

UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA



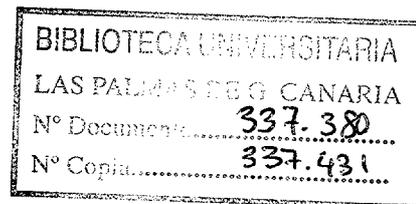
TESIS DOCTORAL

**APLICACIÓN DE ESQUEMAS ELEMENTO A
ELEMENTO DE RESOLUCIÓN DE SISTEMAS DE
ECUACIONES ASOCIADOS A MÉTODOS DE
ELEMENTOS FINITOS ADAPTATIVOS**

GUSTAVO MONTERO GARCÍA

Las Palmas de Gran Canaria, Marzo de 1989

UNIVERSIDAD POLITECNICA DE CANARIAS
ESCUELA TECNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES
Departamento de Matemática Aplicada



Tesis Doctoral

APLICACION DE ESQUEMAS ELEMENTO A ELEMENTO
DE RESOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES
ASOCIADOS A
METODOS DE ELEMENTOS FINITOS ADAPTATIVOS



AUTOR: Gustavo Montero García
DIRECTOR: Dr. Gabriel Winter Althaus

Las Palmas de Gran Canaria, Marzo de 1989

RESUMEN

Este trabajo trata sobre el estudio de distintos métodos de resolución de sistemas de ecuaciones de forma elemento a elemento, introduciendo técnicas de preconditionamiento.

Los problemas simétricos se abordan mediante el método del Gradiente Conjugado con preconditionadores EBE, y los no simétricos con el de Regularización Parabólica dotado de Aceleración por Relajación y con otras variantes del Gradiente Conjugado, siendo implementados elemento a elemento, sin formar la matriz global, al formar parte de un proceso adaptativo. Se combinan con los métodos del Punto Fijo y de Newton en sistemas no lineales y se utilizan como procedimientos de suavizado en el método de Multimalla.

Se resuelven varios problemas lineales y no lineales, asociados a matrices simétricas y no simétricas que surgen de la discretización por el método de los elementos finitos, y se comparan el número de iteraciones requerido para la convergencia, el tiempo para obtener la solución y aspectos computacionales de las técnicas de resolución analizadas.

ABSTRACT

This thesis deals with several methods for solving systems of equations element by element, using preconditioning techniques.

Symmetric problems are solved by the Conjugate Gradient method with EBE preconditioners, and non-symmetric one by Parabolic Regularization with Accelerated Relaxation and some new Conjugate Gradient methods, being implemented element by element, without entailing a global matrix, in an adaptive process. They are used for solving the linear systems sequence which arise from the linearization of nonlinear systems applying Fixed Point or Newton method, and like Smoothing iterations in Multigrid method.

Linear and Nonlinear problems, with symmetric and non-symmetric matrix which arise from the Finite Element discretization are solved, and the number of iterations for convergence, solution time and computational aspects are discussed for studied iterative procedures.

AGRADECIMIENTOS

Sería injusto que todo el mérito de este trabajo se atribuyera a mi persona, puesto que muchos son los que de alguna manera han colaborado en él. A todos se lo agradezco.

A mis padres por su apoyo incondicional en todos los aspectos. Sin su ayuda no habría conseguido llegar hasta aquí.

A Loli por animarme constantemente, por su inmensurable comprensión, por su trabajo de delineación que ha mejorado la presentación de esta tesis, y por todo lo demás.

A Gabriel Winter, a quien como director de tesis le debo su apoyo e impulso en todo momento y sus ideas sobre el tema.

A Luis Ferragut, quien sugirió el tema de tesis y codirigió con sus trabajos y conocimientos científicos la presente tesis.

A Rafael Montenegro, compañero infatigable, por su método, su rigurosidad y sus ideas. Desde el comienzo hasta el final, trabajar juntos en el tema ha sido decisivo, su apoyo moral, insustituible.

A Francisco Michavilla, por su labor activa en la formación del grupo investigador soporte de esta tesis.

A Santiago de Vicente, por su colaboración y por las sugerencias durante el desarrollo de este trabajo.

A Enrique Rubio y Antonio Ocón, por su incalculable ayuda informática tan generosamente prestada.

A todos los compañeros del Departamento de Matemática Aplicada por haber creado el clima adecuado durante la consecución de este trabajo.

A la Universidad Politécnica de Canarias, por todos los medios puestos a mi disposición.

Al Ilustre Colegio de Ingenieros Industriales de Canarias por la ayuda concedida para la realización de esta tesis.

Gracias a todos, elemento a elemento.

I N D I C E

	<i>Pág.</i>
1.- INTRODUCCION.....	4
1.1.- Métodos Adaptativos.....	4
1.2.- Métodos Elemento a Elemento.....	6
1.3.- Objetivos.....	7
2.- VENTAJAS DE LOS METODOS ELEMENTO A ELEMENTO.....	8
2.1.- Problemas unidimensionales.....	8
2.2.- Problemas bidimensionales.....	14
3.- DESCRIPCION DE LOS METODOS ELEMENTO A ELEMENTO.....	16
3.1.- Resolución de Sistemas Simétricos.....	16
3.2.- Resolución de Sistemas No Simétricos.....	18
4.- METODOS ELEMENTO A ELEMENTO Y MULTIMALLA.....	20
4.1.- Introducción.....	20
4.2.- Conclusiones.....	24
5.- DESARROLLO DE LOS METODOS ELEMENTO A ELEMENTO.....	26
5.1.- Métodos para Sistemas Simétricos.....	26
5.1.1.- Método del Gradiente Conjugado.....	27
5.1.2.- Gradiente Conjugado Precondicionado.	33
5.1.3.- Precondicionador Diagonal.....	38

	<i>Pág.</i>
5.1.4.- Precondicionador de Cholesky.....	40
5.1.5.- Precondicionador de Crout.....	43
5.2.- Métodos para Sistemas No Simétricos.....	45
5.2.1.- Método de Regularización Parabólica.	46
5.2.1.1.- Método de Jacobi.....	50
5.2.1.2.- Método de Aproximación de un paso.....	51
5.2.1.3.- Método de Aproximación de dos pasos.....	53
5.2.1.4.- Aceleración mediante Relajación.....	54
5.2.1.5.- Estudio de consistencia y estabilidad de los métodos implícitos.....	56
5.2.2.- Métodos de Gradiente Conjugado.....	61
5.2.2.1.- Método de la Ecuación Normal.....	62
5.2.2.2.- Método del Error Mínimo...	66
5.2.2.3.- Método del Residuo Mínimo.	69
5.2.2.4.- Método del Doble Gradiente Conjugado.....	73

	<i>Pág.</i>
6. - APLICACIONES A PROBLEMAS LINEALES.....	78
6.1.- Problemas Simétricos.....	78
6.1.1.- Problema de Elasticidad Plana.....	80
6.1.2.- Problema de Transmisión de Calor Lineal.....	91
6.2.- Problema No Simétrico.....	104
6.2.1.- Problema de Convección-Difusión aplicando Difusión Artificial.....	106
7. - APLICACIONES A PROBLEMAS NO LINEALES.....	139
7.1.- Introducción a Problemas No Lineales.....	139
7.2.- Problema de Transmisión de Calor No Lineal..	141
8. - CONCLUSIONES.....	160
9. - APENDICE.....	163
9.1.- Aspectos Computacionales.....	163
10. - BIBLIOGRAFIA.....	173

1. - INTRODUCCION.

1.1.- METODOS ADAPTATIVOS.

En la resolución numérica de problemas de contorno mediante el método de los elementos finitos, la calidad de la solución aproximada obtenida depende del grado de discretización considerado en la construcción de la aproximación. Elegida una discretización del dominio en estudio, al abordar una aplicación numérica, la solución que se obtiene tendrá errores locales que difieren para los distintos elementos finitos de la red o malla, y que serán mayores en las zonas del dominio donde la solución experimente un comportamiento más irregular (singularidades en el dominio, gradientes altos,...), siendo de interés, por tanto, considerar una malla para la cual los errores locales de la solución numérica disminuyan.

