UNA METODOLOGÍA DE ESTIMACIÓN DE ERROR MEDIANTE ELEMENTOS MIXTOS

Felipe Gabaldón^{*} y Jose M. Goicolea^{*}

*Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos (ETSICCP) Universidad Politécnica de Madrid Ciudad Universitaria s/n 28040 Madrid, España e-mail: felipe@mecanica.upm.es, página web: http://filemon.mecanica.upm.es

RESUMEN

En este artículo se describe una metodología para la estimación del error empleando los elementos de deformaciones supuestas (EAS) propuestos inicialmente por Simo y Rifai¹¹ y posteriormente generalizados para grandes deformaciones.^{1,12}

Se analiza la relación entre los modos mejorados y la calidad de la solución obtenida mediante elementos finitos en problemas de mecánica de sólidos. Dicho análisis se realiza en el contexto de la estimación de error. Tomando como base el trabajo de Radovitzky y Ortiz⁹ para la estimación de error en problemas altamente no lineales, se cuantifica la contribución de los modos de deformación mejorados mediante la norma de la energía. La metodología de estimación de error que se propone, tiene las ventajas de estar formulada localmente, realizandose el cálculo elemento por elemento, y de tener una interpretación física clara.

En el artículo se describe de manera general la formulación del estimador de error propuesto, particularizandose posteriormente para problemas de elasticidad, lineal y no lineal, y plasticidad. Se presentan los resultados obtenidos en algunos ejemplos númericos significativos, haciendo énfasis en la distribución local del error y en la tasa de convergencia global de la malla.

INTRODUCCIÓN

Actualmente el Método de los Elementos Finitos es una herramienta de cálculo habitual para el ingeniero no especialista en métodos numéricos, dentro del ciclo de cálculo, diseño y comprobación de estructuras. Por esta razón hoy no basta con conocer la solución del problema que se aborda, sino que es necesario tener información sobre la calidad de los resultados obtenidos.

El interés de los métodos de estimación de error "a posteriori" es su aplicación directa e indispensable para las técnicas de remallaje adaptativo. Su desarrollo comienza a finales de los años setenta con los trabajos pioneros de Babuška et.al.² Desde estos inicios hasta la época actual se han propuesto diversos estimadores en el campo del análisis lineal, cuya eficacia se ha probado en un amplio rango de problemas.

Sin embargo, en el ámbito de los problemas no lineales los principales desarrollos no se han realizado hasta esta década, quedando aún muchos problemas abiertos. Han sido punteros los trabajos de Ortiz y Quigley⁸ en problemas de localización, de Johnson y Hansbo⁷ en el contexto del modelo elastoplástico de Hencky, el estimador de Bartholdt et.al.³ que aplica a modelos elastoplásticos tanto de Hencky como de Prandtl-Reuss, etc. Por último cabe destacar el trabajo reciente de Radovitzky y Ortiz⁹ sobre estimación de error para problemas altamente no lineales. En él se abordan problemas en el contexto de las grandes deformaciones para hiperelasticidad, viscoplasticidad, dinámica, etc.

LA FORMULACIÓN DE ELEMENTOS FINITOS CON DEFORMACIONES SUPUESTAS

La formulación de elementos finitos con deformaciones supuestas se basa en la solución aproximada de las ecuaciones variacionales que derivan del funcional de Hu-Washizu. Se admite que existe para cada punto $\boldsymbol{x} \in \Omega$ una función W que define la densidad de energía interna por unidad de volumen, y que depende del tensor de deformaciones lineal $\boldsymbol{\varepsilon}$, o del tensor gradiente de deformaciones \boldsymbol{F} en la formulación con deformaciones finitas.

En el contexto de las deformaciones infinitesimales, la idea clave es una reparametrización del campo de deformaciones de la forma:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underbrace{\nabla^s \boldsymbol{u}}_{\text{compatible}} + \underbrace{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{\text{mejorada}}; \tag{1}$$

Donde $\nabla^s \boldsymbol{u}$ (parte simétrica del gradiente de desplazamientos) es la componente "compatible" del campo de deformaciones, y $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ es la componente "mejorada" (incompatible) del mismo. Esta denominación responde a que, aunque para la solución exacta el campo $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ es nulo, para la solución aproximada en una malla discreta, este campo permite mejorar dicha aproximación. No es preciso imponer ningún requerimiento de continuidad a priori al campo $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ entre los distintos elementos.

