres categorías:

$$\mathbf{N} = [\mathbf{N}_r \mathbf{N}_m \mathbf{N}_h] \quad (33)$$

donde:

- N_r = modos para representar movimientos de sólido rígido.
- N_m = modos que pueden proporcionar una interpolación polinómica completa de orden m al campo de movimientos (m depende del elemento concreto, $1 \leq m \leq 4$).
- N_h = modos de orden superior a m que no constituyen polinomios completos. Estos modos se introducen para que el número de grados de libertad internos q sea el mismo que el número de grados de libertad nodales v .

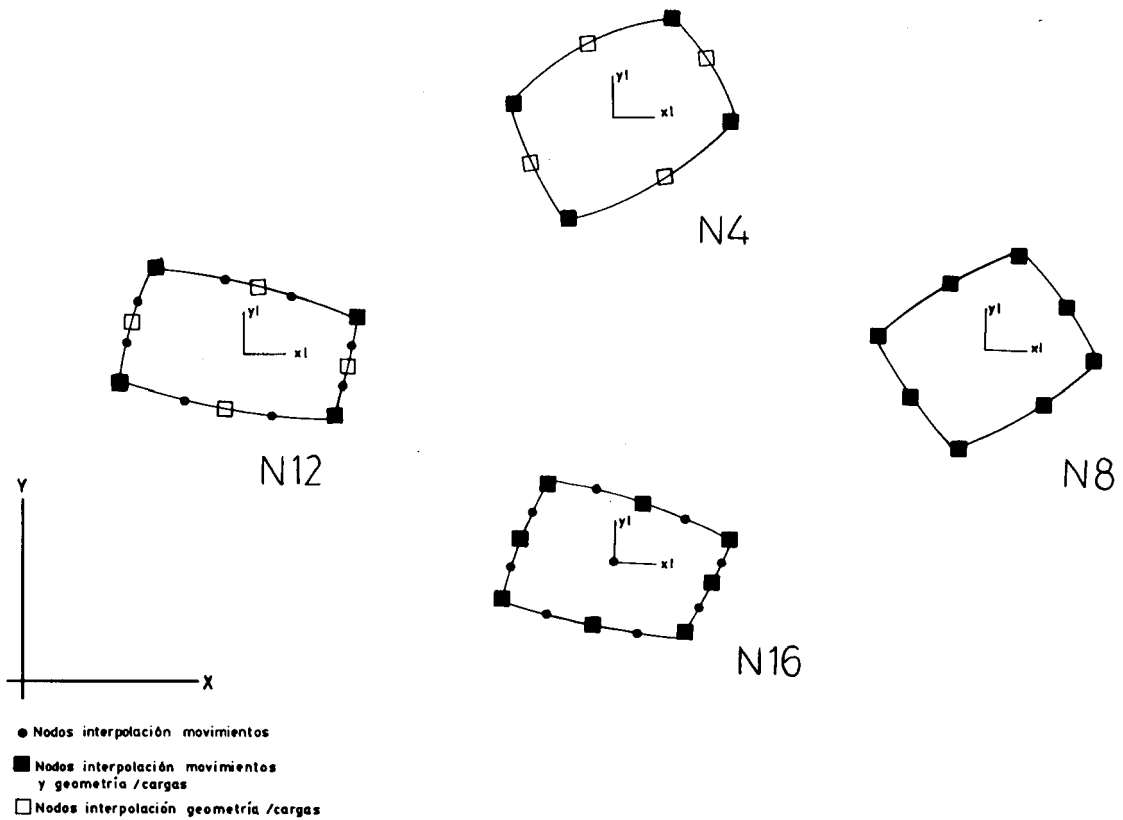


Figura 1. Elementos desarrollados para elasticidad 2.D.

Esta partición de los modos de desplazamiento interno conduce a una partición paralela de los modos de deformación \mathbf{B} :

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2}(\nabla + \nabla^t)\mathbf{N} = [\mathbf{0} \ \mathbf{B}_m \ \mathbf{B}_h] \tag{34}$$

donde las columnas de \mathbf{B} correspondientes a N_r son nulas.