Los métodos adaptativos de refinamiento de mallados de elementos finitos surgen para afrontar el objetivo expuesto. Se basan en generar una malla a partir de otra dada, por introducción de nuevos elementos finitos. La nueva malla contiene a la anterior y se distingue de ésta por la existencia de discretizaciones más fuertes en los subdominios donde indicadores de errores locales detecten la necesidad de mejorar la calidad de la aproximación de la

solución numérica. Este proceso se puede aplicar cuantas veces sea necesario hasta obtener la exactitud buscada en la solución.

Toda iteración incluida en un proceso adaptativo constará de un primer paso de formación del sistema de ecuaciones, al que seguirá la resolución del mismo. Obtenida la solución del sistema asociado a la discretización establecida, se procede al cálculo de los indicadores de error que nos permitirán adoptar una estrategia de refinamiento adecuada a las características de cada problema.

1.2.- METODOS ELEMENTO A ELEMENTO.

La aplicación del método de los elementos finitos a un problema de contorno, conduce a la formación y resolución numérica de un sistema algebraico de ecuaciones de orden elevado para discretizaciones fuertes y de estructura sparse. En el contexto de utilización de métodos adaptativos de refinamiento de mallas, afrontamos la resolución de un sistema para cada malla generada que ve destruída la estructura sparse de su matriz de rigidez debido al ensamblaje de las matrices elementales de los nuevos elementos introducidos, lo que dificulta la utilización de métodos directos que requieren una importante capacidad de memoria disponible en ordenador.

Una alternativa a este problema, al que se dedican grandes esfuerzos en la actualidad, consiste en la aplicación de métodos iterativos que lleven a cabo la resolución numérica de los sistemas sin formar la matriz de rigidez y aprovechen la solución de la malla anterior como aproximación inicial. Se trata por tanto de métodos en los que todas las operaciones matriciales que gobiernan el algoritmo de resolución del sistema, se realizan de modo elemental, es decir, elemento a elemento. De esta forma sólo se requiere el almacenamiento de las matrices elementales y un número reducido de vectores que conforman el método.

1.3.- OBJETIVOS.

En este trabajo de tesis, el objetivo fundamental es realizar un estudio sobre métodos elemento a elemento de resolución de sistemas de ecuaciones asociados a métodos adaptativos de refinamiento de mallados de elementos finitos, a fin de aportar criterios de elección entre éstos en aplicaciones numéricas de problemas lineales y no lineales de contorno, con matrices del sistema simétricas y no simétricas.

Otros objetivos propuestos corresponden a la utilización del método multimalla en procesos adaptativos aplicando métodos implementados elemento a elemento tanto en los pasos de suavizado como en la resolución del sistema en la malla inicial; al estudio de las propiedades de estabilidad numérica de los métodos abordados elemento a elemento que se basan en la regularización parabólica del sistema asociado al problema elíptico discreto; al tratamiento de los aspectos computacionales relativos a la implementación de los métodos elemento a elemento; y, por último, a la obtención de conclusiones sobre la efectividad de los métodos entre sí en cuanto a tiempo de cálculo, almacenamiento de memoria en ordenador y convergencia en la resolución de diversos problemas lineales y no lineales que se han abordado.

2.- VENTAJAS DE LOS METODOS ELEMENTO A ELEMENTO.

2.1.- PROBLEMAS UNIDIMENSIONALES.

En procesos adaptativos, la resolución de un problema unidimensional mediante el método de elementos finitos destruye la estructura ordenada del mallado por la introducción de nuevos nodos intermedios. Igualmente, la numeración de los elementos resulta desordenada, y el ensamblaje de las matrices elementales da una matriz global que pierde su estructura en banda. Esto supone un aumento de memoria y tiempo de cálculo considerable, debido a la presencia de numerosos elementos nulos dispersos en la matriz de rigidez.

Una solución elemental a este problema consistiría en reenumerar todo el mallado, es decir, los nodos y elementos. Esto implicaría que todas las matrices y vectores que contengan información relativa a los nodos y elementos del mallado deben ser reordenados también, con el consiguiente costo.

Otra posible estrategia sería utilizar un método iterativo elemento a elemento aprovechando la solución obtenida en un mallado como solución inicial para el mallado

refinado. Sin embargo, los resultados obtenidos con estas técnicas en problemas unidimensionales no han sido tan satisfactorias en cuanto a la rapidez de convergencia hacia la solución. En cualquier caso, conviene no olvidar que los métodos iterativos elemento a elemento van a ser más competitivos en problemas bidimensionales, y con toda seguridad más eficaces que los directos en tres dimensiones (véase estudios realizados al respecto por *Muller-Hughes* [34]).

En el propósito de utilizar un método directo de resolución de sistemas en problemas abordados mediante el método de elementos finitos adaptativos que actúa sobre mallados desordenados, se aporta en este trabajo una técnica de ensamblaje que permite obtener una matriz global tridiagonal en cada iteración de refinamiento adaptativo cuando se utilizan funciones de forma lineales. La técnica propuesta se basa en la utilización de un vector de enteros auxiliar que contenga la información referente a la posición física de cada elemento finito en el mallado. La construcción del vector auxiliar n_p es tal que para el elemento Ω_{n^e} que ocupa la posición i -ésima en el mallado, se establece la asignación:

$$n_{p_i} = n^e, \quad (n^e: \text{numeración global del elemento})$$

Los valores de este vector, en los elementos del mallado, se obtienen por comparación de las coordenadas de los nodos. La implementación realizada de construcción del vector auxiliar es reproducida:

```

      SUBROUTINE ACNPE (X,NODES,NP)
      IMPLICIT REAL*8 (A-G,O-Z)
      COMMON/CCON/TITLE(20),NNODE,NELEM
      DIMENSION X(4),NODES(2,1),NP(1)
      NP(1)=1
      DO 200 I=2,NELEM
      CI=X(NODES(2,NP(I-1)))
      DO 100 J=2,NELEM
      IF(X(NODES(1,J)).EQ.CI) GOTO 150
100  CONTINUE
150  NP(I)=J
200  CONTINUE
      RETURN
      END

```

Donde:

X : Vector de coordenadas de los nodos.
 NODES : Matriz de conexiones nodales.
 NP : Vector auxiliar.
 NNODE : Número de nodos del mallado.
 NELEM : Número de elementos del mallado.

Al ensamblar las matrices elementales siguiendo el orden establecido por el índice de barrido de elementos del mallado, obtenemos una matriz global con estructura

tridiagonal. Llamemos GK a la matriz que contiene las tres diagonales y GF el vector segundo miembro del sistema, el ensamblamiento nodal que obtiene la formación de la matriz tridiagonal es reproducida:

```

SUBROUTINE AASSMB(EK,EF,NODES,GK,GF,NP)
IMPLICIT REAL*8(A-G,O-Z)
COMMON/CCON/TITLE(20),NNODE,NELEM,NMAT,NPOINT
DIMENSION EK(2,2,1),EF(2,1),NODES(2,1)
DIMENSION GK(3,1),GF(1),NP(1)
DO 10 NEL=1,NELEM
DO 10 I=1,2
IG=NODES(I,NEL)
C   ENSAMBLAJE DEL VECTOR GLOBAL GF
10  GF(IG)=GF(IG)+EF(I,NEL)
C   ENSAMBLAJE DE LA MATRIZ GLOBAL GK
GK(1,1)=0.
GK(2,1)=EK(1,1,1)
GK(3,1)=EK(1,2,1)
DO 20 I=2,NNODE-1
GK(1,I)=EK(2,1,NP(I-1))
GK(2,I)=EK(1,1,NP(I))+EK(2,2,NP(I-1))
GK(3,I)=EK(1,2,NP(I))
20  CONTINUE
GK(1,NNODE)=EK(2,1,NP(NNODE-1))
GK(2,NNODE)=EK(2,2,NP(NNODE-1))
GK(3,NNODE)=0.
RETURN
END

```

Siendo:

$EK(j,k,n_e)$: elemento K_{jk} de la matriz elemental de Ω_{n_e} .

