Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería. Vol. 3, 1, 15-22(1987)

ESTIMACION COMPUTACIONAL DEL ERROR DE DISCRETIZACION

JOSE MANUEL GARCIA CONCA

Centro de Cálculo del INTA
Ctra. Torrejón-Ajalvir (Torrejón de Ardoz)
Madrid

RESUMEN

Se demuestra que en las Aplicaciones de los Métodos Numéricos a la Ingeniería, es necesario generar y verificar Sucesiones Numéricas para obtener, a la vez, Soluciones Aproximadas y sus correspondientes Estimaciones de Error, requeridas, ambas, cuando no existe Solución Exacta o mientras no se disponga de Soluciones Experimentales clásicas.

Se concluye que la Estimación Computacional presentada permite obtener, fácilmente, el Error de Discretización en Aplicaciones del Método de los Elementos Finitos, generando y verificando una Sucesión de Aproximaciones específicas $\{u_h\}$ que, en determinadas condiciones, converge como una Serie Geometría de Razón conocida (r).

SUMMARY

It is shown that in the Applications of the Numerical Methods to Engineering it is neccesary to produce and verify Numerical Sequences in order to obtain, at the same time, Approximate Solutions and their corresponding Error Estimates, required, both, when there is no Exact Solution or while classical Experimental Solutions are not yet available.

It is concluded that the Computational Estimate presented allows to obtain, easily, the Discretization Error in Applications of the Finite Element Method, by producing and verifying a specific Sequence of Approximations $\{u_h\}$ that, in some circunstances, converges like a Geometrical Series of known Rate (r).

INTRODUCCION

En la Ingeniería de Diseño, durante el estudio de un Modelo Matemático determinado, suele ser necesaria una cierta Discretización del Dominio (D) donde se define la Solución Exacta (u) antes de realizar el Cálculo de la correspondiente Solución Aproximada (u_h) en el Reticulado Discreto (D_h) elegido. Este es el caso, por ejemplo, del Análisis de Estructuras mediante el Método de los Elementos Finitos u otros y el de otras muchas Aplicaciones.

El Problema fundamental que dicha Discretización plantea al Ingeniero es la inexistencia de criterios a priori que le orienten sobre la forma y el tamaño de los Elementos, o similares, en cada zona de D_h. En definitiva, incluso una vez elegidas

Recibido: Octubre 1986

ISSN 0213-1315

formas y tamaños locales semejantes que, en principio, parezcan convenientes en una Aplicación concreta **se carece de indicaciones rigurosas sobre el Diámetro** *(h)* **que caracteriza al Reticulado en cuestión y que garantice un Error de Discretización aceptable** e_D).

En efecto, aunque en general la Teoría permite anticipar que, en cada Punto de D_h (Runge):

$$e_D = C_p h^p \tag{1}$$

para un Diámetro h y un Método de Orden p, nada puede decirse de antemano por ser C_p una función desconocida de argumento desconocido y, por tanto, difícilmente acotable en general. En estas circunstancias es generalmente imposible utilizar dicha expresión para elegir h a priori pese a lo que es práctica habitual en aplicaciones académicas ("acotar" C_p) o pragmáticas ("tantear" h).

En este orden de ideas conviene subrayar que e_D no puede conocerse exactamente en general salvo en casos triviales que admitan Solución Exacta, de interés exclusivamente académico. En otro orden de ideas, las Soluciones Experimentales, pese a su enorme valor científico, no están disponibles hasta mucho después de haber ultimado el Diseño y, por ello, no tiene utilidad invocarlas en sus etapas intermedias de Cálculo en el contexto de la Matemática Aplicada.

En este contexto, basándose en la expresión (1) y en los propios resultados generales de Verificación de Sucesiones (ver Referencias), sin embargo, es posible disponer de una alternativa practicable en cada caso concreto. Este procedimiento es una sistematización de las prácticas habituales de tanteo y de algunas teorías clásicas de extrapolación, consistente en elegir los Diámetros de la forma (B número natural):

$$h_{k+1} = h_k/B \qquad k = 0, 1, 2\ldots \tag{2}$$

donde h_o se elige arbitrariamente, mientras que B suele ser 2 por razones computacionales (base digital).