En el contexto de las grandes deformaciones, las variables básicas son los campos de desplazamientos, tensiones y gradiente de deformaciones. En este caso, el gradiente de deformaciones \boldsymbol{F} se reparametriza con una descomposición aditiva de la forma:

$$\boldsymbol{F} = \underbrace{\boldsymbol{\nabla}_{X}\boldsymbol{\varphi}}_{\text{compatible}} + \underbrace{\tilde{\boldsymbol{F}}}_{\text{mejorada}}$$
(2)

donde ∇_X es el operador gradiente y φ es la función deformación que transforma la configuración de referencia en la configuración deformada.

METODOLOGÍA PARA LA ESTIMACIÓN DE ERROR

En esta sección se describe el marco general en el que se plantea la metodología de estimación de error. Con este fin, se establece la estructura variacional del problema de contorno, la metodología de aproximación mediante elementos finitos y los requerimientos para formular estimadores, locales y globales, del error de discretización.

Estructura variacional del problema de contorno

Sea un problema de contorno, cuyo campo incognita denominaremos \boldsymbol{u} , expresado mediante un operador \boldsymbol{A} , tal que:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{0} \quad \text{en } \Omega \cup \partial \Omega \tag{3}$$

En lo sucesivo se particularizará (3) al caso de la mecánica de sólidos, en el cual \boldsymbol{u} es el campo de desplazamientos. Suponiendo que (3) tiene estructura variacional, la forma de Dirichlet $a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}]$ del funcional $\prod_p(\boldsymbol{u})$, asociado al problema (3) se define como:

$$a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}] = \int_{\Omega} \frac{\partial^2 W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{x})}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \eta_{i,j} \eta_{k,l} d\Omega$$
(4)

siendo $\boldsymbol{\eta} \in V : \Omega \to \mathbb{R}^n$ variaciones admisibles y V el espacio de funciones de energía finita. La forma de Dirichlet $a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}]$ es regular si se verifica:

1.
$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{x})}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} < \infty, \ \forall \boldsymbol{x} \in \Omega \Leftrightarrow C_{ijkl} \in L^{\infty}(\Omega, \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$$
 (5)

2.
$$a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}] > C \|\boldsymbol{\eta}\|_{1,2}^2$$
 $C \in \mathbb{R}^+$ (condición de coercividad) (6)

donde L^{∞} es el espacio de Lebesgue de orden infinito y $\|\cdot\|_{1,2}$ es la norma de Sobolev de grado 1 y orden 2. Si la forma de Dirichlet (4) verifica las hipótesis de regularidad (5, 6), entonces se cumple:

i) Π_p es convexo

ii) Π_p tiene un mínimo y es único; es decir, la solución \boldsymbol{u} del problema de contorno verifica:

$$\Pi_p(\boldsymbol{u}) = \inf_{\boldsymbol{v} \in V} \Pi_p(\boldsymbol{v}) \tag{7}$$

Metodología de aproximación con elementos compatibles

Sea $V_h \subset V | \dim(V_h) < \infty$ y $V_h \to V$ cuando $h \to 0$. En el caso de la elasticidad lineal, las ecuaciones de Euler-Lagrange del principio variacional asociado al funcional $\Pi_p(\boldsymbol{u})$ son:

$$a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{u},\boldsymbol{\eta}] - \langle \boldsymbol{b},\boldsymbol{\eta} \rangle = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in V$$
(8)

siendo $< b, \eta >$ el producto escalar:

$$=\int_{\Omega}oldsymbol{b}\cdotoldsymbol{\eta}d\Omega$$

Al plantear (8) en el espacio de dimensión finita V_h resulta:

$$a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{\eta}_h] - \langle \boldsymbol{b},\boldsymbol{\eta}_h \rangle = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_h \in V_h$$
(9)

Como $V_h \subset V$, particularizando (8) también se verifica:

$$a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{u},\boldsymbol{\eta}_h] - \langle \boldsymbol{b},\boldsymbol{\eta}_h \rangle = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_h \in V_h$$
(10)

Restando (9) y (10), si el problema es lineal se obtiene:

$$a(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{\eta}_h] = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_h \in V_h$$
(11)

La ecuación (11) establece que la solución de elementos finitos minimiza $\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_E$, y se denomina propiedad de aproximación óptima del método de elementos finitos:

$$\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_E = \inf_{\boldsymbol{v}_h \in V_h} \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}_h\|_E$$
(12)