$EF(j,n_e)$: elemento F_j del vector elemental del segundo miembro correspondiente al elemento Ω_{n_e} .

Obsérvese que se toman $GK(1,1)=0$ y $GK(3,NNODE)=0$ para completar las diagonales.

Al resolver el sistema debemos proceder a una reordenación del vector solución y del vector segundo miembro, que corresponda a la efectuada con la matriz tridiagonal; tal que la solución en el nodo N sea $U(N)$, siendo N la numeración global del nodo. Por tanto, la triangularización y el remonte se implementarán atendiendo a la observación anterior.

La técnica de reordenamiento implementada junto con el ensamblaje de las matrices elementales en una global tridiagonal, permite un ahorro considerable de memoria.

Las subrutinas reproducidas forman parte del programa MEFA1 [33], versión autoadaptativa del programa estandar de elementos finitos en 1-D, CODE1, desarrollado por *Becker-Carey-Oden* [7]. El lenguaje de programación utilizado ha sido FORTRAN 77 en un VAX 11/750.

La resolución directa del sistema tridiagonal ha superado como era de esperar en 1-D a cualquier método iterativo que hemos aplicado en cuanto a número de operaciones realizadas.

Se propone esta técnica de reordenación y formación de un sistema tridiagonal como la más adecuada cuando se resuelven problemas unidimensionales mediante el método de los elementos finitos adaptativos, independiente de que el número de ecuaciones que forman el sistema sea considerablemente alto en las últimas discretizaciones que se realicen en el proceso adaptativo.

2.2.- PROBLEMAS BIDIMENSIONALES.

En el tratamiento de problemas bidimensionales mediante el método de elementos finitos, la solución propuesta de reordenación del mallado no es tan evidente como en problemas unidimensionales. Así, obtener una matriz en banda mediante un ensamblaje ordenado de las matrices elementales es un problema complejo, sobre todo si forma parte de un proceso adaptativo.

Actualmente es de aceptación general la utilización de métodos iterativos para la resolución de sistemas de ecuaciones de orden elevado. Estos, además, tienen la ventaja de que aprovechan la solución de mallados anteriores como aproximación inicial, cuando se trabaja con procesos adaptativos. Pero si en cada etapa de refinamiento se tuviera que ensamblar las matrices elementales para construir la global, no sólo incrementaría el tiempo de cálculo, sino que aumentaría la demanda de memoria hasta tal punto de poder hacer inabordables la resolución numérica de muchos problemas.

Los métodos iterativos elemento a elemento que se proponen, permiten resolver los sistemas de ecuaciones sin necesidad de ensamblar la matriz global. Por tanto, con un

espacio de memoria relativamente pequeño se pueden abordar problemas de gran rango (ver referencias [34], [19] y [20]).

Las operaciones se realizan utilizando una a una las matrices elementales, independizando así su efectividad con respecto a la numeración de los elementos, al contrario que para los métodos basados en el ensamblaje de la matriz global del sistema, donde la efectividad dependía del orden de numeración, por su influencia en la dispersión de los términos no nulos y en general en las características de la matriz de rigidez.

Cuando sólo se opera con matrices elementales, éstas se pueden almacenar en disco (por ejemplo: en ficheros de acceso directo) si bien esto depende de la memoria disponible y de la velocidad de acceso a disco.

A todas estas ventajas de los métodos elemento a elemento se suma otra en problemas lineales, donde no es necesario recalcular las matrices de los elementos no refinados, lo que se traduce en un ahorro considerable en el costo de cálculo informático.

3.- DESCRIPCION DE LOS METODOS ELEMENTO A ELEMENTO.

3.1.- RESOLUCION DE SISTEMAS SIMETRICOS.

La necesidad de resolver problemas hoy en día con fuertes discretizaciones, ha desatado durante los últimos años un interés creciente por técnicas iterativas.

En la resolución numérica de sistemas con matriz simétrica definida positiva, el método del Gradiente Conjugado Precondicionado ha atraído la atención de la comunidad científica debido a su simplicidad y a la utilización de un número fijo y predeterminado de vectores en el proceso de resolución .

Otra característica de este método es que a priori se puede conocer el número máximo de iteraciones a realizar, lo que supone cierta seguridad cuando se abordan grandes problemas.

En el caso de procesos adaptativos, adquiere gran interés la posibilidad de implementar el algoritmo del Gradiente Conjugado Precondicionado de forma que sólo se opere a nivel de elemento. Para aprovechar esta ventaja se han considerado preconditionadores elemento a elemento (como lo son el de Cholesky y el de Crout, propuestos por *Hughes*

[34]) además del preconditionador diagonal que permite realizar la programación del método conservando esta idea (ver *Jenning* [27]).

3.2.- RESOLUCION DE SISTEMAS NO SIMETRICOS.

Ante la imposibilidad de aplicar el método del Gradiente Conjugado cuando el sistema es no simétrico, solo caben dos alternativas: la primera es optar por un nuevo método que permita conservar la estructura elemento a elemento; la segunda opción es transformar el sistema dado en otro que sea simétrico y aplicar entonces el método del gradiente conjugado.

El método de Regularización Parabólica del sistema a resolver junto con la aplicación de esquemas de factorización elemento a elemento, suponen una primera vía de solución del problema.

El primer ejemplo de un esquema elemento a elemento de este tipo aparece con *Hughes, Levit y Winget* [20], presentando un procedimiento implícito, incondicionalmente estable y con una aproximación de segundo orden en tiempo, para el problema de transmisión de calor. Este método surge de ideas encontradas en la extensa literatura rusa sobre el operador *Splitting*. Siguiendo en esta línea, los mismos autores aplican esquemas elemento a elemento a problemas de mecánica del sólido y de estructura (ver referencia [19]). Se completará aquí el estudio de estos métodos con la aplicación de los mismos al problema de convección-difusión

utilizando la técnica de difusión artificial, y al problema de conducción de calor no lineal como procedimientos para la linealización en el método de Newton.

La otra alternativa se basa en replantear el sistema, de forma que se transforme en simétrico. En [28] Joly presenta diferentes algoritmos de simetrización que suponen ligeras variaciones en el algoritmo del Gradiente Conjugado para matrices simétricas. De los métodos presentados allí, hemos optado por aquellos que permitían conservar la idea de operar elemento a elemento y a la vez no tenían un costo de almacenaje excesivamente superior al del algoritmo de partida. Estos son el método de la Ecuación Normal, el del Error Mínimo, el del Residuo Mínimo y el de Doble Gradiente Conjugado.

La efectividad de estos últimos se estudia en las mismas aplicaciones citadas para los métodos de Regularización Parabólica.

4. - METODOS ELEMENTO A ELEMENTO Y MULTIMALLA.

4.1.- INTRODUCCION.

En la resolución de un sistema de ecuaciones dado por la discretización de un problema mediante el método de elementos finitos, se puede observar un fenómeno interesante al aplicar un método iterativo: la convergencia es rápida con respecto a las altas frecuencias y sólo las bajas frecuencias producen una convergencia lenta. El método Multimalla se basa en esta idea, eliminando el error de frecuencias altas en sistemas pequeños definidos por mallas con pocos elementos, resolviéndolos en términos de residuos.

Con un método autoadaptativo de refinamiento de mallados, podemos llevar a cabo la técnica multimalla guardando la estructura de todas la mallas que intervienen en el proceso.

Dado un sistema de ecuaciones:

$$Ax = b$$

y l niveles de mallas, resumimos a continuación el método multimalla, el cual está desarrollado en [17].

1.- Realizaremos un presuavizado, es decir, resolver mediante un método iterativo con un número fijo y reducido de iteraciones (V_1), el sistema dado en la malla l :

$$x_l = \mathcal{J}_l^{(V_1)}(x_l, b_l) \quad (4.1.1)$$

2.- Pasaremos a un nivel de malla inferior aplicando una restricción r al residuo:

$$b_{l-1} = r [A_l x_l - b_l] \quad (4.1.2)$$

procediendo a resolver el sistema:

$$A_{l-1} x_{l-1} = b_{l-1} \quad (4.1.3)$$

utilizando el mismo proceso (presuavizado y restricción) sucesivamente, hasta llegar a la malla $l=0$, cuyo sistema resolveremos aplicando un método iterativo hasta obtener una solución muy cercana a la exacta.