El campo σ^u será entonces:

$$\sigma^u = \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{q} = \mathbf{D} [\mathbf{B}_m \ \mathbf{B}_h] \mathbf{q} \tag{35}$$

Para los modos de tensión \mathbf{A} se toma formalmente:

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} \mathbf{B}_m \quad (36)$$

elección que salva las consecuencias ya discutidas del principio de limitación.

Por otro lado, se obtiene una simplificación sustancial en la formulación de los elementos si los modos contenidos en \mathbf{B}_m son ortogonales entre sí con respecto a la norma energética, es decir, si se cumple que:

$$(\mathbf{B}_m^t \mathbf{D} \mathbf{B}_m)_{\Omega_i} = \int_{\Omega_i} \mathbf{B}_m^t \mathbf{D} \mathbf{B}_m d\Omega = \text{matriz diagonal} \quad (37)$$

y si, además, se verifica que los modos en \mathbf{B}_m son ortogonales a los modos en \mathbf{B}_h , es decir, si:

$$(\mathbf{B}_m^t \mathbf{D} \mathbf{B}_h)_{\Omega_i} = \int_{\Omega_i} \mathbf{B}_m^t \mathbf{D} \mathbf{B}_h d\Omega = 0 \quad (38)$$

En general, la elección de \mathbf{N}_m y \mathbf{N}_h no cumplirá con (37) y (38), pero estos modos pueden modificarse elemento a elemento aplicando un proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt a los modos de deformación \mathbf{B}_m , \mathbf{B}_h (ver referencia¹²). El cumplimiento de (37) tiene además ciertas ventajas en procesos p -adaptables¹².

Con todo lo anterior, la matriz de rigidez elemental vale:

$$\mathbf{K} = \mathbf{H}_m^t \mathbf{K}_{um} \mathbf{H}_m + (1 - \gamma) \mathbf{H}_h^t \mathbf{K}_{uh} \mathbf{H}_h = \mathbf{K}_b + \mathbf{K}_h \quad (39)$$

donde:

$$\mathbf{H}^t = [\mathbf{H}_r \ \mathbf{H}_m \ \mathbf{H}_h] \ , \ \mathbf{K}_{um} = (\mathbf{B}_m^t \ \mathbf{D} \ \mathbf{B}_m)_{\Omega_i} \ , \ \mathbf{K}_{uh} = (\mathbf{B}_h^t \ \mathbf{D} \ \mathbf{B}_h)_{\Omega_i}$$

Se obtiene así la matriz de rigidez elemental como suma de una matriz básica \mathbf{K}_b , independientemente de γ , y una matriz \mathbf{K}_h que depende del parámetro γ .

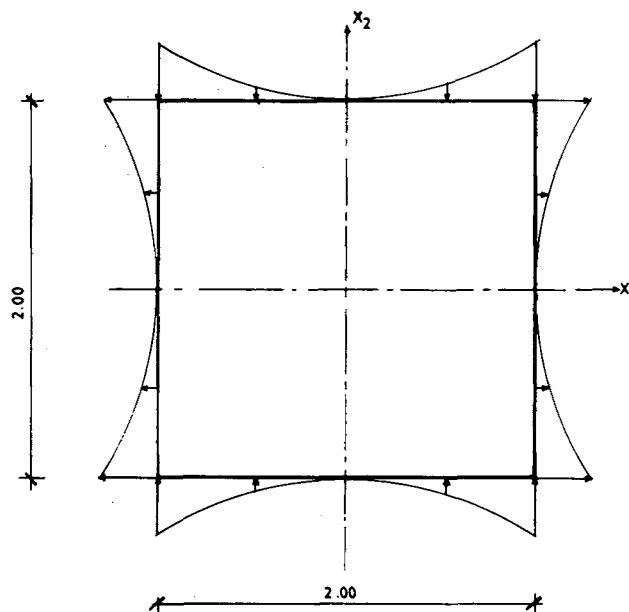
El estimador de error propuesto resulta tener la expresión:

$$\epsilon = \sum_i \epsilon_i = \sum_i \frac{\gamma}{2} \mathbf{q}_h^t \mathbf{K}_{uh} \mathbf{q}_h \quad (40)$$

Nótese que ϵ_i representa la energía elástica asociada a los modos \mathbf{B}_h de orden superior multiplicada por el parámetro γ . En este sentido ϵ_i recuerda la medida del error propuesta de forma casi intuitiva por Melosh y Marcal²⁰.