Estimación local del error

En terminos generales, la solución aproximada por elementos finitos se plantea en el dominio discreto Ω^h que se construye discretizando el dominio Ω mediante n_{el} elementos Ω^e , tal que:

$$\bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega^{e} = \Omega_{h}$$
$$\Omega^{e}_{i} \cap \Omega^{e}_{j} = \emptyset \quad \forall i \neq j$$

Sea Ω^e un elemento no degenerado en \mathbb{R}^n y $\mathbb{P}_p(\Omega^e)$ el conjunto de polinomios de grado p en Ω^e . Sea $\boldsymbol{u}^e \in H^1(\Omega^e, \mathbb{R}^n)$ el campo de desplazamientos exacto en el elemento e y $\boldsymbol{u}_h^e(\boldsymbol{x}) = \sum_{a=1}^{n_{node}} \boldsymbol{u}_a N_a(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{P}_p(\Omega^e)$ el polinomio interpolante,

de dimensión finita, de la solución exacta \boldsymbol{u}^{e} , donde n_{node} es el número de nodos del elemento e.

La función de error local en el elemento e se define como la diferencia del campo de desplazamientos exacto y el campo de desplazamientos calculado por elementos finitos:

$$oldsymbol{E}^e(oldsymbol{x}) = oldsymbol{u}^e(oldsymbol{x}) - oldsymbol{u}^e_h(oldsymbol{x})$$

El problema que se plantea en la estimación local del error es obtener una cota de la función local de error, del tipo:

$$\|\boldsymbol{u}^e - \boldsymbol{u}_h^e\| \le C(h^e)^{\alpha} |\boldsymbol{u}^e| \tag{13}$$

donde:

C : constante real positiva h^e : diametro de la circunferencia circunscrita a Ω^e $|\boldsymbol{u}^e|$: seminorma de \boldsymbol{u}^e α : tasa de convergencia

siendo dependiente la definición de la seminorma utilizada en (13) de la definición de la norma de error que se establezca. La expresión (13) se verifica si se cumple la propiedad de aproximación óptima (12) y las condiciones de regularidad expresadas en (5) y (6).⁵

Estimación global del error

Siendo:

$$oldsymbol{u}_h^e(oldsymbol{x}) = \sum_{a=1}^{n_{node}}oldsymbol{u}_a N_a(oldsymbol{x})$$

las funciones de interpolación de $\boldsymbol{u}^{e}(\boldsymbol{x})$, el *Polinomio interpolante global* $\boldsymbol{u}_{h}(\boldsymbol{x})$ se define como:

$$oldsymbol{u}_h(oldsymbol{x}) = \sum_{e=1}^{n_{el}}oldsymbol{u}_h^e(oldsymbol{x})$$

Si las funciones de forma N_a cumplen la condición de conformidad, se cumple: $\boldsymbol{u}_h^e(\boldsymbol{x}) \in H^1(\Omega^e, \mathbb{R}^n) \Rightarrow \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x}) \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^n)$, donde H^1 es el espacio de Hilbert de orden 1.

Para obtener una cota de la función de error global: $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x})$, la seminorma de $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})$ empleada en (13) se expresa como la suma de las contribuciones de cada elemento. Si se emplea la norma de la energía resulta:⁵

$$|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h|_{1,2} \le \sum_{e=1}^{n_{el}} C \frac{(h^e)^2}{\rho^e} |\boldsymbol{u}^e|_{2,2}$$
 (14)

La expresión (14) indica que la cota del error global se puede expresar como la suma de las cotas de error de cada elemento. Asimismo, asumiendo las hipótesis de regularidad (5,6) y en virtud de la desigualdad de Poincaré, la seminorma $|\cdot|_{1,2}$ se puede sustituir en (14) por la norma de la energía, resultando:

$$\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_E \le C \sum_{e=1}^{n_{el}} \frac{(h^e)^2}{\rho^e} |\boldsymbol{u}^e|_{2,2}$$
(15)

ESTIMADOR DE ERROR PROPUESTO

La expresión (15) tiene el inconveniente práctico de acotar el error en función del campo \boldsymbol{u}^e que es la incógnita básica del problema y de la que sólo se conoce la solución aproximada \boldsymbol{u}_h^e . Esta solución no puede sustituirse directamente por \boldsymbol{u}^e dado que \boldsymbol{u}_h^e es un polinomio de grado k y la seminorma empleada es de orden k + 1 ($D^{\alpha}\boldsymbol{u}_h^e = 0$ para $|\alpha| = k + 1$)

Las técnicas de estimación de error se basan en la sustitución de u^e por otro campo, de manera que la cota de error así calculada sea realista. La forma de realizar dicha sustitución da lugar a distintos estimadores de error.

