Journal homepage: http://revistas.unitru.edu.pe/index.php/SSMM/index

SELECCIONES MATEMÁTICAS
Universidad Nacional de Trujillo
ISSN: 2411-1783 (Online)
Vol. 04(01): 102-111 (2017)

Estimativa del error aposterior para la ecuación de transporte del CO_2 en un alveolo pulmonar con el método del elemento finito

Estimation of error a posteriori For the transport equation of CO_2 in a pulmonary alveolus with the finite element method

OBIDIO RUBIO *, LUIS CAUCHA **, ALEXIS RODRIGUEZ*** AND ROBERT HARO ****

Received, May. 05, 2017 *Accepted, Jun. 15, 2017*

Resumen

En este artículo presentamos una estimativa del error a posterior de mallas construídas por elementos finitos en la parte espacial, y elemento finito discontinuo en el tiempo, para la ecuación de transporte del CO_2 en los sacos alveolares del pulmón humano, usando el método residual ponderado dual(DWR).

Palabras clave. FEMdG(r), error a posterior, transporte de CO2, formulación variacional

Abstract

In this paper we present an estimate of the posterior error of finite element-constructed finite element meshes and finite element discontinuous over time for the transport equation of CO_2 in the bags Alveolar cells of the human lung, using the dual weighted residual method (DWR).

Keywords. FEMdG (r), posterior error, CO2 transport, variational formulation

1. Introducción. En este artículo, principalmente de tipo difusión, presentamos una descripción del error a posterior de la malla generada por el método del elemento finito cuadráticos en el espacio y el método de Galerkin discontinuo en el tiempo, para la ecuación de transporte, y lo aplicamos en el modelo de transporte de Co2 en el alveolo pulmonar, presentado a continuación el problema a ser abordado en este artículo

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \partial_t C + u.\nabla C - D\Delta C &=& 0, \text{ en } \Omega(\tau) \\ \partial_\eta C - \alpha_b (C_b - C) &=& 0, \text{ sobre } \Gamma(bl) \\ \partial_\eta C &=& 0, \text{ sobre } \Gamma_w \\ \partial_\eta C - \gamma h^{-2}\chi(v\cdot\eta)(C_{\text{ext}} - C) &=& 0, \text{ sobre } \Gamma_{io}, \end{array} \right. \tag{1.1}$$

donde $\Omega(\tau)$ es el dominio en movimiento del problema, el cual cambia de acuerdo a la velocidad V^{dom}, u es la velocidad del flujo de fluído que consideramos congelado para efectos de nuestro análisis , C es la concentración del gas, el modelo presenta las condiciones iniciales y las condiciones de contorno son de tres clases, poniendo $\partial\Omega(t) = \Gamma_{io} \cup \Gamma_{bl}(t) \cup \Gamma_w(t)$, donde $\Gamma_w(t)$ es la sección no permeable de la frontera del alveolo, mientras que sobre Γ_{bl} y Γ_{io} existe condición de tercera especie, por causa de intercambios de gas con el flujo de sangre; Podemos referir a [10] y [15] para la derivación del modelo. Además $\chi(x)$ es la función de Heaviside.

*Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Trujillo, Av. Juan Pablo II. s/n. Perú. Corresponding author *orubio@unitru.edu.pe*.

** Universidad Nacional de Tumbes, Perú. Corresponding author *ljcaucham@untumbes.edu.pe*.

*** Universidad Nacional de Trujillo, Perú. Corresponding author *alexlar20@yahoo.es* .

**** Universidad Nacional de Trujillo. Corresponding author *robertteliashh$_2$3@yahoo.es* .

 DOI: http://dx.doi.org/10.17268/sel.mat.2017.01.10

1.1. Discretización. En primer lugar describimos el procedimiento estándar de la discretización por elementos finitos(isoparamétricos), para ello consideramos la formulación variacional abstracta de un problema general

$$a(u,v) = (f,v), \qquad v \in V \tag{1.2}$$

Donde V es un espacio de Hilbert construído de acuerdo al dominio y la condiciones de contorno del problema.

La discretización del dominio del problema, se realiza descomponiendo el dominio $\bar{\Omega}$ en subdominios no traslapados y coherentemente compatibles en sus fronteras, $T_h = \{K\}$, el cual para nuestro caso, consiste de cuadriláteros no degenerados que le llamamos (células) K, tal que el ancho es $h_K := diam(K)$, $h := \max_{K \in T_h} h_K$ el tamaño de la malla global, la notación $h = h(x)$ es usado para la función de tamaño de malla distribuido continuamente por $h|_K = h_K$.