EJEMPLO NUMERICO

Se presenta aquí un ejemplo numérico concreto para ilustrar el comportamiento del estimador de error propuesto en los párrafos anteriores. Necesariamente debe escogerse un caso sencillo, con solución analítica conocida, para poder comparar el valor estimado para el error con los errores reales.



$E = 1.00$ $\nu = 0.00$ espesor = 100	}	Solución desplazamientos	}	$u_1 = \frac{2}{E} x_1 x_2^2$ $u_2 = -\frac{2}{E} x_1^2 x_2$
		Solución tensiones	}	$\sigma_1 = 2x_2^2$ $\sigma_2 = 2x_1^2$ $\tau_{12} = 0$
		Energía elástica :	}	$\frac{16}{5E}$

Figura 2. Ejemplo. Laja con tensiones parábolicas.

Se trata de una laja cuadrada sometida a tensiones que varían parábolicamente en su contorno (Figura 2). La doble simetría permite estudiar sólo un cuarto de la placa. El ejemplo ha sido resuelto mediante un proceso h -adaptable y también mediante un análisis p -adaptable con refinamiento completo. En ambos casos la malla base está constituida por un solo elemento $N4$, el de orden más bajo de los desarrollados. Para el refinamiento h se utilizan nuevos elementos $N4$, mientras que en el refinamiento p el orden de la interpolación dentro del elemento se va incrementando automáticamente, utilizándose así sucesivamente los elementos $N8$ y $N12$. El elemento $N12$ proporciona

la solución exacta, ya que su formulación incluye un polinomio cúbico completo para la aproximación de los desplazamientos.

En la Figura 3 se representa la malla base junto con la evolución del refinamiento h "guiado" por los indicadores del error local definidos por (18). El criterio de refinamiento ha sido subdividir los elementos en los que el indicador era mayor. Se alcanza finalmente una malla óptima en el sentido de que los indicadores toman valores más o menos iguales en todos los elementos. El comportamiento de esta medida local parece satisfactorio, y es muy similar al obtenido con otros valores del parámetro γ .

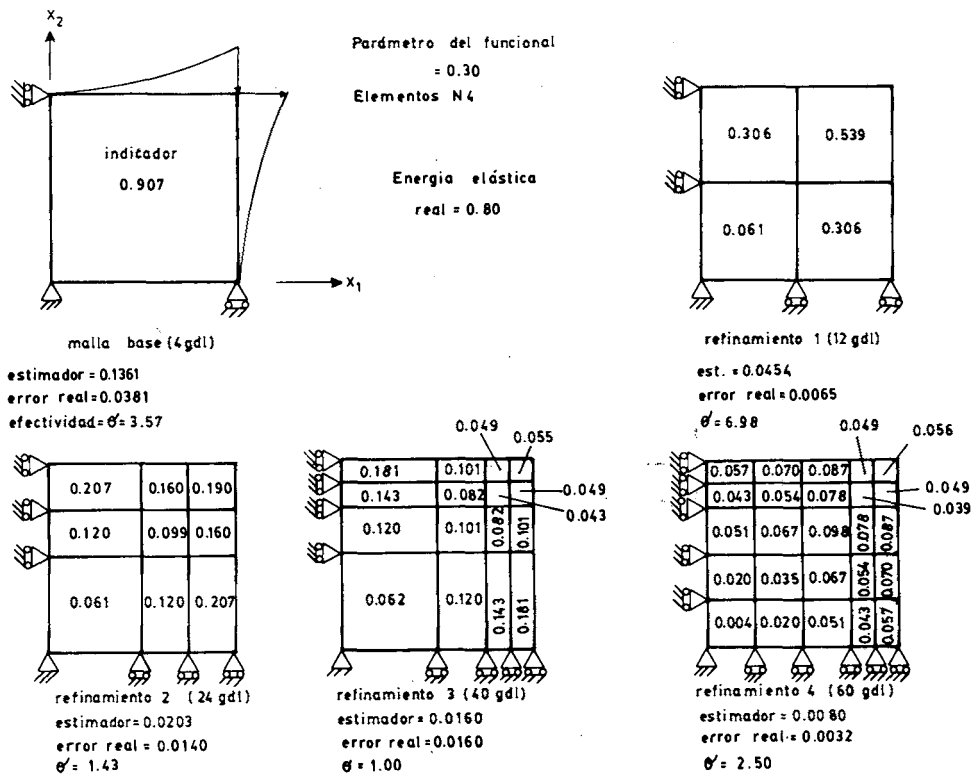


Figura 3. Ejemplo. Refinamiento h .