En este trabajo se propone un estimador de error de la solución \boldsymbol{u}_h obtenida con elementos formulados en desplazamientos, que se basa en la solución \boldsymbol{u}_{enh} obtenida con los elementos de deformaciones supuestas mejoradas, descritos en la sección . Empleando la propiedad de la desigualdad triangular:

$$\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_E \le \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\text{enh}}\|_E + \|\boldsymbol{u}_{\text{enh}} - \boldsymbol{u}_h\|_E$$
(16)

Si se supone que los ordenes de convergencia son:

$$\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\text{enh}}\|_E = o(h^m, \cdots)$$
(17)

$$\|\boldsymbol{u}_{\text{enh}} - \boldsymbol{u}_{h}\|_{E} = o(h^{p}, \cdots)$$
(18)

y que, al menos en el regimen asintótico, se cumple:

$$m > p$$
 (19)

Entonces, cuando se alcanza el régimen asintótico ($h \rightarrow 0$), en la parte derecha de la expresión (16) el primer sumando es mucho menor que el segundo, pudiendose establecer que:

$$\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\|_E \le C \|\boldsymbol{u}_{\text{enh}} - \boldsymbol{u}_h\|_E \quad C \in \mathbb{R}^+$$
(20)

Esta hipótesis establece que las soluciones $\boldsymbol{u}_{\mathrm{enh}}$ y \boldsymbol{u}_h convergen a la solución exacta, de manera que:

- 1. $\|\boldsymbol{u}_{\text{enh}} \boldsymbol{u}_h\|_E$ decrece según se refina la malla
- 2. La solución obtenida con los elementos mejorados se aproxima a la solución exacta "mejor" que la solución de elementos en desplazamientos a la solución de elementos mejorados.

El estimador local de error que se propone es:

$$(E^e)^2 = \|\boldsymbol{u}_{enh}^e - \boldsymbol{u}_h^e\|_E$$
(21)

y, de acuerdo con lo descrito en el apartado anterior, el error global se obtiene mediante la suma de las contribuciones elementales:

$$E^{2} = \sum_{i=1}^{n_{el}} (E^{i})^{2}$$
(22)

El error de discretización asociado a los elementos formulados en desplazamientos se cuantifica a través de la energía elástica asociada a los modos incompatibles, si el problema se resuelve con elementos mejorados.

La cota del error discretización que se propone en (22) tiene como ventaja que es una cota local y por tanto se evalúa elemento por elemento, sin necesidad de tener que calcular suavizados globales, ni solucionar el problema en subdominios con varios elementos.

CONTRIBUCIÓN ENERGÉTICA DE LOS MODOS INCOMPATIBLES

En este apartado se detalla la aplicación de la expresión (21) para la estimación del error en problemas de elasticidad infinitesimal, de elasticidad con deformaciones finitas empleando modelos constitutivos hiperelásticos y en problemas de plasticidad de Von Mises con pequeñas deformaciones.

Elasticidad infinitesimal

Para el caso de la elasticidad lineal infinitesimal, la forma de Dirichlet (4) se expresa:

$$a[\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} C_{ijkl}(\boldsymbol{x}) d\Omega$$
(23)

siendo C_{ijkl} el tensor consitutivo elástico. Sustituyendo (1) y (23) en (21), resulta:

$$(E^{e})^{2} = \frac{1}{2} \int_{\Omega^{e}} \tilde{\varepsilon}_{ij} \tilde{\varepsilon}_{kl} C_{ijkl}(\boldsymbol{x}) d\Omega$$
(24)

El error global se define mediante la integral (24) extendida a todo el dominio:

$$E^{2} = \int_{\Omega} \tilde{\varepsilon}_{ij} \tilde{\varepsilon}_{kl} C_{ijkl}(\boldsymbol{x}) d\Omega$$
(25)

con lo que dicho error se puede expresar, de acuerdo con (22), como suma de los errores elementales.