Para la discretización de la incognita se considera el espacio finito dimensional,

$$V_k = \{v \in V \,/\, v|_K \in P(K),\, K \in T_h\}$$

donde $P(K)$ denota un espacio apropiado de funciones polinomiales, definidas en la célula $K \in T_h$, principalmente se considera elementos finitos de orden bajo, o sea las funciones forma son obtenidas por la transformación bilineal del espacio de funciones bilineales $Q_1(\hat{K}) = span\{1, x_1, x_2.x_1x_2\}$ sobre la célula de referencia $\hat{K} = [0,1]^2$(bilineales isoparamétricas)

Finalmente, la discretiación de la ecuación se utiliza la forma variacional presentada en 1.2 , escrita sobre el espacio V_h , quedando formulada el siguiente problema discreto

Hallando $u_h \in V_h$ tal que

$$a(u_h, \phi_h) = (f, \phi_h), \qquad \forall \phi_h \in V_h \tag{1.3}$$

2. El Método Residual Ponderado Dual . En esta sección presentamos el método residual ponderado dual(DWR), que es bastante general para abordar una variedad de problemas, por lo que su formulación abstracta se logra usando la aproximación de Galerkin de ecuaciones variacionales sobre un espacio de Hilbert, la presentación se hará siguiendo a Becker y Rannacher [9]

2.1. Aproximación de puntos estacionarios. Sea X un espacio de Hilbert y $L(.)$ un funcional diferenciable sobre X y sea $x \in X$ un punto estacionario, suponga además que la primera, segunda y tercera derivada de L en x se denota por $L'(x)(.)$, $L''(x)(.,.)$ y $L'''(x)(.,.,.)$ respectivamente.

El punto estacionario satisface,

$$L'(x)(y) = 0 \qquad \forall y \in X. \tag{2.1}$$

Para un subespacio(finito dimensional) $X_h \subset X$ la aproximación de Galerkin correspondiente $x_h \in X_h$ es definido por

$$L'(x_h)(y_h) = 0 \qquad \forall y_h \in X_h. \tag{2.2}$$

Proposición 1. *Suponga que el funcional $L(.)$ posee derivada direccional hasta de tercer orden. Entonces, para cualquier soluciones $x \in X$ de (2.1) y $x_h \in X_h$ de (2.2), se tiene la representación de error*

$$L(x) - L(x_h) = \frac{1}{2} L'(x_h)(x - i_h x) + \mathcal{R}_h, \tag{2.3}$$

con arbitrario $i_h x \in X_h$. El resto $\mathcal{R}_h$ es cúbico en $e := x - x_h$,

$$\mathcal{R}_h := \frac{1}{2} \int_0^1 L'''(x_h + se)(e,e,e)s(s-1)ds$$

Demostración: Por cálculo elemental, tenemos

$$L(x) - L(x_h) = \int_0^1 L'(x_h + se)(e)ds,$$

aproximando la integral por la regla trapezoidal,

$$L(x) - L(x_h) = \frac{1}{2}\{L'(xh)(e) + L'(x)(e)\} + \int_0^1 L'''(x_h + i)s(s-1)ds.$$

Entonces, observando que $L'(x)(e) = 0$ y empleando la ortogonalidad de Galerkin,

$$L'(x_h)(e) = L'(x_h)(x - i_h x) + L'(x_h)(i_h x - x_h), \quad i_h x \in X_h$$

obtenemos el error de la representación (2.3).
□

2.2. Aproximación de las ecuaciones variacionales . Primero, usemos el resultado de la proposición1 para derivar estimativas del error aposterior para la aproximación de Galerkin de una ecuación variacional no lineal general. Con una forma semi lineal diferenciable $A(.)(.)$ y una funcional lineal $F(.)$ definida en un espacio de Hilbert V.

Buscamos una solución $u \in V$ de la ecuación variacional

$$A(u)(\psi) = F(\psi), \qquad \forall \psi \in V, \tag{2.4}$$

y para un subespacio (finito dimensional) $V_h \subset V$ su aproximación de Galerkin es , Hallar $u_h \in V_h$ tal que

$$A(u_h)(\psi_h) = F(\psi_h), \quad \forall \psi_h \in V_h. \tag{2.5}$$

Vamos a suponer que las ecuaciones (2.4, 2.5) tienen soluciones, no necesariamente únicas.

Supongamos que, para una funcional dada $J(.)$, estamos interesados en el valor $J(u)$ y por tanto en el error $J(u) - J(u_h)$.

Para incorporar este problema en el marco general de la sección anterior, lo reescribimos como un problema de optimización (trivial) restringida,

$$min J(u), \qquad A(u)(\psi) = F(\psi), \qquad \forall \psi \in V, \tag{2.6}$$

Para resolver este problema, usamos el enfoque Euler-Lagrange, introduciendo la funcional Lagrangiana

$$\mathcal{L}(u, z) := J(u) + F(z) - A(u)(z),$$

con la variable dual $z \in V$.

Entonces cualquier punto estacionario $\{u, z\} \in V \times V$ of $\mathcal{L}(., .)$ es caracterizado por el conjunto de ecuaciones

$$A'(u)(\phi, z) = J'(u)(\phi), \qquad \phi \in V, \tag{2.7}$$

$$A(u)(\phi) = F(\phi) \qquad \phi \in V, \tag{2.8}$$

genera una solución de (2.4).

La segunda de estas ecuaciones (2.8) es justo la ecuación variacional dada (2.4) a ser resuelta, en tanto que la primera (2.7) es el problema dual asociado a la funcional $J(.)$.