3.- Una vez tenemos la solución en una malla inferior, el paso a una malla superior se realiza mediante una prolongación p , tal que:

$$x_i = x_i - p x_{i-1} \quad (4.1.4)$$

4.- Después de obtener la solución aproximada en cada mallado, se realiza un postsuavizado mediante un número fijo y pequeño de iteraciones (V2) de un método iterativo:

$$\mathbf{x}_i = \mathcal{J}_i^{(V2)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{b}_i) \quad (4.1.5)$$

El proceso multimalla se puede realizar un número determinado de veces hasta que la solución cumpla la tolerancia exigida.

Definición de variables:

k : Nivel de Malla.

it : Número de iteraciones.

\mathbf{x}_k : Solución en el nivel k .

A_k : Matriz del sistema en el nivel k .

\mathbf{b}_k : Segundo miembro del sistema en el nivel k .

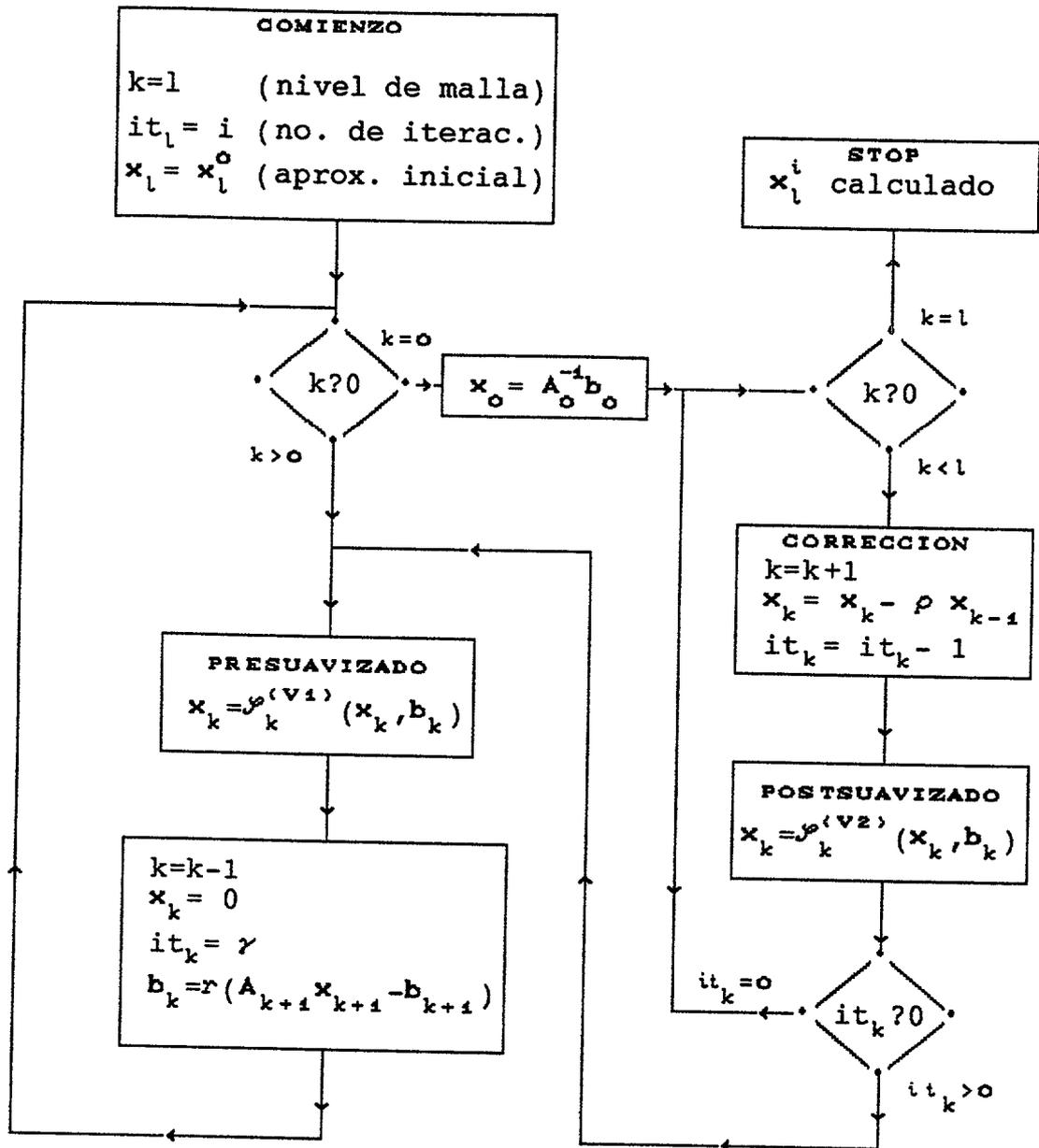
$\mathcal{J}_k^{(V1)}(\mathbf{x}_k, \mathbf{b}_k)$: Método iterativo aplicado $V1$ iteraciones para resolver $A_k \mathbf{x}_k = \mathbf{b}_k$.

$\mathcal{J}_k^{(V2)}(\mathbf{x}_k, \mathbf{b}_k)$: Método iterativo aplicado $V2$ iteraciones para resolver $A_k \mathbf{x}_k = \mathbf{b}_k$.

r : Restricción.

ρ : Prolongación.

ALGORITMO MULTIMALLA



4.2.- CONCLUSIONES.

En un proceso autoadaptativo de refinamiento de mallado, la aplicación del método multimalla supone almacenar todas las tablas que contienen la información de cada una de las diferentes mallas obtenidas, tal que permita conservar una estructura elemento a elemento. Consideraremos una estructura de árbol en cuanto a estas tablas, de forma que en cualquier paso del proceso se pueda saber qué elementos, caras y nodos componen una malla determinada.

Introduciéndonos en el algoritmo Multimalla, hemos definido la prolongación p mediante la misma interpolación utilizada para obtener la aproximación inicial de la solución en una malla a partir de la obtenida en la malla anterior. De igual forma, la restricción r será la inducida por la matriz del cambio de base realizado al pasar de una malla a otra de nivel inferior.

Falta concretar los métodos iterativos a emplear en la resolución del sistema correspondiente a la malla $l=0$, en el proceso de presuavizado y en el de postsuavizado. Se pueden utilizar diferentes métodos en cada caso, sin embargo aquí se ha optado por una estrategia en la que se considera un único método.

Observando los resultados obtenidos en la convergencia de los métodos que se han expuesto anteriormente, y que se desarrollan en el capítulo siguiente, se ha optado por la combinación del método Multimalla con el de Gradiente Conjugado con Precondicionador Diagonal, para problemas simétricos, y con el de Doble Gradiente Conjugado para problemas no simétricos, integrándose en el algoritmo Multimalla del programa NEPTUNO [11].

En la resolución del sistema en la Malla $l=0$, aplicaremos dichos métodos con un número de iteraciones igual al orden del sistema, dado que al ser ambos métodos de Gradiente Conjugado convergen teóricamente a la solución exacta en dicho número de iteraciones.

En los procesos de suavizado se aplicarán los mismos métodos que en el caso anterior según la simetría del problema, realizando pocas iteraciones (2 ó 3) que se controlarán mediante parámetros del programa.

5.- DESARROLLO DE LOS METODOS ELEMENTO A ELEMENTO.

5.1.- METODOS PARA SISTEMAS SIMETRICOS.

Para la resolución de sistemas simétricos con matriz global definida positiva, se propone el método del Gradiente Conjugado con diferentes preconditionadores propuestos por *Hughes*, basados en la idea de aproximar la factorización de la matriz global del sistema mediante el producto de factorizaciones elementales (preconditionadores EBE).