Las Figuras 4 y 5 recogen la evolución del desplazamiento horizontal calculado u_1 y de la tensión horizontal calculada σ_1 en la esquina de la placa, tanto en el refinamiento h como en el p . Se observa la potencia del refinamiento p , que con tan solo 16 grados de libertad alcanza la solución exacta.

La evolución del estimador de error se ha estudiado para distintos valores del parámetro γ . Las Figuras 6 a 8 resumen los resultados obtenidos para el caso del refinamiento h . En estas figuras el "error real 1" representa el valor absoluto de la diferencia entre el potencial exacto Π y el funcional parametrizado Π_γ ; y el "error real 2" es el valor de la diferencia entre el funcional potencial total Π_P y el potencial exacto.

En abscisas se representa el número de grados de libertad y en ordenadas la magnitud del estimador y de los errores, que tienen unidades de energía. Ambas escalas

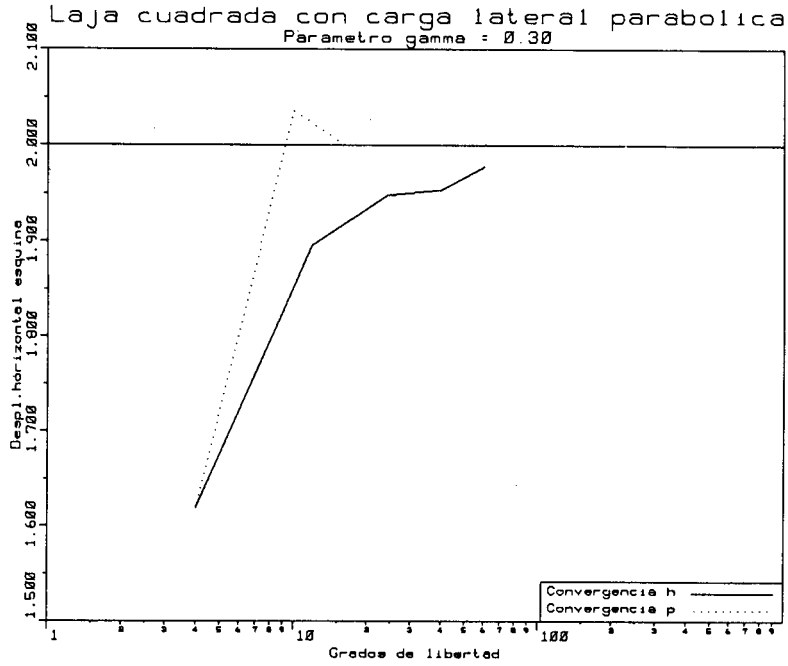


Figura 4. Ejemplo. Desplazamiento horizontal esquina.

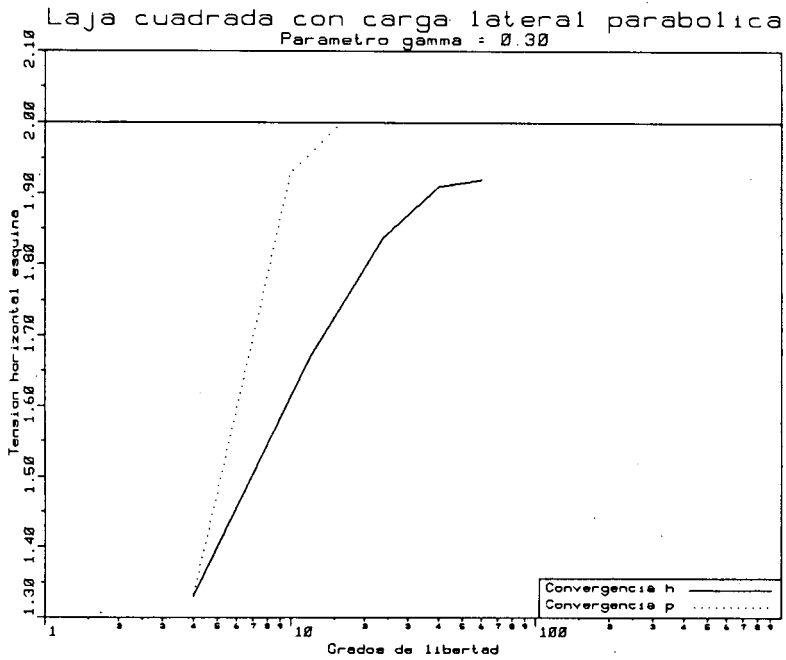


Figura 5. Ejemplo. Tensión horizontal esquina.