Ahora, las aproximación de Galerkin correspondiente $\{u_h, z_h\} \in V_h \times V_h$ es determinada por el conjunto de ecuaciones.

$$A'(u_h)(\phi_h, z_h) = J'(u_h)(\phi_h), \qquad \phi_h \in V_h, \tag{2.9}$$

$$A(u_h)(\phi_h) = F(\phi_h) \qquad \phi_h \in V_h, \tag{2.10}$$

Para estas ecuaciones, asociamos las funcionales residuales 'primal' y 'dual'

$$\rho(.) := F(.) - a(u_h)(.), \qquad \rho^*(.) := J'(u_h)(.) - a'(u_h)(., z_h),$$

definido sobre V. Entonces, de la proposición 1 podemos inferir los siguientes resultados.

Proposición 2. *Sea la forma $A(.)(.)$ y la funcional $J(.)$ posee derivada direccional hasta de tercer orden. Entonces, para cualquier soluciones $\{u, z\} \in V \times V$ de (2.7,2.8) y $\{u_h, z_h\} \in V_h \times V_h$ de (2.9,2.10), vale la representación del error a posterior*

$$J(u) - J(u_h) = \frac{1}{2}\rho(u_h)(z - i_h z) + \frac{1}{2}\rho^*(z_h)(u - i_h u) + \mathcal{R}_h, \tag{2.11}$$

para aproximaciones arbitrarias $i_h u, i_h z \in V_h$, con el resto $\mathcal{R}_h$ cúbico en $u - u_h$ y $z - z_h$,

$$\mathcal{R}_h = \frac{1}{2}\int_0^1 \{J'''(u_h + se)(e,e,e) - A'''(u_h + se)(e,e,e,z_h + se^*) \\ -3A'''(u_h + se)(e,e,e^*)\}s(s-1)ds.$$

Demostración:

Para incorporar la situación actual en el escenario general de la proposición 1, introducimos el espacio producto $X := V \times V$ y $X_h := V_h \times V_h$ y para $x = (u,z)$, $x_h = (u_h, z_h)$ pongamos

$$L(x) = \mathcal{L}(u,z)$$

Note que para $x = (u,z)$, $\phi = (\phi^u, \phi^z) \in V \times V$,

$$\begin{aligned} L'(x)(\phi^u, \phi^z) &= \mathcal{L}'(u,z)(\phi^u) + \mathcal{L}'(u,z)(\phi^z) \\ &= J'(u)(\phi^u) - A'(u)(\phi^u, z) + F(\phi^z) - a(u_h)(\phi^z). \end{aligned}$$

Entonces, aplicando la proposición 1, obtenemos la representación del error

$$\begin{aligned} L(x) - L(x_h) &= \frac{1}{2}L'(x_h)(x - i_h x) + \mathcal{R}_h \\ &= \frac{1}{2}\rho^*(u - i_h u) + \frac{1}{2}\rho(z - i_h z) + \mathcal{R}_h \end{aligned}$$

con el resto cúbico

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_h &= \frac{1}{2}\int_0^1 L'''(x_h + se)(e,e,e)s(s-1)ds \\ &= \frac{1}{2}\int_0^1 \{J'''(u_h + se)(e,e,e) - A'''(u_h + se)(e,e,e,z_h + se^*) \\ &\quad -3A'''(u_h + se)(e,e,e^*)\}s(s-1)ds. \end{aligned}$$

Finalmente, observando que en la solución (u,z) y (u_h, z_h),

$$\begin{aligned} L(x) - L(x_h) &= J(u) + F(z) - A(u)(z) - J(u_h) + F(z_h) - A(u_h)(z_h) \\ &= J(u) - J(u_h) \end{aligned}$$

así obtenemos la representación del error deseado (2.11).

□

OBSERVACIÓN 1.

- *El residuo $\mathcal{R}_h$ es usualmente despreciado.*
- *La representación del error a posterior (2.11)*

$$\eta(u_h) := \frac{1}{2}\rho(z - i_h z) + \frac{1}{2}\rho^*(u - i_h u)$$

requiere, definir aproximaciones a las soluciones exactas primal y dual.

- *Note que en el caso lineal (2.11) se transforma en*

$$J(e) = \rho(u_h)(z - \psi_h) = \rho^*(z_h)(u - \phi_h) = F(e^*).$$

3. Principio de Estimación del error a posterior para la ecuación de transporte de concentraciones. En esta sección nos dedicamos a conceptos de estimación del error y optimización de malla. EL objetivo es desarrollar técnicas para estimación confiable del error de discretización en cantidades de interés físico así como adaptación de mallas económicas. El uso de una discretización de Galerkin de elemento finito provee el ambiente apropiado para una análisis de error rigurosamente matemático. Sobre la base de algunas cotas de error a posterior computables la malla es localmente refinada dentro de un proceso de retroalimentación produce distribuciones económicas de tamaño de malla para tolerancia de error prescritas o máximo número de células.

El concepto general del control del error basado en residuos para métodos de elementos finitos es descrito en el artículo por Eriksson/Estep/Hansbo/Johnsonerikson1995 ; esta técnica ha sido muy desarrollada para varias situaciones, aplicaciones a flujos incompresible son discutida ampliamente en Becker [7, 8].

Una ecuación de Transporte como la siguiente

$$\partial_t C + u.\nabla C - D\Delta C = 0, \text{ en } \Omega(\tau)$$

consta de una parte difusiva, y de una parte convectiva, por lo que es necesario abordar gradualmente el anánlisis de las estimativas, por simplicidad, consideramos la velocidad u y el dominio $\Omega(\tau)$ con el tiempo,en todo el desarrollo de esta sección.