La estrategia consistirá en introducir en el algoritmo del Gradiente Conjugado Clásico, el concepto de preconditionamiento, y luego definir distintos preconditionadores. En este estudio, analizaremos el preconditionador Diagonal como primera aproximación, y los preconditionadores elemento a elemento de Cholesky y de Crout.

5.1.1.- METODO DEL GRADIENTE CONJUGADO.

Sea $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ una matriz simétrica definida positiva, no singular. Planteemos el problema de la resolución del sistema de ecuaciones lineales:

$$Ax = b \quad (5.1.1.1)$$

$$b \in \mathbb{R}^m, x \in \mathcal{X}, \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^m.$$

El método del Gradiente Conjugado, debido a *Hestenes y Stiefel* (1952) converge a la solución exacta en un número finito de iteraciones m (número de ecuaciones), en ausencia de errores de redondeo.

Si A es simétrica y definida positiva, la resolución de (5.1.1.1) es equivalente a la resolución del problema de minimización:

$$J(x) = \inf_{v \in \mathcal{X}} J(v)$$

siendo

$$J(v) = \frac{1}{2} (b - Av)^T A^{-1} (b - Av) \quad (5.1.1.2)$$

$J(v) \in C^1(\mathcal{X})$, $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^m$, un funcional cuadrático que puede expresarse de forma equivalente:

$$J(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} - \mathbf{b}^T \mathbf{v} + \frac{1}{2} \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} \quad (5.1.1.3)$$

Por tanto, se plantea el problema de la forma siguiente:

$$\text{grad } J(\mathbf{x}) = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (5.1.1.4)$$

$$\mathbf{x} \in \mathbb{X}, \text{ grad } J(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^m.$$

Sea \mathbf{x}_n una aproximación a la solución exacta \mathbf{x} , se determina \mathbf{x}_{n+1} siguiendo la dirección corregida del vector $\text{grad } J(\mathbf{x}_{n+1})$ y eligiendo el punto donde $J(\mathbf{x}_{n+1})$ sea mínimo:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \alpha_n \mathbf{p}_n \quad (5.1.1.5)$$

siendo \mathbf{p}_n el vector cuya dirección se pretende seguir y α_n un parámetro tal que $J(\mathbf{x}_{n+1})$ es mínimo.

Para la obtención del vector \mathbf{p}_n se parte de la siguiente propiedad:

Si \mathbf{x}_0 satisface que $J(\mathbf{x}_0) = c$, y si \mathbf{x}^* minimiza $J(\mathbf{x})$, el vector que une \mathbf{x}_0 con \mathbf{x}^* es A-conjugado de cualquier vector perteneciente al hiperplano tangente a $J(\mathbf{x})$ en el punto \mathbf{x}_0 . Por tanto, \mathbf{p}_n se irá corrigiendo en cada iteración tal que sea coplanario con \mathbf{r}_n y \mathbf{p}_{n-1} , y A-conjugado a \mathbf{p}_{n-1} .

Sea $r_n = b - Ax_n$, entonces:

$$p_0 = r_0 \quad (5.1.1.6)$$

$$p_n = r_n + \beta_n p_{n-1}, \quad \forall n > 0$$

La elección de β_n viene dada haciendo que p_n sea A-conjugado a p_{n-1} , es decir, $p_n^T A p_{n-1} = 0$:

$$[r_n + \beta_n p_{n-1}]^T A p_{n-1} = 0$$

de donde:

$$\beta_n = - \frac{r_n^T A p_{n-1}}{p_{n-1}^T A p_{n-1}}, \quad \forall n > 0 \quad (5.1.1.7)$$

Una vez obtenido p_n , se calcula α_n tal que $J(x_{n+1})$ sea mínimo:

$$J(x_{n+1}) = \frac{1}{2} (x_n + \alpha_n p_n)^T A (x_n + \alpha_n p_n) - b^T (x_n + \alpha_n p_n)$$

El valor de α_n que minimiza $J(x_{n+1})$ es (ver *Stoer-Bulirsch* [43]):

$$\alpha_n = \frac{r_n^T p_n}{p_n^T A p_n} \quad (5.1.1.8)$$

La sucesión de vectores r_0, r_1, r_2, \dots y p_0, p_1, p_2, \dots , generados según (5.1.1.6) tienen las siguientes propiedades:

- a.- $r_i^T p_j = 0$ para $j < i$
- b.- $r_i^T r_i > 0$, $r_i^T p_i = r_i^T r_i$
- c.- $p_i^T A p_j = 0$ para $i < j$
- d.- $r_i^T r_j = 0$ para $i < j$
- e.- $r_i = b - A x_i$

La demostración se puede encontrar en *Stoer-Bulirsch* [43].

Aplicando las propiedades anteriores, las expresiones (5.1.1.7) y (5.1.1.8) de β_n y α_n se pueden transformar en las siguientes:

$$\beta_n = \frac{r_n^T r_n}{r_{n-1}^T r_{n-1}} \quad (5.1.1.9)$$

$$\alpha_n = \frac{r_n^T r_n}{p_n^T A p_n} \quad (5.1.1.10)$$

reduciendo el número de productos matriz por vector.

El algoritmo del método del Gradiente Conjugado se establece como sigue, en base considerar el problema de la resolución de un sistema de ecuaciones como equivalente al de minimización de una funcional, para lo cual se elaboraron las estrategias anteriores:

ALGORITMO DEL GRADIENTE CONJUGADO

Primer paso: Inicialización.

$$n = 0$$

$$r_0 = b - Ax_0$$

$$p_0 = r_0$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo.

$$\alpha_n = \frac{r_n^T r_n}{p_n^T A p_n}$$

$$x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n$$

$$r_{n+1} = r_n - \alpha_n A p_n$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\text{¿ } \|r_{n+1}\| < \delta \|r_0\| \text{ ?}$$

si: detener el proceso.

no: continuar.

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$\beta_{n+1} = \frac{r_{n+1}^T r_{n+1}}{r_n^T r_n}$$

$$p_{n+1} = r_{n+1} + \beta_{n+1} p_n$$

volver al segundo paso.

5.1.2.- GRADIENTE CONJUGADO PRECONDICIONADO.

En la resolución de muchos problemas físicos, aparecen sistemas de ecuaciones mal condicionados a los que cualquier pequeño error de redondeo afecta variando sustancialmente la solución o incluso impidiendo la convergencia al aplicar un método iterativo.

Para superar esta dificultad se propone una variación en el sistema original (5.1.1.1) multiplicando ambos miembros por una matriz tal que el sistema resultante quede mejor condicionado. El mejor o peor condicionamiento de un sistema depende del número de condicionamiento que se define como:

$$k(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}},$$

siendo

λ_{\max} = máximo valor propio de A.

λ_{\min} = mínimo valor propio de A.

Un buen preconditionador es aquel que hace el número de condicionamiento del sistema lo más cercano a la unidad (Ver referencias [34] y [28]).

Sea B la matriz de preconditionamiento, entonces el sistema (5.1.1.1) queda:

$$B^{-1}Ax = B^{-1}b \quad (5.1.2.1)$$

Al aplicar el método del Gradiente Conjugado al sistema (5.1.2.1) resulta el algoritmo del Gradiente Conjugado Precondicionado:

ALGORITMO DEL GRADIENTE CONJUGADO PRECONDICIONADO

Primer paso: Inicialización.

$$n = 0$$

$$r_0 = b - Ax_0$$

$$p_0 = z_0 = B^{-1}r_0$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo

$$\alpha_n = \frac{r_n^T z_n}{p_n^T A p_n}$$

$$x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n$$

$$r_{n+1} = r_n - \alpha_n A p_n$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\text{¿ } \|r_{n+1}\| < \delta \|r_0\| \text{ ?}$$

si: detener el proceso.

no: continuar.

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$z_{n+1} = B^{-1} r_{n+1}$$

$$\beta_{n+1} = \frac{r_{n+1}^T z_{n+1}}{r_n^T z_n}$$

$$p_{n+1} = z_{n+1} + \beta_{n+1} p_n$$

volver al segundo paso.