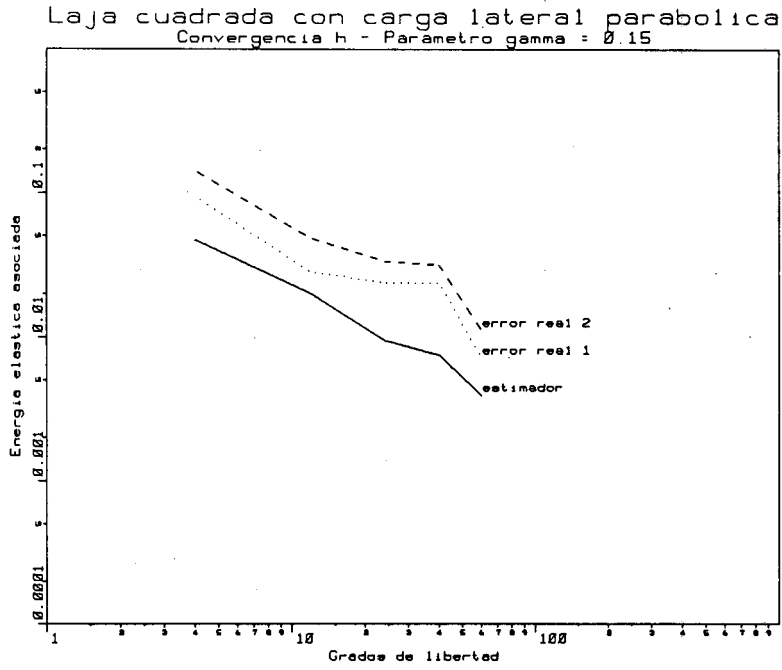


Figura 6. Ejemplo. Evolucion estimador de error (I).

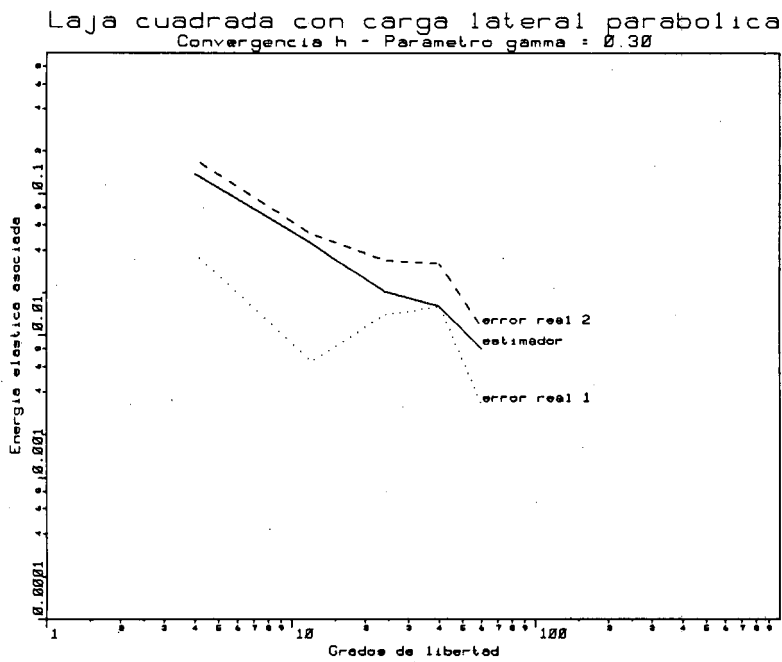


Figura 7. Ejemplo. Evolucion estimador de error (II).