El error de discretización en una célula K se separa en dos componentes, el error producido localmente(error de truncación) y el error de transporte(error de polución)

$$e_K^{tot} = e_K^{loc} + e_K^{trans}. \tag{3.1}$$

El efecto del residual celular ρ_K sobre el error local $e_{K'}$, en la otra célula K', es gobernado por la función de Green del problema continuo, por tanto es suficiente calculár el error local e_K^{loc}.

Análisis del error aposterior El anáisis del error aposterior genera estimativas de error en el proceso de computación. En consecuencia, estas cotas están en términos de residuales locales calculables de la solución aproximada y no requiere información sobre la solución exacta. Sin embargo, un análisis del error aposterior usualmente no provee una información a priori acerca de la convergencia del proceso de discretización cuando $h \to 0$.

Trabajamos el problema de convección difusión en tres partes, primeramente vemos el problema de difusión estacionaria, luego el problema de convección pura y finalmente el problema transitorio.

3.1. Un problema de difusión.

Consideremos el problema de difusión

$$-\Delta u = f, \quad \text{en} \quad \Omega, \qquad u = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega, \tag{3.2}$$

puesto sobre un dominio poligonal $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. En esta formulación variacional se busca $u \in V := H_0^1(\Omega)$ satisfaciendo

$$(\nabla u, \nabla \phi) = (f, \phi) \qquad \phi \in V. \tag{3.3}$$

El método del elemento finito de Galerkin $V_h \subset V := H_0^1(\Omega)$ (e.g., elementos triangulares o cuadráticas) y determina aproximaciones $u_h \in V_h$ por

$$(\nabla u_h, \nabla \phi_h) = (f, \phi_h), \quad \forall \phi_h \in V_h. \tag{3.4}$$

Recordemos la ortogonalidad de Galerkin del error $e := u - u_h$,

$$(\nabla e, \nabla \phi_h) = 0, \qquad \forall \phi_h \in V_h. \tag{3.5}$$

Buscamos la forma de derivar estimativas de error aposterior. Sea $J(.)$ un "funcional de error" arbitrario definido sobre V y $z \in V$ la solución del correspondiente problema dual

$$(\nabla \phi, \nabla z) = J(\phi), \qquad \forall \phi \in V. \tag{3.6}$$

Colocando $\phi = e$ en (3.6) resulta en la representación del error.

$$\begin{aligned} J(e) = \eta(u_h) &:= (\nabla e, \nabla z) = (\nabla e, \nabla(z - I_h z)) \\ &= \sum_{K \in T} \{(-\Delta u + \Delta u_h, z - I_h z)_K - (\partial_n u_h, z - I_h z)_{\partial K})\} \\ &= \sum_{K \in T_h} \{\langle R(u_h), z - I_h z\rangle_K + \langle r(u_h), z - I_h z\rangle_{\partial K}\} \end{aligned} \tag{3.7}$$

con los residuales $R(u_h)$ y $r(u_h)$ definida por

$$\begin{aligned} R(u_h)|_K &:= f + \Delta u_h, \\ r(u_h)|_\Gamma &:= \begin{cases} -\frac{1}{2} n.[\nabla u_h], & \text{si} \quad \Gamma \subset \partial K \backslash \partial\Omega \\ 0, \quad \text{si} \quad \Gamma \subset \partial\Omega \end{cases} \end{aligned}$$

donde $[\nabla u_h]$ denota el salto a través las aristas de los elementos.

Denotando los indicadores de error por célula

$$\eta_K(u_h) = \langle R(u_h), z - I_h z\rangle_K + \langle r(u_h), z - I_h z\rangle_{\partial K}$$

Observemos que estos indicadores son consistentes en el sentido que para la solución exacta $\eta_K(u) = 0$.

De la representación del error(3.7), podemos inferir una estimativa de error a posterior de la forma

$$|J(e)| \leq |\eta(u_h)| \leq \sum_{K \in T_h} |\eta_K(u_h)|, \tag{3.8}$$

Lo cual conduce a verificar el siguiente Teorema

TEOREMA 1. *Para la aproximación por elemento finito del problema de difusión (3.2), se cumple la estimativa del error a posterior con respecto a la estimativa $J(.)$:*

$$|J(e_h)| \leq \sum_{K \in T_h} \rho_K(u_h) w_K(z), \tag{3.9}$$

donde los residuales celulares $\rho_K(u_h)$ y los pesos celulares $w_K(z)$ son dados por

$$\begin{aligned} \rho_K(u_h) &:= \left(\|R(u_h)\|_K^2 + h_K^{-1}\|r(u_h)\|_{\partial K}^2\right)^{1/2} \\ w_K(z) &:= \left(\|z - i_h z\|_K^2 + h_K\|z - I_h z\|_{\partial K}^2\right)^{1/2}. \end{aligned}$$