La combinación de (1) y (2), en determinadas circunstancias, garantiza la Convergencia de la Sucesión $\{ u_h \}$ y, lo que es más importante, permite asegurar que es Monótona con Razón:

$$r = B^{-p} \tag{3}$$

función únicamente de B y p, ambos conocidos de antemano. En definitiva, pues, en el Límite deberá tenerse esta Relación de Incrementos en la Serie compañera de la Sucesión, lo que es directamente verificable como se demostrará e ilustrará a continuación.

La estimación de e_D es entonces inmediata, como se verá. Es de destacar que dicha estimación no hace referencia alguna a Soluciones Exactas y/o Experimentales pero, por ello, sólo es aproximada, aunque debe serlo en el grado deseado, y no debe reemplazar a la estimación final - que solamente puede realizarse en el contexto de la Física Experimental en última instancia, supuesta factible.

FUNDAMENTOS

El fundamento básico de esta Verificación de Sucesiones es el hecho, demostrado e ilustrado en las Referencias propias, de que la Razón de Convergencia es específica de cada Aplicación. En este caso, anticipado en la Introducción, teniendo en cuenta que $B \geqslant 2$ y $p \geqslant 1$ son constante, dicha Razón también lo es, de modo que la Convergencia es Lineal y no demasiado rápida en general[1].

La fundamentación concreta de esta Estimación Computacional estriba en que dicha Razón es la Relación entre un término y el anterior de la Serie que genera la Sucesión, es decir, la que tiene por término general Δu_h en este caso. En el Límite, el Error, es decir, el Resto de la Serie vale, evidentemente:

$$e_{D_k} = \frac{\Delta u_k}{1 - r_k} \tag{4}$$

luego dicha Relación es, precisamente, la de los Errores que, según (1) y (2) es, precisamente, (3) en este caso.

Esto implica que C_p existe, está acotada y tiende a una constante en el Límite o sea que el Método de Discretización es Consistente. Además, para ello no debe haber acumulación de Errores de Redondeo, es decir que el Método sea, además, Estable, todo ello de acuerdo con el Teorema de Lax (Consistencia+Estabilidad=Convergencia).

Es importante, sin embargo, observar que con todo ello no sólo se garantiza la Convergencia sino, además, una Razón de Convergencia la cual resulta muy fácil de verificar. Por otra parte, obsérvese que la acotación del Error no puede hacerse con los Incrementos porque éstos son solamente el Término General de la Serie, de modo que su acotación es necesaria pero no suficiente en general.

En otro orden de ideas y ya, realmente, de cara a las Aplicaciones, es importante mantener k pequeño, por razones computacionales, especialmente en Problemas Tridimensionales. En el caso del Método de los Elementos Finitos con Dominios Tridimensionales con $B=2$, cada subdivisión del Diámetro Típico multiplica por $B^3=8$ el número de Elementos, con lo que el número de Puntos y, en consecuencia, el Espacio de Memoria y el Tiempo de Cálculo pueden ser prohibitivos.

En principio esta es una cuestión que no afecta a los Fundamentos. En realidad afecta a las Aplicaciones pero sus efectos se minimizan si se toman solamente tres valores de k (0, 1 y 2) tanteando con cierto h_1 (la elección habitual) como se indica a continuación.

APLICACIONES

La aplicación de este procedimiento se ilustra con tres Ejemplos:

1. Cuadratura
2. Ecuaciones en Derivadas Parciales
   2.1. Método de Diferencias Finitas
   2.2. Método de Elementos Finitos

1. Cuadratura

Dados $f(x)$ y e_{max}

Calcular $\quad u = \int_0^1 f\,dx \quad \text{con} \quad e_D < e_{max}$

El Reticulado elegido, por comodidad, es uno Equidistante, de modo que h es constante y $nh=1$.

Los Métodos elegidos son dos, ambos de Newton-Cotes, de Ordenes $p=2$ (Trapecio) y 4 (Simpson).

El h_0 elegido es 1, por simplicidad, ya que en este caso ello no se traduce en mucho más trabajo computacional.

En el caso de una función Suave los resultados son absolutamente satisfactorios y se han representado en la Figura 1.