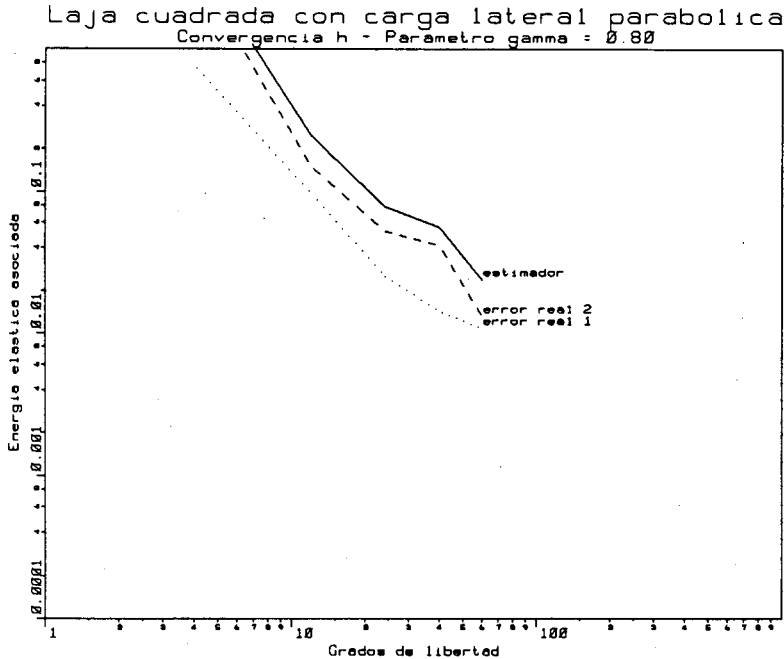


Figura 8. Ejemplo. Evolución estimador de error (III).

son logarítmicas. Puede verse como en todos los casos el estimador propuesto sigue una evolución muy similar a la de la diferencia $\Pi_P - \Pi$.

El valor del parámetro γ influye de modo importante tanto en el tamaño de los errores como en la magnitud relativa del estimador con respecto a los errores. Valores bajos de γ (por debajo de 0.20) hacen que el funcional parametrizado Π_γ y el funcional potencial total Π_P sean muy parecidos, así son de esperar soluciones que no difieran mucho de las obtenidas con elementos convencionales construidos a partir del principio de la mínima energía potencial. El estimador propuesto subestima tanto la diferencia $|\Pi_\gamma - \Pi|$ como la diferencia $\Pi_P - \Pi$, aunque mantiene su misma tendencia (Figura 6).

Para $\gamma = 0.30$ (Figura 7) se obtienen valores espectacularmente bajos de la diferencia $|\Pi_\gamma - \Pi|$. Pero obsérvese también que la tendencia de este último valor no es siempre a disminuir cuando se produce un refinamiento de la malla. El estimador propuesto tiene en este caso una evolución muy parecida a la de la diferencia $\Pi_P - \Pi$, aunque la subestima ligeramente.

Finalmente, para valores del parámetro γ superiores a 0.50 (Figura 8) se obtienen soluciones en las que los errores son muy grandes si se emplean pocos grados de libertad, pero cuya calidad mejora muy rápidamente con los refinamientos de la malla. El estimador propuesto tiene aquí un comportamiento excelente, ya que sobrestima ligeramente los errores y tiene su misma tendencia.

CONCLUSIONES

El método de los elementos finitos, por los grandes avances que están experimentando los medios de cálculo, muestra cierta tendencia a convertirse en una especie de "caja negra", de la que usuarios poco experimentados pueden extraer resultados sin tener una idea clara de los fundamentos de la herramienta numérica que están manejando. Llegados a este punto consideramos imperiosa la necesidad de introducir medidas cuantitativas de la calidad de las aproximaciones numéricas obtenidas, de modo que la bondad de éstas pueda ser juzgada objetivamente aún por ingenieros no especialistas.

En esta primera parte del artículo se ha presentado abreviadamente la base teórica, formulación numérica y evaluación práctica de un nuevo tipo de estimador de error para problemas de elasticidad (C^0). El estimador se calcula como diferencia entre dos funcionales multicampo, uno de ellos parametrizado. Su principal ventaja es que se obtiene elemento por elemento y, en cada elemento, sólo se necesita la información correspondiente al mismo para evaluar su contribución al estimador. Este hecho hace que los estimadores construidos con la nueva filosofía sean muy adecuados para utilizarse en esquemas de cálculo paralelo y que, además, se eviten las dificultades asociadas a discontinuidades naturales (saltos reales de tensión) en los procedimientos más convencionales de estimación del error.