3.2. El problema modelo convectivo . Como un modelo simple, consideremos la ecuación de transporte escalar

$$\beta.\nabla u = f, \tag{3.10}$$

sobre un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ con condición de contorno de entrada de flujo $u = g$ a lo largo de la frontera de entrada $\Gamma_1 = \{x \in \partial\Omega, n.\beta < 0\}$. Por tanto $\Gamma_2 = \partial\Omega \backslash \Gamma_1$ es la frontera de salida de flujo. El vector transporte β por simplicidad se asume constante; de esto el espacio solución natural es

$$V := \left\{v \in L^2(\Omega), \beta.\nabla v \in L^2(\Omega)\right\}.$$

Este problema es discretizado usando el método de elemento finito de Galerkin con la estabilización de la difusión optimizada como la descrita anteriormente. Sobre mallas cuadriláteras T_h, definimos de nuevo subespacios $V_h := \left\{v \in H^1(\Omega), v|_K \in \tilde{Q}_1(K), K \in T_h\right\}$. donde $\tilde{Q}_1$ es el espacio de funciones bilineales isoparamétricas sobre las célula K. La solución discreta $u_h \in V_h$ se define por

$$(\beta.\nabla u_h - f, \phi + \delta\beta.\nabla\phi) + (n.\beta(g - u_h), \phi)_{\Gamma_1} = 0 \qquad \forall\phi \in V_h \tag{3.11}$$

donde el parámetro de estabilización es determinado localmente por $\delta_K = h_K$. En esta formulación la condición de contorno de flujo de entrada se impone en el sentido débil. Esto facilita el uso de un argumento de dualidad en la generación de estimativas de error a posterior.

Sea $J(.)$ una funcional dada con respecto a la cual el error $e = u - u_h$ va ha ser controlada. Siguiendo nuestro tratamiento general, consideremos el problema dual correspondiente.

$$(\beta.\nabla\phi, z + \delta\beta.\nabla\nabla z) - (n.\beta\phi, z)_{\Gamma_1} = J(\phi) \qquad \forall\phi \in V, \tag{3.12}$$

el cual es un problema de transporte en la dirección β-negativa. Notar que la forma bilineal estabilizada $A_h(.,.)$ es usada en el argumento de dualidad a fin de alcanzar el tratamiento óptimo de los términos de estabilización; ver mas detalles en Houston y colaboradores [13]

La representación del error sigue como:

$$J(e) = (\beta.\nabla e, z - z_h i + \delta\beta.\nabla(z - z_h)) - (n.\beta e, (z - z_h))_{\Gamma_1}$$

para $z_h \in V_h$ arbitrario. Esto resulta en la estimativa del error a posterior

$$J(e) \leq \eta(u_h) := \sum_{K \in T} \rho_K(u_h)\omega_K(z), \tag{3.13}$$

con las residuales celulares

$$\rho_K(u_h) := \left(\|f - \beta.\nabla u_h\|_K^2 + h_K^{-1}\|n.\beta(u_h - g)\|_{\partial K \cap \Gamma_1}^2\right)^{1/2},$$

y pesos celulares (colocando $\zeta := z - z_h$)

$$\omega_K(z) := \left(\|\zeta\|_K^2 + \delta_K^2\|\beta.\nabla\zeta\|_K^2 + h_K^{-1}\|\zeta\|_{\partial K \cap \Gamma_1},\right)^{1/2}$$

3.3. Problema de transporte del Co2 en el alveolo pulmonar. Consideramos el problema 1.1, definida en el dominio $Q_T = \Omega \times I$, donde $I = [0, T]$.

Se puede discretizar el problema 1.1 usando el método de Galerkin en el espacio-tiempo. Para ello dividimos el intervalo I en subintervalos de la forma $I_n = (t_{n-1}, t_n]$ de acuerdo a la división

$$0 = t_0 < t_1 < \ldots < t_{n-1} < t_n \ldots < t_N = T, \qquad k_n = t_n - t_{n-1}$$

En cada nivel de tiempo t_n sea T_h^n la malla elemento finito regular, similar a las definidas anteriormente, con $h_K = diam(K)$, y sea $V_h^n \in H$ el sub espacio elemento finito correspondiente. Extendiendo la malla espacial a la franja espacio tiempo correspondiente $\Omega \times I_n$, se obtiene una malla espacio tiempo global consistiendo de cubos $Q_K^n := K \times I_n$

Sobre esta malla, se define el espacio elemento finito global

$$V_h^k = \left\{v \in W, \quad v(.t)|_{Q_K^n} \in \tilde{Q}_1(K), \quad v(x,.)|_{Q_K^n} \in P_r(I_n), \quad \forall Q_K^n\right\},$$

donde $W = L^2((0,T); H)$, con $H = \overline{L^2(\Omega) \cap C^\infty(\Omega(t))}^{\|.\|_{H^1}}$, y $r \geq 0$.