Elasticidad con deformaciones finitas

En el caso de la elasticidad con deformaciones finitas, el campo incógnita es la función deformación $\varphi : \Omega \to \Omega_t$, donde Ω es la configuración de referencia y Ω_t es la configuración deformada en el instante t. Los desarrollos de la sección anterior son válidos en este caso sin más que sustituir el campo de desplazamientos u por la deformación φ , y el tensor de deformaciones infinitesimales ε por el gradiente de deformaciones F. En cuanto a la metodología de aproximación mediante elementos compatibles anteriormente descrita, al restar las ecuaciones (9; 10), en este caso se obtiene:

$$a(\boldsymbol{\varphi})[\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\eta}_h] - a(\boldsymbol{\varphi}_h)[\boldsymbol{\varphi}_h,\boldsymbol{\eta}_h] = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_h \in V_h$$
(26)

que no es similar al expresado en (11), dado que la forma de Dirichlet $a(\varphi)[\cdot, \cdot]$ es no lineal. Sin embargo, en la hipótesis de que se esté en régimen asintótico $(h \to 0)$, en el cual la solución numérica φ_h es aproximadamente igual a la solución exacta φ , la ecuación (26) se puede linealizar, obteniendo:

$$a(\boldsymbol{\varphi})[\boldsymbol{\varphi} - \boldsymbol{\varphi}_h, \boldsymbol{\eta}_h] = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_h \in V_h, \quad h \to 0$$
(27)

Esta condición establece, en el régimen asintótico, la propiedad de aproximación óptima del método de elementos finitos para el caso general de la elasticidad no lineal:

$$\|\boldsymbol{\varphi} - \boldsymbol{\varphi}_h\|_E = \inf_{\boldsymbol{v}_h \in V_h} \|\boldsymbol{\varphi} - \boldsymbol{v}_h\|_E$$
(28)

La expresión del estimador de error local propuesto en (21) es en este caso:

$$(E^e)^2 = \|\boldsymbol{\varphi}_{\text{enh}}^e - \boldsymbol{\varphi}_h^e\|_E \tag{29}$$

siendo igualmente necesario hacer la hipótesis expresada en las ecuaciones (17;18;19).

La implementación numérica de (29) se hace en la configuración deformada. En esta configuración, la norma de la energía es:

$$\|\boldsymbol{\varphi}\|_E^2 = \int_{\Omega_t} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl} d\Omega \tag{30}$$

donde e_{ij} es el tensor de deformaciones de Almansi y C_{ijkl} es el tensor elástico tangente, que relaciona la tensión de Kirchhoff con la deformación de Almansi:

$$\dot{\tau}_{ij} = C_{ijkl} \dot{e}_{kl} \tag{31}$$

La expresión del estimador de error que se ha implementado es:

$$(E^{e})^{2} = \frac{1}{2} \int_{\Omega^{e}} \left[e_{ij} - e_{ij}(\boldsymbol{u}) \right] \left[e_{kl} - e_{kl}(\boldsymbol{u}) \right] C_{ijkl}(\boldsymbol{x}) d\Omega$$
(32)

Al contrario de lo que sucedía en el caso de la elasticidad lineal, como los tensores que intervienen en la expresión (32) son no lineales, el estimador de error depende de la parte compatible del gradiente de deformaciones F(u) y de la parte mejorada \tilde{F} .

Definiendo el error global mediante la expresión (32) extendida a todo el dominio Ω , este se puede expresar como suma de los errores elementales:

$$E^2 = \sum_{i=1}^{n_{el}} (E^i)^2 \tag{33}$$

Plasticidad

Para que el problema de la plasticidad posea estructura variacional y sea aplicable la metodología de estimación de error descrita en la sección , es necesario integrar las ecuaciones constitutivas de manera adecuada.

La integración variacional de las ecuaciones de la plasticidad¹⁰ postula la existencia de una función incremental de densidad de energía $W_{t+\Delta t}$, tal que:

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t} = \frac{\partial W_{t+\Delta t}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{t+\Delta t}^{e}} \tag{34}$$

En el caso de la plasticidad infinitesimal de Von-Mises con endurecimiento isotrópico, el potencial incremental depende de la deformaciónes, de las deformaciones plásticas y de la variable interna ξ , que es la deformación plástica efectiva. La expresión del potencial es:

$$W_{t+\Delta t}(\boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{\xi}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t}, \boldsymbol{\xi}_{t}) = \min_{\boldsymbol{\xi}_{t+\Delta t}} \left(\Psi_{t+\Delta t}(\boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{\xi}_{t+\Delta t}) - \Psi_{t}(\boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t}, \boldsymbol{\xi}_{t}) \right)$$
(35)

siendo $\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}^{e}, \boldsymbol{\xi})$ la función de energía libre. La condición de mínimo en el término de la derecha de (35), equivale a imponer la condición:

$$\frac{\partial \Psi_{t+\Delta t}(\boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{\xi}_{t+\Delta t})}{\partial \boldsymbol{\xi}_{t+\Delta t}} = 0$$
(36)