Obsérvese que si $B = A$ el algoritmo converge en una iteración, aunque evidentemente esto equivale a resolver el sistema aplicando un método directo. Por tanto, cuanto mejor se aproxima B a la matriz del sistema A más se acelera la convergencia. Sin embargo, la elección de B debe estar ligada también a la obtención de un sistema relativamente fácil de resolver, intentando equilibrar ambos objetivos.

Los siguientes aspectos de implementación son también importantes: el algoritmo utiliza cuatro vectores además del preconditionador B , estos son: x , r , z y p . Está claro que r puede ocupar el mismo espacio que b . También el producto Ap_n se puede acumular en z_n , siempre que el escalar $r_n^T z_n$ se almacene para su utilización en el paso de corrección de la dirección conjugada.

Se puede demostrar (ver referencia [31]) que el residuo del algoritmo del Gradiente Conjugado Precondicionado decrece de acuerdo con la expresión:

$$\|r_{n+1}\| < \frac{k(B^{-1}A) - 1}{k(B^{-1}A) + 1} \|r_n\| \quad (5.1.2.2)$$

por lo tanto, es deseable que $k(B^{-1}A)$ esté próximo a la unidad.

Otro aspecto de implementación a considerar es el producto de Ap_n . En un programa de Elementos Finitos Adaptativos donde se almacenan todas las matrices elementales y nunca se construye la matriz de rigidez A , se tendrá que realizar este producto de forma elemental:

$$Ap_n = \left[\sum_{e=1}^{Nel} A^e \right] p_n = \sum_{e=1}^{Nel} A^e p_n^e \quad (5.1.2.3)$$

donde A^e representa la matriz elemental correspondiente al elemento e , p_n^e los términos de p_n que van a multiplicarse por los de A^e , y N_e el número total de elementos (obsérvese que la dimensión de A^e y de p_n^e es la misma que la de A , sólo que contiene todos los términos nulos, salvo aquellos correspondientes al sistema elemental asociado al elemento Ω_e).

Queda así planteado de forma bastante completa este método que no sólo pretende un mejor condicionamiento del sistema original, sino que a la vez mejora la convergencia reduciendo el número de iteraciones necesarias para obtener una determinada exactitud en la solución.

5.1.3.- PRECONDICIONADOR DIAGONAL.

Está claro que al buscar un preconditionador sencillo, el más simple se obtendría eligiendo la matriz identidad, es decir:

$$B = I \quad (5.1.3.1)$$

lo que, evidentemente, significaría que no se está realizando preconditionamiento alguno.

Pero siguiendo en esta línea de búsqueda de un preconditionador sencillo, *Jennings* [27] propone la matriz diagonal:

$$B = \text{diag}(A) \quad (5.1.3.2)$$

Este preconditionador tiene varias características importantes:

- 1.- Es muy económico ya que el costo se reduce a un producto interior, por lo que la vectorización es inmediata.

2.- El número de operaciones debidas al preconditionamiento no aumenta en exceso por su estructura diagonal.

3.- Tiene un efecto multiplicador favorable que es especialmente importante en casos en que hay presentes variables de estado de dimensiones diferentes.

4.- Se mantiene en el objetivo de semejanza con la matriz del sistema ya que sus diagonales coinciden.

5.1.4.-PRECONDICIONADOR DE CHOLESKY.

Siguiendo en la línea de encontrar un preconditionador que se asemeje lo más posible a la matriz del sistema, se proponen los preconditionadores elemento a elemento, introducidos por *Hughes* en un esfuerzo por hacer mejor uso de la estructura de datos provista por los programas de elementos finitos, especialmente los adaptativos, donde sólo se opera con las matrices elementales (véase referencia [22]).

El preconditionador de Cholesky es un preconditionador elemento a elemento basado, como su nombre indica, en la factorización de Cholesky.

Sea C una matriz simétrica y definida positiva, entonces estableceremos la siguiente notación:

$$C = L_p(C) L_p^T(C) \quad (5.1.4.1)$$

descomposición en productos

$$C = L_s(C) + D_s(C) + L_s^T(C) \quad (5.1.4.2)$$

descomposición en sumas

donde los subíndices p y s indican producto y suma respectivamente.

La ecuación (5.1.4.1) representa la factorización de Cholesky de la matriz C , siendo L_p una matriz triangular inferior y L_p^T una triangular superior.

En la ecuación (5.1.4.2), L_s y L_s^T son las matrices triangular inferior y superior, respectivamente, con los términos de la diagonal nulos, y D_s es la diagonal de C .

Siguiendo esta notación, estableceremos para cada matriz elemental A^\bullet una transformación que denominaremos \bar{A}^\bullet , siendo la dimensión de A^\bullet y \bar{A}^\bullet la misma que la de A (ver *Winget* [44]):

$$\bar{A}^\bullet = I + D_s(A)^{-\frac{1}{2}} [A^\bullet - D_s(A^\bullet)] D_s(A)^{-\frac{1}{2}} \quad (5.1.4.3)$$

A partir de (5.1.4.3) definiremos el preconditionador de Cholesky de forma siguiente (*Muller y Hughes* [34]):

$$B = D_s(A)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{p=1}^{N-1} L_p(\bar{A}^\bullet) \right] \left[\prod_{p=N-1}^1 L_p^T(\bar{A}^\bullet) \right] D_s(A)^{\frac{1}{2}} \quad (5.1.4.4)$$

La matriz B que resulta de (5.1.4.4) es simétrica y definida positiva. De igual forma, se puede observar que

excepto el producto de $D_{\bullet}(A)^{\frac{1}{2}}$ cuya implementación es sencilla, todas las operaciones pueden realizarse a nivel de elemento, implicando sólo a matrices de dimensión pequeña.

Después de que las matrices preconditionadoras elementales se forman y factorizan, la evaluación de $B^{-1}r_{n+1}$ (cuarto paso del algoritmo del Gradiente Conjugado Precondicionado) se realiza mediante un bucle de dos partes sobre todos los elementos, donde se utiliza un proceso de "juntar/separar" en la reducción frontal y sustitución hacia atrás en cada elemento. Aunque esto parece bastante costoso, la experimentación numérica demuestra que no es tan importante como cabría esperar. Si introducimos este preconditionador en el algoritmo del Gradiente Conjugado, el mayor costo lo constituyen los procesos de reducción frontal y sustitución hacia atrás de cada elemento y la evaluación del producto matriz por vector para el cálculo del α_n en el segundo paso del algoritmo, que se realiza según (5.1.2.3). El proceso de factorización elemental no tiene un costo significativo ya que es amortizado por el número de iteraciones requeridas para la convergencia. Por otro lado, la memoria requerida para las matrices factorizadas se reduce a la mitad debido a la simetría, y nótese que ésta es mucho menor que la demandada por cualquier método directo.

5.1.5.- PRECONDICIONADOR DE CROUT.

Este preconditionador se obtiene siguiendo los mismos pasos que para el de Cholesky, salvo que la factorización utilizada en este caso es la de Crout. Igual que para el de Cholesky, definamos sobre una matriz C la descomposición en sumas (5.1.4.2) y la descomposición en productos de la forma (factorización de Crout):

$$C = L_p(C) D_p(C) U_p(C) \quad (5.1.5.1)$$

siendo L_p una matriz triangular inferior y U_p una triangular superior, ambas con todos los términos de la diagonal iguales a la unidad, y D_p una matriz diagonal resultante de la factorización de Crout. Debido a la simetría de C :

$$L_p(C) = U_p^T(C) \quad (5.1.5.2)$$

lo cual supone un ahorro considerable de memoria Aplicando a cada matriz elemental A° la transformación (5.1.4.3) y siguiendo la misma notación, se define el preconditionador de Crout de la forma ($B \in \mathbb{R}^{m \times m}$),

$$B = D_\bullet(A)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{\bullet=1}^{N\bullet 1} L_p(\bar{A}^\circ) \right] \left[\prod_{\bullet=1}^{N\bullet 1} D_p(\bar{A}^\circ) \right] \left[\prod_{\bullet=N\bullet 1}^1 L_p^T(\bar{A}^\circ) \right] D_\bullet(A)^{\frac{1}{2}} \quad (5.1.5.4)$$