Para funciones en este espacio se usa la siguiente notación

$$v^{n+} = \lim_{t \longrightarrow t_n + 0} v(t), \quad v^{n-} = \lim_{t \longrightarrow t_n - 0} v(t), \qquad [v]^n = v^{n+} - v^{n-}.$$

La formulación variacional de (1.1) es la siguiente:

$$\left\{\begin{array}{ll} \text{Hallar} & C \in W, \; / \\ \int_I \{(\partial_t C + & u \cdot \nabla C, \psi) + (D\nabla C, \nabla\psi) - (\alpha(C_b - C), \psi)_{\Gamma_{bl}} - \\ & (\gamma h^{-2}\chi(u \cdot \eta)(C_{\text{ext}} - C), \psi)_{\Gamma_{io}}\} dt = 0, \; \forall\psi \in W. \end{array}\right. \tag{3.14}$$

complementada con la condición inicial $C(0) = C_0$

Hacemos las siguientes notaciones para las formas bilineal y lineal

$$a(C, w) = \int_I \{(\partial_t C + D\nabla C, \nabla\psi) + (u.\nabla C, \psi) + \alpha(C, \psi)_{\Gamma_{bl}} + \theta\chi(C, \psi)_{\Gamma_{io}}\} \, dt$$

$$l(w) = \int_I \{\alpha(C_b, \psi)_{\Gamma_{bl}} + \theta\chi(C_{ext}, z)_{\Gamma_{io}}\} \, dt$$

entonces el problema variacional (3.14) se expresa como,

Hallar $C \in W$ tal que

$$a(C, w) = l(w), \qquad \forall w \in W. \tag{3.15}$$

donde $\theta = \gamma h^{-2}$, χ la función de Heaviside. En [10] se demuestra que (3.15) tiene solución y es única.

La formulación variacional (3.15) permite hacer una discretización usando funciones secuencialmente discontinuas en el tiempo. Este método, llamado método dG(r)(método de Galerkin discontinuo en el tiempo), determina el siguiente problema aproximado

Hallar $C_h \in V_h^k$ tal que

$$a_\delta(C_h, w_h) = l_\delta(w_h), \qquad \forall w_h \in V_h^k. \tag{3.16}$$

En esta discretización, siguiendo a Houston y colaboradores [13], se introdujo el parámetro de estabilización δ, la cual es una función positiva en $L^\infty(\Omega)$, que agrega una difusión en la dirección convectiva, es decir:

El operador a_δ tiene la forma, para $c, w \in V_h^k$

$$\begin{aligned} a_\delta(c,w) = & \int_I \{(c_t, w) + D(\nabla c, \nabla w) + (u.\nabla c, w + \delta u.\nabla w) - (n.uc, w)_{\Gamma_w} \\ & + \alpha(c,w)_{\Gamma_{bl}} + \theta\chi(c,w)_{\Gamma_{io}}\} dt \\ = & \sum_{n=1}^{N} \int_{I_n} \{(c_t, w) + D(\nabla c, \nabla w) + (u.\nabla c, w + \delta u.\nabla w) \\ & - ((\eta.u)c, w))_{\Gamma_w} + \alpha(c,w)_{\Gamma_{bl}} + \theta\chi(c,w)_{\Gamma_{io}}\} dt \\ & + \sum_{n=1}^{N} \left([c]^{n-1}, w^{(n-1)+}\right) \end{aligned}$$

donde el último sumando aparece al desacoplar el sistema global y porque las funciones prueba $w \in V_h^k$ pueden ser discontinuas en los tiempos t_n.

Además el operador l_h es

$$l_\delta(w) = \int_I \{(\eta.ug, w)_{\gamma_w} + \alpha(C_b, w)_{\Gamma_{bl}} + \theta\chi(C_{ext}, w)_{\Gamma_{io}}\} \, dt$$

3.3.1. Estimativa del error a posterior. Para poder trabajar, en esta etapa debemos explicitar el orden del método de Galerkin discontinuo en el tiempo, para ello consideremos para r el orden mas bajo, es decir el llamado método $dG(0)$, el cual es muy relacionado al esquema de Euler retrasado.

Siguiendo los pasos del método DWR, consideremos el siguiente problema dual

$$J(\phi) = a_\delta(\phi, z), \quad \forall \phi \in H., \tag{3.17}$$

Consideremos que la solución continua C también satisface la ecuación (3.16), lo cual implica la ortogonalidad de Galerkin para el error $e = C - c_h$, en esta situación, considerando la aproximación apropiada $I_h^k z \in V_h^k$, la representación del error toma la forma:

$$\begin{aligned} J(e) &= a_\delta(e, z_h) = a(e, z - I_h^k z) \\ &= \sum_{n=1}^{N} \int_{I_n} \{\left(e_t, z - I_h^k z\right) + D(\nabla e, \nabla z - I_h^k z) + (u.\nabla e, z - I_h^k z + \delta u.\nabla z - I_h^k z) \\ &\quad - \left((\eta.u)e, z - I_h^k z)\right)_{\Gamma_w} + \alpha(e, z - I_h^k z)_{\Gamma_{bl}} + \theta\chi(e, z - I_h^k z)_{\Gamma_{io}}\} dt \\ &\quad + \sum_{n=1}^{N} \left([e]^{n-1}, (z - I_h^k z)^{(n-1)+}\right) \end{aligned}$$