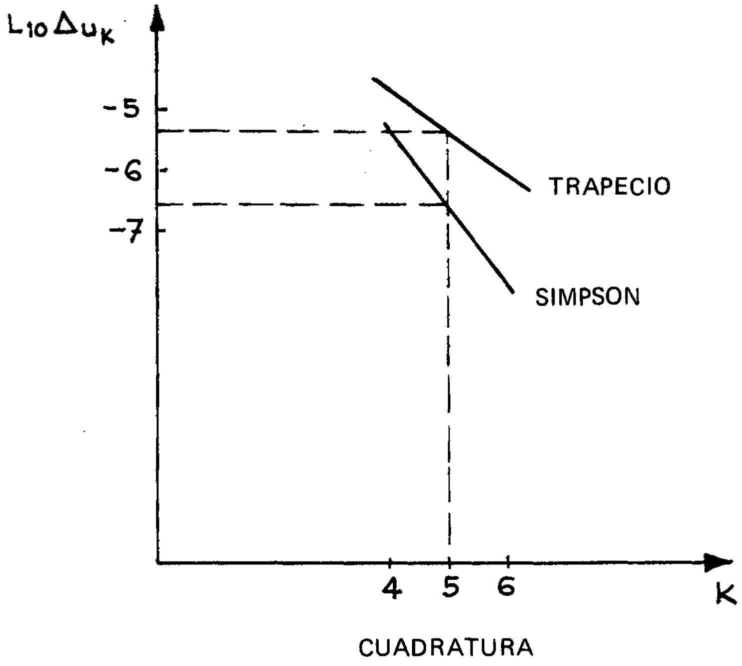

Figura 1.

La interpretación de la Figura 1 es que con $k=5$ se ha conseguido la Razón de Convergencia Límite $r=.25$ (Trapecio) ó .0625 (Simpson) y una acotación razonable de e_D aunque la elección de uno u otro Método dependerá del valor de e_{max} evidentemente[2].

Esta Aplicación es muy elemental y, sin embargo, pone de manifiesto que, incluso aquí, la elección de h dista de ser trivial y no puede hacerse a priori en general.

2. Ecuaciones en Derivadas Parciales

Dados $f(x)$ y e_{max} con $\Delta u = -f \quad u_c = 0$

Calcular $u(x,y)$ con $e_D < e_{max}$

El Reticulado elegido, por comodidad, es uno Equidistante Cuadrado, con h constante, análogamente.

Los Métodos elegidos son dos y se tratan separadamente.

2.1 Método de Diferencias Finitas

El Esquema utilizado es el de los Cinco Puntos ($p = 2$), los Algoritmos empleados para la resolución de los Sistema Algebraicos Lineales resultantes son los de Sobrerelajación con Factor Optimo y muy pequeña tolerancia para eliminar los efectos de otros Errores (Truncación y Redondeo).

Los Resultados se han representado en la Tabla 1 solamente para u_{max}, aunque lo mismo se haría para otro u, de modo que se considera e_D escalar, pero no habría inconveniente en considerarlo vector si se tomasen las normas vectoriales oportunas.

k	u_{max}	Δu_{max}	r	Observaciones
1	.500000	.0625	–––	
2	.562500	.0197	.31	
3	.582261	.0053	.26	
4	.587564	.0013	.25	Límite (p=2)
5	.588955	–––	–––	Resultado

NOTA: Para k mayores se producen anomalías (incrementos negativos, etc) debidos al Redondeo (B=2).

TABLA 1
EDP Poisson-Dirichlet en el Cuadrado MDF

k	u_{max}	Δu_{max}	r	Observaciones
0	2.6802	0.0277	–––	
1	2.7079	0.0077	.35	Lejano (p=2?)
2	2.7156	–––	–––	Inaceptable

NOTA: Para k mayores no hay resultados en el original pero serían necesarios uno o dos pasos más (ver Tabla 1; aunque no se trata del mismo Problema: f diferente).

TABLA 2
EDP Poisson-Dirichlet en el Cuadrado MEF

La interpretación es inmediata, como antes, y es que se ha alcanzado la Razón de Convergencia Límite Teórica $r = .25$ para $k = 4$ y una acotación de Error Estimado (Tabla 1, ver lo que sigue)[3]:

$$e_D = \frac{.0013}{.75} \times .25 < 5. \times 10^{-4}$$

Esta Aplicación, aunque un tanto académica, ya no es elemental pues la aritmética involucrada es considerable y los errores de los algoritmos auxiliares influyen fuertemente en la verificación.

En este caso se conoce la Solución Exacta y esto puede aprovecharse para cotejar la estimación correspondiente a k=5 de la que no se conoce el incremento por ser la última calculada. La estimación del incremento es inmediata: r veces el anterior, de modo que el error estimado es la cuarta parte del arriba obtenido o sea menos de 5×10^{-4} lo que permite asegurar que las tres primeras cifras decimales son exactas; este valor, redondeado a la tercera cifra decimal coincide con las tres primeras cifras del valor exacto, lo que puede ser aceptable en este contexto: si no lo fuese convendría utilizar un Método más rápido, es decir, de mayor Orden.