La conducta numérica observada del estimador parece aceptable desde el punto de vista ingenieril, aunque hace falta algo de experimentación para dar normas prácticas (niveles de tolerancia) para su uso en problemas reales.

La idea en que se basa el estimador propuesto, esto es, el aprovechamiento de la diferencia entre dos funcionales que toman el mismo valor para la solución exacta, es muy general. En principio pueden obtenerse estimadores de esta clase para cualquier tipo de problema que admita formulación variacional. La segunda parte del artículo se dedicará a la aplicación de estas ideas a problemas de flexión de placas (C^1).

AGRADECIMIENTOS

Los autores quieren agradecer al Prof. C.A. Felippa sus valiosas sugerencias y la gran cantidad de documentación facilitada.

REFERENCIAS

1. I. Babuska, O.C. Zienkiewicz, J.P. Gago y E. Oliveira (Eds.), "Accuracy Estimates and Adaptive Refinements in Finite Element Computations", John Wiley, (1986).
2. O.C. Zienkiewicz y J.Z. Zhu, "A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 24, pp. 337-357, (1987).
3. D.W. Kelly, J.P. Gago, O.C. Zienkiewicz y I. Babuska, "A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method: Part I-error analysis", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 19, pp. 1593-1619, (1983).
4. O.C. Zienkiewicz, J.P. Gago y D.W. Kelly, "The hierarchical concept in finite element analysis", *Computers & Structures*, Vol. 16, pp. 53-65, (1983).

5. D.W. Kelly, "The self-equilibration of residuals and complementary a posteriori error estimates in the finite element method", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 20, pp. 1491-1506, (1984).
6. B.A. Szabo, "Estimation and control of error based on p convergence", Capítulo 3 en la referencia 1, (1986).
7. C.A. Felippa, "Parametrized multifield variational principles in elasticity: I. Mixed functionals", *Communications in Applied Numerical Methods*, Vol. 5, pp. 69-78, (1989).
8. C.A. Felippa, "Parametrized multifield variational principles in elasticity: II. Hybrid functionals and the free formulation", *Communications in Applied Numerical Methods*, Vol. 5, pp. 79-88, (1989).
9. C.A. Felippa, "The extended free formulation of finite elements in linear elasticity", *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 56, pp. 609-616, (1989).
10. P.G. Bergan y M.K. Nygard, "Finite elements with increased freedom in choosing shape functions", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 20, pp. 643-664, (1984).
11. R. Courant y D. Hilbert, "Methods of Mathematical Physics, John Wiley, Vol. I, (1953).
12. F. Beltrán, "Estimadores de Error Basados en Principios Variacionales Multicampo para Cálculos por Elementos Finitos, Tesis Doctoral, Universidad Politécnica de Madrid, (1990).
13. K.J. Bathe y E.N. Dvorkin, "A four-node plate bending element based on Mindlin/Reissner plate theory and mixed interpolation", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 21, pp. 367-383, (1985).
14. J.C. Simo y T.J.R. Hughes, "On the variational foundations of assumed strain methods", *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 53, pp. 51-54, (1986).
15. C. Militello y C.A. Felippa, "The First ANDES Elements: 9-DOF plate bending triangles", *Report CU-CSSC-89-22*, University of Colorado at Boulder, (1989).
16. K. Washizu, "Variational Methods in Elasticity and Plasticity", Pergamon Press, (1968).
17. E. Reissner, "On a variational theorem in elasticity", *Journal of Mathematics and Physics*, Vol. 29, pp. 90-95, (1950).
18. C.A. Felippa y C. Militello, "Developments in Variational Methods for High-Performance Plate and Shell Elements", *Report CU-CSSC-89-09*, University of Colorado at Boulder, (1989).
19. B.M. Fraeijs de Veubeke, "Displacement and equilibrium models in the finite element method", Capítulo 9 en *Stress Analysis*, editado por O.C. Zienkiewicz y G. Hollister, John Wiley, (1965).
20. R.J. Melosh y P.V. Marcal, "An energy basis for mesh refinement of structural continua", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 11, pp. 1083-1091, (1977).