Esta expresión puede ser escrita como:

$$\begin{aligned} J(e) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{K \in T_h^n} & \Big\{ \left(R_h^k, z - I_h^k z\right)_{K \times I_n} + (r_h^k, z - I_h^k z)_{\partial K \times I_n} \\ & + \left(RC_h^k, \delta u.\nabla(z - I_h^k z)\right)_{K \times I_n} \\ & - ((\eta.u)c_h, z - I_h^k z)_{\partial K \cap \Gamma_w \times I_n} + \alpha(c_b - c_h, z - I_h^k z)_{\partial K \cup \Gamma_{bl} \times I_n} \\ & + \theta\chi(c_{ext} - c_h, z - I_h^k z)_{\partial K \cap \Gamma_{io} \times I_n} + \left([e]^{n-1}, (z - I_h^k z)^{(n-1)+}\right)_K \Big\} \end{aligned}$$

con los residuales locales R_h^k y r_h^k de la forma

$$R_h^k|_K := \partial_t c_h - D\Delta c_h + u.\nabla C - h,$$
$$r_h^k|_\Gamma := \begin{cases} -\frac{1}{2}n.[\nabla c_h], & \text{si} \quad \Gamma \subset \partial K \backslash \partial\Omega \\ 0, \quad \text{si} \quad \Gamma \subset \partial\Omega \end{cases}$$
$$RC_h^k|_K = u.\nabla C_h$$

donde $[\nabla u_h]$ denota el salto a través las aristas de los elementos.

De esta expresión se obtiene los siguientes resultados:

Teorema 2. *Para la aproximación de la ecuación de transporte de gas CO2 en el alveolo pulmonar por el métod del elemento finito discontinuo en el tiempo se tiene la estimativa de error a posterior*

$$|J(e)| \leq \sum_{n=1}^{N} \sum_{K \in T_h^n} \left\{ \rho_K^{h,n} w_K^{h,n} + \epsilon_K^{h,n} \omega_K^{h,n} + \gamma_K^{k,n} \zeta_K^{k,n} \right\} \tag{3.18}$$

donde los residuales y pesos celulares se pueden agrupar de la siguiente manera:

- *Términos espaciales*

$$\rho_K^{h,n} = \left(\|R_h^k\|^2_{K \times I_n} + h_K^{-1} \|r_h^k\|^2_{\partial K \cap I_n} \right)^{1/2}$$
$$w_K^{h,n} = \left(\|z - I_h^k z\|^2_{K \times I_n} + h_K \|z - I_h^k z\|_{\partial K \times I_n} \right)^{1/2}$$

-

$$\epsilon_K^{h,n} = \Big(\|RC_h^k\|^2_{K \times I_n} + h_K^{-1} (\|\eta.u(C_h)\|^2_{\partial K \cap \Gamma_w \times I_n} +$$
$$\alpha^2 \|c_b - c_h\|^2_{\partial K \cap \Gamma_b \times I_n} + \theta^2 \chi \|c_{ext} - c_h\|^2_{\partial K \cap \Gamma_{io} \times I_n} \Big)^{1/2}$$
$$\omega_K^{h,n} = \left(\delta_K^2 \|u.\nabla(z - I_h^k z)\|^2_{K \times I_n} + h_k \|z - I_h^k z\|^2_{\partial K \cap \partial\Omega \times I_n} \right)^{1/2}$$

- *Términos espaciales*

$$\gamma_K^{k,n} = \|[c_h]^{n-1}\|_K$$
$$\zeta_K^{k,n} = \|(z - I_h^k z)^{(n-1)+}\|_K$$

Observe que en la estimativa del error (3.18), el efecto de la discretización espacial se puede separar del efecto del error de la discretización temporal

El indicador $\eta_K^{h,n} = \rho_K^{h,n} w_K^{h,n} + \epsilon_K^{h,n} \omega_K^{h,n}$ se puede usar para controlar el tamaño de la malla espacial h_K, mientras que el indicador $\eta_K^{k,n} = \gamma_K^{k,n} \zeta_K^{k,n}$ controla el paso de tiempo k_n, es decir la malla espacial y temporal son adaptadas independientemente. Los pesos w, ω, ζ son evaluadas por postprocesamiento al calcular una aproximación del problema dual.

3.4. Evaluación de las estimativas de error . A partir del error a posterior (3.18) se puede deducir un criterio para la adaptación de la malla local y para finalizar el proceso de adaptación. Para este propósito debemos evaluar las estimativas del error local celular, podemos resolver numéricamente el problema dual perturbado correspondiente con el mismo método que se usa para calcular c_h, obteniendo una aproximación $z_h \in V_h^k$ a la solución exacta z. Si embargo, el uso de las mismas mallas para calcular la solución primal y duales no ser obligatorio. En realidad, en el caso de transporte dominante puede ser aconsejable calcular la solución dual, sobre una malla diferente; ver ejemplos en [13]. Entonces, los pesos ω_K pueden ser determinados por una aproximación usando interpolación de orden alto.

Es decir, se obtiene la solución dual discreta $z_h \in V_h$ por polinomios bicuadráticos sobre cada célula, generando una aproximación $I_h^{(2)} z_h$, esta construcción requiere algún cuidado especial, para los elementos con nodos ficticios, a fin de preservar el orden de precisión del proceso de interpolación Sustituyendo en la estimativa del error a posterior (3.18)

$$\|z - z_h\|_K, \qquad \text{por} \qquad \|I_h^{(2)} z_h - z_h\|_K. \tag{3.19}$$

Aproximaciones anánalogas pueden ser usadas para los pesos $\omega_{\partial K}$.