2.2 Método de los Elementos Finitos

El Elemento utilizado es desconocido (p ?) ya que los resultados se han tomado de las referencias.

Los Diámetros sucesivos están en la proporción B=2 y se limitan a los tres imprescindibles según se ve en la Tabla 2. (ver[6] Capítulo 7 Tabla 7.1).

La interpretación de la Tabla 2 es simple: se aprecia una Convergencia Monótona. Sin embargo, la aplicación del procedimiento anterior indica claramente que (r_1=.35) se está lejos del Límite (presumiblemente r=.25) y, por tanto, dichos resultados son inaceptables; hay que seguir iterando (o cambiar de Elementos).

Es importante insistir en que en las Aplicaciones no basta con elegir Métodos Convergentes: hay que asegurarse de haberlos llevado al Límite pues, de otro modo, dichos resultados no tienen sentido alguno y se compararán muy mal con la Solución Exacta y/o las Experimentales y en este sentido este procedimiento es, evidentemente, de gran ayuda incluso cuando, como en este caso, se tiene muy poca información sobre la Sucesión de Aproximaciones.

Esta Aplicación, inicialmente académica, ilustra un hecho frecuente en la práctica profesional: la elección tentativa de un Diámetro no sirve ni siquiera cuando se completa con las tres mínimas aquí sugeridas, si no se verifica la Convergencia como ahora se ha hecho, aunque el resultado haya sido negativo en apariencia: **al menos se sabe que los resultados son inaceptables por haber truncado prematuramente la Sucesión**, es decir son cualitativamente rechazables como aproximación de los exactos en el contexto de la Matemática Aplicada: la cifra de las centésimas es errónea.

CONCLUSIONES

La Discretización de todo Modelo Matemático implica la Elección de Reticulados D_h y, en particular, la Selección de un Diámetro h, así como la de un Método de Orden p que determinan el correspondiente Error de Discretización, según (1).

Las Estimaciones de dicho Error e_D no pueden basarse, en la práctica, en el conocimiento previo de la Solución Exacta u ni en la obtención posterior de una Solución Experimental U, ambas inexistentes o no disponibles en las etapas intermedias de Cálculo en un Diseño determinado.

Esta Estimación Computacional es una alternativa, entre académica y experimental, practicable en todos los casos, que sólo requiere generar y verificar una Sucesión de Aproximaciones u_h correspondiente a Reticulados Semejantes según (2).

Este Procedimiento, en determinadas circunstancias, garantiza una Convergencia Monótona de Razón Conocida, según (3) y cuya verificación permite, en todo caso, decidir si se ha llegado o no al Límite y, en su caso, decir cuál es el Error, según (4).

El costo de este Procedimiento, que es mínimo cuando sólo se utilizan tres Diámetros, es el cálculo de un número de casos adicionales, dos como mínimo, lo que se traduce en unas mayores necesidades de Memoria y Tiempo de Computadora, dependientes de Modelo, que pueden llegar a ser prohibitivas según se ha ilustrado y se detalla en las Referencias.

En definitiva, es necesario y factible tener una estimación del error en cada caso concreto durante el Diseño, aún a costa de incrementar el Cálculo requerido, como en la estimación computacional propuesta.

AGRADECIMIENTOS

El autor desea agradecer a los Editores de esta Revista y Organizadores del Simposio la doble oportunidad de exponer este tema en ambos contextos ampliando así la difusión del mismo a ámbitos más extensos y específicos donde este procedimiento pueda ser utilizado y/o discutido.

REFERENCIAS

1. J.M.Gª CONCA, Verificación de Sucesiones Numéricas *IAA*, n.º 154, (1976).
2. J.M.Gª CONCA, Algunas Contribuciones al Análisis de Sucesiones Numéricas *IAA*, n.º 265, (1985).
3. J.M.Gª CONCA, Nuevas Verificaciones de Sucesiones *INTA*, (1986).
4. J.M.Gª CONCA, Verification par ordinateur de Successions, *XIX Congrés National d'Analyse Numerique*, (1986).
5. J.M.Gª CONCA, Estimación Computacional del Error, *II Simposio Aplicaciones MEF en la Ingeniería*, (1986).
6. A. J. DAVIES, *The FEM: a first approach.* Oxford, (1980).