Admitiendo que la respuesta elástica es independiente de los fenómenos asociados a las distorsiones irreversibles de la red cristalina, la densidad de energía libre Ψ se puede descomponer aditivamente en una parte elástica y en una parte irreversible. Asimismo si se admite la descomposición aditiva del tensor de deformaciones:

$$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}^{e},\boldsymbol{\xi}) = \Psi^{e}(\boldsymbol{\varepsilon}^{e}) + \Psi^{p}(\boldsymbol{\xi}) \qquad \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{e} + \boldsymbol{\varepsilon}^{p}$$
(37)

el potencial incremental $W_{t+\Delta t}$ se reescribe

$$W_{t+\Delta t} = \min_{\xi_{t+\Delta t}} \left(\Psi_{t+\Delta t}^{e}(\boldsymbol{\varepsilon}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{\varepsilon}_{t+\Delta t}^{p}) + \Psi_{t+\Delta t}^{p}(\xi_{t+\Delta t}) - \Psi_{t}^{e}(\boldsymbol{\varepsilon}_{t} - \boldsymbol{\varepsilon}_{t}^{p}) + \Psi_{t}^{p}(\xi_{t}) \right)$$
(38)

La condición de optimización (36) aplicada a (38) conduce a la expresión:⁶

$$J_{2,t+\Delta t}^{2} = \frac{2}{3} \frac{\partial \Psi^{p}}{\partial \xi_{t+\Delta t}}$$

$$\tag{39}$$

siendo J_2 el segundo invariante de la parte desviadora del tensor de tensiones.

En este caso el problema de contorno se plantea mediante un operador diferencial incremental:

$$\mathbf{A}_{t+\Delta t} = \mathbf{0} \tag{40}$$

siendo la forma de Dirichlet correspondiente:

$$a(\boldsymbol{u}_{t+\Delta t})[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}] = \int_{\Omega} \frac{\partial^2 W_{t+\Delta t}(\boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{s}}\boldsymbol{u}, \cdot)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{t+\Delta t} \partial \boldsymbol{\varepsilon}_{t+\Delta t}} \cdot \boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\eta} d\Omega$$
(41)

Si la forma de Dirichlet (41) verifica (5, 6) entonces es regular y es aplicable la metodología de estimación de error descrita en los apartados anteriores.

El estimador de error local es en este caso:

$$(E^e_{\Delta t})^2 = \|\boldsymbol{u}^e_{\mathrm{enh}_{t+\Delta t}} - \boldsymbol{u}^e_{h_{t+\Delta t}}\|_E$$
(42)

La cota de error propuesta en (42) es una cota incremental. Para conocer el error de discretización a lo largo del proceso de carga es necesario hacer la integral en el tiempo de $E^e_{\Delta t}$:

$$E^{e}_{t+\Delta t} = \int_{0}^{t+\Delta t} E^{e}_{\Delta t} dt \tag{43}$$

Utilizando el potencial incremental $W_{t+\Delta t}$, el estimador de error (42) se interpreta como la contribución de los modos incompatibles de los elementos mejorados a la función de energía libre:

$$(E^{e}_{\Delta t})^{2} = \int_{\Omega_{e}} W_{t+\Delta t} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t+\Delta t}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\xi}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{\xi}_{t+\Delta t}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t} - \boldsymbol{\varepsilon}^{e}_{t}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\xi}_{t} - \boldsymbol{\xi}_{t}(\boldsymbol{u}) \right) d\Omega$$
(44)