Las características del preconditionador de Crout son en general similares a las establecidas para el de Cholesky: la matriz B definida por (5.1.5.4) es simétrica y definida positiva. Las operaciones se realizan a nivel de elemento, excepto el producto de $D_{\alpha}^{-1}(A)^{\frac{1}{2}}$ cuya implementación es sencilla. El cálculo de $B^{-1}r_{n+1}$ se realiza por medio de un bucle de tres partes sobre todos los elementos, donde se utiliza un proceso de "juntar/separar" en la reducción frontal, multiplicación diagonal y sustitución hacia atrás en cada elemento. El mayor costo lo siguen constituyendo los procesos de reducción frontal y sustitución hacia atrás de cada elemento y la evaluación del producto matriz por vector para el cálculo del α_n . Igualmente, el proceso de factorización elemental no tiene un costo significativo al ser amortizado por el número de iteraciones requeridas para la convergencia. Son posibilidades comunes a ambos preconditionadores : almacenar las factorizaciones de las matrices elementales dependiendo de disponer de una RAM de alta velocidad y de la rapidez del acceso a disco, vectorizar el algoritmo (aunque esta vectorización no es directa) y paralelizar el algoritmo cuando se tiene acceso a procesadores múltiples.

5.2.- METODOS PARA SISTEMAS NO SIMETRICOS.

En la resolución de sistemas no simétricos se proponen dos posibles vías: el método de Regularización Parabólica y los métodos basados en el Gradiente Conjugado.

La primera nos lleva a plantear el problema parabólico asociado al sistema dado y aplicarle un esquema en diferencias clásico para su resolución. Una vez obtenida la formulación general del método, se analizarán los diferentes casos del esquema resultante: el método de Jacobi, el método de aproximación de un paso y el método de aproximación de dos pasos. Debido a la lenta convergencia de éstos métodos, se propone aplicar un proceso de aceleración que los haga más competitivos frente a otros.

La segunda vía se basará en replantear el sistema de ecuaciones de forma que la matriz resultante sea simétrica y definida positiva, aplicando entonces, con las adaptaciones necesarias, el método del Gradiente Conjugado. Para obtener la simetría proponemos la formulación de la Ecuación Normal, la del Error Mínimo, la del Residuo Mínimo y la del Doble Gradiente Conjugado.

5.2.1.- METODO DE REGULARIZACION PARABOLICA.

Dado un problema elíptico discreto por:

$$Ax = b, \quad \forall A \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m, x, b \in \mathbb{R}^m \quad (5.2.1.1)$$

el primer paso para establecer un método de resolución elemento a elemento, es reemplazar dicho problema por el parabólico asociado:

$$W \frac{dy}{d\tau} + A y = H(\tau) b \quad (5.2.1.2)$$

$$y(0) = y_0 \quad (5.2.1.3)$$

donde $W \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$ es una matriz definida positiva, $y \in \mathbb{R}^m$ es el vector solución y $H(\tau)$ es la función escalón:

$$H(\tau) = 1 \quad \forall \tau > 0$$

$$H(\tau) = 0 \quad \forall \tau \leq 0$$

siendo τ un pseudo tiempo adimensional, $\tau \in \mathbb{R}$.

Se puede demostrar fácilmente que la solución asintótica de (5.2.1.2) coincide con la del problema original (5.2.1.1):

$$x = \lim_{\tau \rightarrow \infty} y(\tau) \quad (5.2.1.4)$$

De todas las posibilidades de elección de W , una simple, pero eficaz, consiste en tomar la diagonal de A :

$$W = \text{diag}(A) \quad (5.2.1.5)$$

A continuación se introduce un esquema de discretización de pseudo tiempo. Para ello se emplea el algoritmo trapezoidal generalizado clásico:

$$(W + \theta \Delta\tau A) y_{n+1} = [W - (1-\theta) \Delta\tau A] y_n + \Delta\tau b \quad (5.2.1.6)$$

$$y_n = y_0 \quad \text{para } n = 0 \quad (\theta \in \mathbb{R}; y_{n+1}, y_n \in \mathbb{R}^m) \quad (5.2.1.7)$$

Dependiendo de la elección del parámetro θ , se obtienen los diferentes métodos clásicos de resolución numérica del problema del valor inicial. Así, para $\theta = 0$ se obtiene un método explícito generalmente conocido como el Método de Jacobi.

$$W y_{n+1} = (W - \Delta\tau A) y_n + \Delta\tau b \quad (5.2.1.8)$$

Interesa obtener la solución asintótica de (5.2.1.2). Si se elige $\theta = 1$, este valor minimiza la

disipación numérica del algoritmo (ver *Hughes* [18]). Entonces la ecuación (5.2.1.6) se simplifica de la siguiente forma, obteniéndose un método implícito:

$$(W + \Delta\tau A) y_{n+1} = W y_n + \Delta\tau b \quad (5.2.1.9)$$

Para $\theta \geq \frac{1}{2}$, el algoritmo trapezoidal generalizado es incondicionalmente estable, luego para el caso de $\theta = 1$ lo será. Para grandes $\Delta\tau$, la solución de (5.2.1.9) converge a la asintótica rápidamente.

En cambio, para $\theta \leq \frac{1}{2}$, la estabilidad del método está condicionada por las características del problema a resolver.

Transformemos la expresión (5.2.1.9) para introducir los métodos elemento a elemento en el algoritmo y facilitar su implementación:

$$(W + \Delta\tau A) (y_{n+1} - y_n) = \Delta\tau (b - A y_n)$$

es decir:

$$y_{n+1} - y_n = \Delta\tau (W + \Delta\tau A)^{-1} (b - A y_n)$$

sacando $W^{-\frac{1}{2}}$ factor común a ambos lados de la matriz a

invertir:

$$y_{n+1} - y_n = \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} \left(I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}} \right)^{-1} W^{-\frac{1}{2}} (b - A y_n) \quad (5.2.1.10)$$

Si consideramos la siguiente notación:

$$r_n = b - A y_n \quad (\text{vector residuo}) \quad (5.2.1.11)$$

$$V = \left(I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}} \right)^{-1} \quad (5.2.1.12)$$

sustituyendo las expresiones (5.2.1.11) y (5.2.1.12) en la ecuación (5.2.1.10) se obtiene:

$$y_{n+1} - y_n = \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} V W^{-\frac{1}{2}} r_n \quad (5.2.1.13)$$

A partir de esta ecuación, dependiendo de la forma de aproximación de la matriz V se obtendrán los diferentes métodos elemento a elemento a implementar.

5.2.1.1.- METODO DE JACOBI.

El camino más sencillo de simplificar la ecuación (5.2.1.6) es particularizarla para $\theta = 0$, obteniéndose un método explícito dado por la expresión (5.2.1.8):

$$W y_{n+1} = (W - \Delta\tau A) y_n + \Delta\tau b$$

El algoritmo trapezoidal generalizado se transforma entonces en el esquema:

$$y_{n+1} - y_n = \Delta\tau W^{-1} r_n \quad (5.2.1.1.1)$$

correspondiente al método de Jacobi relajado, siendo el pseudo tiempo $\Delta\tau$ el parámetro de relajación.

El error que se comete es $O(\Delta\tau^2)$, obteniéndose una aproximación de primer orden. Sin embargo, el algoritmo es bastante sencillo y el costo de cálculo por iteración, es relativamente pequeño.

El método de Jacobi no es incondicionalmente estable, debiéndose estudiar las diferentes condiciones de estabilidad para cada problema particular a resolver. En el capítulo de Aplicaciones numéricas se realiza el análisis de la estabilidad para los dos problemas de contorno abordados que tienen asociadas matrices de rigidez no simétricas.

5.2.1.2.- METODO DE APROXIMACION DE UN PASO.

La matriz global del sistema expresada como suma de elementales será:

$$A = \sum_{e=1}^{Nel} A^e \quad (5.2.1.2.1)$$

donde e es el número del elemento, Nel el número total de elementos y A^e la matriz elemental correspondiente al elemento Ω_e .