3.5. Estrategias de adaptación de malla. Usando la notación introducida anteriormente tenemos: C es solución del problema variacional puesto sobre un dominio bidimensional Ω, c_h es la aproximación por elemento finito (bilineal). Además, $e = C - c_h$ es el error de discretización y $J(.)$ el funcional dual de error e. Escribamos la estimativa de error a posterior (3.18) de la siguiente forma

$$|J(e)| \leq |\eta| \leq \sum_{n=1}^{N} \sum_{K \in T_h^n} |\eta_K|, \tag{3.20}$$

donde

$$\eta_K = \rho_K^{h,n} w_K^{h,n} + \epsilon_K^{h,n} \omega_K^{h,n} + \gamma_K^{k,n} \zeta_K^{k,n}$$

llamados indicadores de error local, el cual está en función de los residuales celulares y los pesos.

Según esto, definimos los indicadores de error locales

$$\eta_K := h_K^4 \rho_K(u_h) \omega_K(z)$$

Las estrategias para el diseño de mallas son controladas por una tolerancia dada TOL para la cantidad del error $J(e)$ y el número de células de la malla, M, el cual mide la complejidad del modelo computacional. Usualmente la complejidad admisible es restringida por algún valor máximo M_{max}.

Hay varias estrategias para organizar un proceso de adaptación de malla sobre la base de la estimativa del error a posterior (3.18). Por fines prácticos se presenta la llamada

3.5.1. Estrategia de la fracción fija. : Ordenamos las células de acuerdo al tamaño de η_K

$$\eta_{K_M} \geq \ldots \geq \eta_{K_i} \geq \ldots \geq \eta_{K_1}$$

y se refina un cierto porcentaje(digamos 20 %) de células con η_K mas grande (o aquellas que alcanzan hasta el 30 % del valor del estimador) y agrandando el 10 % de las células con con η_K mas pequeño. Por esta estrategia, podemos alcanzar una tasa prescrita de aumento N (o mantenerla constante como puede ser deseable en cálculos computacionales).

Referencias

[1] A. Chorin and J. Marsden, *Introduction to Fluid Mechanics*. Sprienger-Verlag, New York, 1979.

[2] R. Becker and R. Rannacher, *Weighted a-posteriori error estimates in FE methods*, Lecture ENUMATH-95, Paris, Sept. 18-22, 1995, in: Proc. ENUMATH-97, Heidelberg, Sept. 28 - Oct.3, 1997 (H.G. Bock, et al., eds), pp. 621-637, World Scientific Publ., Singapore, 1998.

[3] R. Becker and R. Rannacher, *A feed-back approach to error control in finite element methods: Basic analysis and examples*, East-West J. Numer. Math., 4:237-264 (1996).

[4] R. Becker and R. Rannacher, *An optimal control approach to error estimation and mesh adaptation in finite element methods*, Acta Numerica 2000 (A. Iserles, ed.), pp. 1-102, Cambridge University Press, 2001.

[5] R. Becker, V. Heuveline, and R. Rannacher, *An optimal control approach to adaptivity in computational fluid mechanics*, Int. J. Numer. Meth. Fluids. 40, 105-120 (2002).

[6] W. Bangerth and R. Rannacher, *Adaptive Finite Element Methods for Differential Equations*, Lectures in Mathematics, ETH Zurich, Birkhauser, Basel 2003.

[7] R. Becker, *An Adaptive Finite Element Method for the Incompress- ible Navier-Stokes Equations on Time-Dependent Domains*, Doctor Thesis, Preprint 95-44, SFB 359, Nov. 1995, University of Heidelberg.

[8] R. Becker, *Weighted error estimators for finite element approximations of the incompressible Navier-Stokes equations*, Preprint 98-20, SFB 359, Uni- versity of Heidelberg, submitted for publication, 1998.

[9] R. Becker, R. Rannacher, *An optimal control approach to a posteriori error estimation in finite element methods*, Acta Numerica, Cambridge University Press, pp. 1-102, (2001)

[10] L. Caucha, A. Rodriguez, O. Rubio, Existence and uniqueness of solutions to a model for dynamic of CO2 in the alveolar sac of human lung, sometido a Nonlinerar Analysis, 2016.

[11] M. Cotrina, L. Lara, O. Rubio, *Elemento Finito Adaptativo en la solución de la Ecuación de Poisson con coeficientes discontinuos* , Selecciones matemáticas, Vol. 1 No. 2 , 2015, pp 1- 19

[12] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo, and C. Johnson, *Introduction to adaptive methods for differential equations*, Acta Numerica 1995 (A. Iserles, ed.), pp. 105-158, Cambridge University Press.

[13] P. Houston, R. Rannacher and E.Suli, *A posteriori error analysis for stabilised finite element approximations of transport problems*, Comput. Methods Appl. Mech. Enrg. 190 (2000), 1483-1508.

[14] Rof Rannacher, *On the adaptive discretization of PDE-based optimization problems*, lecture given at the Summer School PDE Constrained Optimization in Tomar, Portugal, July 27-29, 2005.

[15] R. Reupo, Existencia y Unicidad de la solución del sistema de ecuaciones que modelan el flujo de aire y su interacción con el alveolo pulmonar, thesis doctoral , por someter a la Universidad Nacional de Trujillo, 2017, presentada Escuela de Postgrado, UNT.