Las densidad de energía de la expresión (44) se puede descomponer aditivamente en las contribuciones de la parte elástica y la parte plástica de la energía libre, resultando:

$$(E_{\Delta t}^{e})^{2} = \int_{\Omega_{e}} W_{t+\Delta t}^{e} \left(\boldsymbol{\varepsilon}_{t+\Delta t}^{e} - \boldsymbol{\varepsilon}_{t+\Delta t}^{e}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\varepsilon}_{t}^{e} - \boldsymbol{\varepsilon}_{t}^{e}(\boldsymbol{u}) \right) d\Omega + \int_{\Omega_{e}} W_{t+\Delta t}^{p} \left(\xi_{t+\Delta t} - \xi_{t+\Delta t}(\boldsymbol{u}), \xi_{t} - \xi_{t}(\boldsymbol{u}) \right) d\Omega$$

$$(45)$$

El error de discretización global se obtiene extendiendo la integral en (44) a todo el dominio Ω . De esta manera es inmediato obtener el error global mediante la suma de los errores locales:

$$E_{\Delta t}^2 = \sum_{i=1}^{n_{el}} (E_{\Delta t}^i)^2 \tag{46}$$

EJEMPLOS

Elasticidad Finita. Junta de goma

Este ejemplo analiza el problema de la junta de goma, propuesto para la estimación de error en problemas de elasticidad con deformaciones finitas por Brink,⁴ y que resuelven con un material hiperelástico de Ogden. La geometría de la junta se muestra en la figura 1, donde uindica los desplazamientos impuestos. El valor de dicho desplazamientos es u = 1.6 que equivale al 80% del espesor de la goma. A efectos de la discretización sólo se ha modelizado la mitad de la junta debido a la simetría existente. En este caso, el modelo constitutivo utilizado es el de un material neo-hookeano cuya función de densidad de energía interna es:

$$W(\boldsymbol{C}) = \frac{1}{2}\lambda(\log J)^2 - \mu\log(J) + \frac{1}{2}\mu(\operatorname{traza}(\boldsymbol{C}) - 3)$$
(47)

Los valores adoptados para los coeficientes de Lamé son $\lambda = 3.3289$ y $\mu = 6671.1$ que recogen adecuadamente la incompresibilidad de la goma (proporcionan un valor del coeficiente de Poisson $\nu = 0.499$).



Figura 1: Junta de goma. Geometría y desplazamientos impuestos

Se han empleado seis mallas de 20, 80, 320, 1280, 2880

y 5120 elementos. Únicamente con objeto de tener un valor de referencia de la energía interna, se ha empleado una malla de 6845 elementos (13836 GDL). El valor obtenido es: $\|\varphi_{ref}\|_E = 6660.37$

La figura (2) muestra la evolución del estimador de error frente al número de grados de libertad del problema, y el error teórico calculado con la expresión:

$$E_{\text{teor}} = \sqrt{\|\boldsymbol{\varphi}_{\text{ref}}\|_E - \|\boldsymbol{\varphi}_h\|_E} \tag{48}$$

Por último, la figura (3) muestra los isocontornos de error local, en las mallas de 20, 80, 320 y 1280 elementos. A efectos de representación, se ha reflejado la malla empleada en los cálculos mostrándose la junta de goma completa. Este ejemplo presenta diversas dificutades para ser resuelto con elementos formulados en desplazamientos: en ciertas zonas de la malla existe una flexión muy marcada, y el material es incompresible. Por esta razón es necesario tener mallas muy finas para que la energía de deformación $\|\varphi_h\|_E$ tome un valor próximo al de referencia $\|\varphi_{ref}\|_E$. Dado que con los elementos con deformaciones supuestas se obtienen resultados aceptables con mallas gruesas, la energía asociada a los modos incompatibles es elevada, y por tanto los valores del estimador de error también son altos (ver figura 2)

De acuerdo con dicha figura, el error teórico y el error estimado muestran tendencias muy similares. Asimismo, el estimador de error decrece con el número de grados de libertad del modelo. En este ejemplo, la tasa de convergencia obtenida es ligeramente inferior a un medio.

Plasticidad. Compresión no uniforme en deformación plana

En este ejemplo se considera la compresión de una laja elastoplástica cuadrada, considerando que el rozamiento entre la prensa y la laja es infinito. El lado de la laja es a = 2, modelizandose únicamente un cuarto de la misma, por condiciones de simetría. El problema se resuelve con control de desplazamientos siendo u = 0.0015, el desplazamiento impuesto máximo.



Figura 2: Junta de Goma. Estimador de error



Figura 3: Junta de goma. Contornos de error local. Mallas de 20, 80, 320 y 1280 elementos

El modelo constitutivo empleado corresponde a un material con plasticidad de Von Mises, siendo las características mecánicas: E = 1000.0, $\nu = 0.3$, Y = 1.0, H = 0.0 Este mismo ejemplo ha sido utilizado por otros autores⁷ para la estimación de error en problemas elastoplásticos. Se han considerado mallas uniformes de 3×3 , 5×5 , 10×10 , 20×20 , 40×40 y 60×60 elementos, que corresponden a 17, 49, 199, 799, 3199 y 7199 grados de libertad, respectivamente.

La figura 4 recoge la evolución al final del análisis de la energía libre calculada con los elementos mejorados y el error estimado, frente al número de grados de libertad empleado en el cálculo. Cabe destacar de este gráfico la baja tasa de convergencia obtenida con el estimador de error, que es aproximadamente igual a 1/8. Este hecho se explica por los valores que se obtienen de la energía



Figura 4: Compresión no uniforme. Error global estimado y energía de deformación.

interna, que apenas varían con el refinamiento de la malla, debido al incremento de la localización de deformaciones plásticas con el refinamiento.

La figura 6 recoge los contornos de error local obtenidos al final del cálculo, para las cuatro mallas más gruesas, integrando en el tiempo la expresión (45). El error local tienden a concentrase según una diagonal, al igual que las

deformaciones plásticas efectivas, decreciendo su valor según se refina la malla.

De acuerdo con los dos sumandos de la expresión (45), en la figura 5 se recoge la evolución de ambas componentes del error del elemento de la esquina superior derecha, para cada una de las seis mallas consideradas. Interpretando esta figura, se concluye:

- 1. La componente elástica y la componente plástica del error local alcanzan valores menores al refinar la malla. No obstante, la componente plástica del error se activa antes con las mallas más finas.
- 2. Las dos componentes del error crecen a lo largo del proceso de carga.
- 3. El orden de magnitud de las dos componentes del error son similares.



Figura 5: Compresión no uniforme. Componentes elástica y plástica del error local. Esquina superior derecha.



Figura 6: Compresión no uniforme. Error local.

CONCLUSIONES

En este artículo se ha descrito una metodología para la estimación de error, basada en la contribución energética de los modos incompatibles, aplicándolo a problemas elásticos con deformaciones infinitesimales, con deformaciones finitas, y de plasticidad infinitesimal.

El estimador de error propuesto, que está basado en los trabajos recientes de Radovitzky y Ortiz,⁹ establece una cota del error de discretización de la solución aproximada mediante elementos formulados en desplazamientos, a partir de la solución obtenida con elementos de deformaciones supuestas. Está formulado de manera totalmente local, con lo cual su coste computacional es bajo al no ser necesario establecer suavizados globales ni cálculos en subdominios.

Referencias

- Armero F. and Glaser S. On the formulation of enhanced strain finite elements in finite deformations. Engieneering computations. Vol 14. pp 759-791. 1997.
- [2] Babuška, I. and Rheinboldt, W.C. A posteriori error estimates for the finite element method. International Journal for Numerical Methods in Engineering. Vol 12. pp 1597-1613. 1978.
- [3] Barthold, F.J., Schmidt, M. and Stein, E. Error indicators and mesh refinements for finite-element-computations of elastoplastic deformations. Computational Mechanics. Vol. 22. No.3. pp 225-238. 1998.
- [4] Brink, U. and Stein, E. A posteriori error estimation in large-strain elasticity using equilibrated local Neumann problems. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol 161. pp 77-101. 1998.
- [5] Ciarlet, P.G. The finite element method for elliptic problems. North Holland. 1978.
- [6] Gabaldón, F. Métodos mixtos de elementos finitos en elastoplasticidad. Tesis Doctoral en curso.
- [7] Johnson, C. and Hansbo, P. Adaptive finite element methods in computational mechanics. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol 101. pp 143-181. 1992.
- [8] Ortiz, M. and Quigley, J.J. Adaptive mesh refinement in strain localization problems. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol 90. pp 781-804. 1991.
- [9] Radovitzky R. and Ortiz M. Error estimation and adaptive meshing in strongly nonlinear dynamic problems. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1998. In press.
- [10] Ortiz, M. and Stainier, L. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1998. In press.
- [11] Simo J.C. and Rifai S. A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. International Journal for Numerical Methods in Engineering. Vol 29. pp 1595-1638. 1990.
- [12] Simo J.C. and Armero F. Geometrically nonlinear enhanced strain mixed methods and the method of incompatible modes. International Journal for Numerical Methods in Engineering. Vol 110. pp 359-386. 1993
- [13] Zienkiewicz, O. and Taylor R.L. The finite element method. Vol 1. 4th Edition. Mc-Graw Hill. 1989.