Por analogía con la ecuación (5.2.1.11) definimos:

$$V_1^e = (I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A^e W^{-\frac{1}{2}})^{-1} \quad (5.2.1.2.2)$$

Aproximaremos el valor de V en la ecuación (5.2.1.12) de la forma:

$$V \simeq V_1 = \prod_{e=1}^{Nel} V_1^e = V_1^1 V_1^2 \dots V_1^{Nel} \quad (5.2.1.2.3)$$

donde V_1 y V_1^e tienen la misma dimensión de A .

El algoritmo de la ecuación (5.2.1.12) se transforma según esta aproximación en:

$$y_{n+1} - y_n = \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=1}^{N_e} V_1^* \right] W^{-\frac{1}{2}} r_n \quad (5.2.1.2.4)$$

siendo éste un esquema del tipo elemento a elemento, al realizarse todas las operaciones matriciales, excepto el producto de $W^{-\frac{1}{2}}$, a nivel elemental. La transformación elemental (5.2.1.2.2) puede almacenarse en disco o no, dependiendo de la velocidad de la RAM disponible y la rapidez de acceso a disco, como sucede con los Precondicionadores Elemento a Elemento del Gradiente Conjugado. El mayor costo lo supone el cálculo de r_n (producto de matriz por vector) y los productos de los V_1^* (equivalentes a otro producto de matriz por vector).

Se demuestra que:

$$V_1 = V + O(\Delta\tau^2) \quad (5.2.1.2.5)$$

siendo V_1 una aproximación de primer orden de V (ver apartado (5.2.1.5) y referencias [20] y [37]).

Al perseguirse la solución asintótica de (5.2.1.2), es importante tomar $\Delta\tau$ tan grande como sea posible. Sin embargo, al aumentar el $\Delta\tau$ se pierde exactitud en la aproximación de V por V_1 . Esto supone un compromiso entre la rapidez y la existencia de la convergencia.

5.2.1.3.- METODO DE APROXIMACION DE DOS PASOS.

En un esfuerzo por mejorar la aproximación de V realizada en un paso, se propone una aproximación en dos pasos, dada por la expresión siguiente:

$$V \simeq V_2 = \left[\prod_{e=1}^{Nol} V_2^* \right] \left[\prod_{e=Nol}^1 V_2^* \right] \quad (5.2.1.3.1)$$

donde

$$V_2^* = (I + \frac{1}{2}\Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A^* W^{-\frac{1}{2}})^{-1} \quad (5.2.1.3.2)$$

Con esta notación, (5.2.1.12) se transforma en:

$$y_{n+1} - y_n = \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=1}^{Nol} V_2^* \right] \left[\prod_{e=Nol}^1 V_2^* \right] W^{-\frac{1}{2}} r_n \quad (5.2.1.3.3)$$

Este esquema tiene características similares de implementación al de aproximación de un paso, aunque el número de productos de V_2^* se duplica en cada iteración. Sin embargo, este mayor costo computacional es compensado con una aproximación mejor condicionada de V :

$$V_2 = V + O(\Delta\tau^2) \quad (5.2.1.3.4)$$

donde puede comprobarse fácilmente que V_2 es una matriz simétrica definida positiva, con las consiguientes ventajas que de ello se deriva.

5.2.1.4.- ACELERACION MEDIANTE RELAJACION.

La reducción final a cero del residuo en los procesos iterativos de Regularización Parabólica es muy lenta. Los métodos de relajación de Southwell e incluso los de relajación viscosa producen una distribución uniforme de los residuos que suponen un cambio en el Δy igualmente de pequeña magnitud. Sin embargo, es posible acelerar el proceso haciendo periódicamente un ajuste de gran magnitud en la dirección del vector Δy (ver referencia [49]).

En efecto, sea:

$$y_{n+1} = y_n + \omega_n \Delta y_n, \quad \omega_n \in \mathbb{R} \quad (5.2.1.4.1)$$

siendo:

$$\Delta y_n = \Delta \tau (W + \theta \Delta \tau A)^{-1} r_n \quad (5.2.1.4.2)$$

como se puede comprobar en la expresión (5.2.1).

El parámetro de búsqueda ω_n se puede determinar a partir de la minimización del Potencial:

$$P(\omega_n) = \frac{1}{2} \omega_n \Delta y_n^T (r_n + r_{n+1}) \quad (5.2.1.4.3)$$

resultando la ecuación:

$$\Delta y_n^T r_{n+1} = 0 \quad (5.2.1.4.4)$$

en base a ello tenemos,

$$\Delta y_n^T [b - A(y_n + \omega_n \Delta y_n)] = 0 \quad (5.2.1.4.5)$$

y el valor de ω_n resulta,

$$\omega_n = \frac{\Delta y_n^T r_n}{\Delta y_n^T A \Delta y_n} \quad (5.2.1.4.6)$$

Como se observa, el método consiste básicamente en la combinación de dos algoritmos, el de Regularización Parabólica en cualquiera de sus variantes y el de Máximo Descenso. Ambos algoritmos aplicados individualmente tienen una convergencia lenta, por contra la combinación propuesta mejora la rapidez de convergencia considerablemente y mantiene la simplicidad de los algoritmos originales con la posibilidad de operar elemento a elemento.

5.2.1.5.- ESTUDIO DE CONSISTENCIA Y ESTABILIDAD DE LOS METODOS IMPLICITOS.

Para el estudio de la consistencia y estabilidad de los métodos implícitos conviene expresar el esquema (5.2.1.9) de la forma siguiente:

$$y_{n+1} = (W + \Delta\tau A)^{-1} [W y_n + \Delta\tau b]$$

$$y_{n+1} = W^{-\frac{1}{2}} (I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}})^{-1} W^{-\frac{1}{2}} [W y_n + \Delta\tau b] \quad (5.2.1.5.1)$$

Por tanto, utilizando la misma nomenclatura que en (5.2.1.1.2), podemos considerar en general el esquema:

$$F(\Delta\tau)y = W^{-\frac{1}{2}} v W^{-\frac{1}{2}} [W y + \Delta\tau b] + O(\Delta\tau^2) \quad (5.2.1.5.2)$$

En estas condiciones, podemos definir un algoritmo incondicionalmente estable para la ecuación (5.2.1.2) como una familia de funciones de un parámetro $F(\Delta\tau): \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$, $\Delta\tau > 0$, que satisface:

1.- Consistencia:

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0^+} W \frac{F(\Delta\tau)y - y}{\Delta\tau} = b - A y, \quad \forall y \in \mathbb{R}^m \quad (5.2.1.5.3)$$

2.- Estabilidad:

$$\| F(\Delta\tau)y - F(\Delta\tau)z \| \leq \| y - z \|, \quad \forall y, z \in \mathbb{R}^m \quad (5.2.1.5.4)$$

lo que supone una condición más restrictiva que la usual de $\rho[F(\Delta\tau)] \leq 1$ (Condición del radio espectral de $F(\Delta\tau)$), ya que $\rho[F(\Delta\tau)] \leq \| F(\Delta\tau) \|$.

El método de Aproximación de un paso equivale a elegir V de la siguiente forma:

$$F(\Delta\tau)y = W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=1}^{Nel} V_1^* \right] W^{-\frac{1}{2}} [W y + \Delta\tau b] + O(\Delta\tau^2) \quad (5.2.1.5.5)$$

donde V_1^* viene dado por (5.2.1.2.2).

Si ahora desarrollamos $\prod_{e=1}^{Nel} V_1^*$ despreciando términos de $O(\Delta\tau^2)$ queda:

$$\prod_{e=1}^{Nel} V_1^* = \left[\prod_{e=Nel}^1 [V_1^*]^{-1} \right]^{-1} = \left[\prod_{e=Nel}^1 (I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A^* W^{-\frac{1}{2}}) \right]^{-1}$$

Procediendo por inducción en el cálculo de este producto se obtiene que:

$$\begin{aligned} \prod_{e=1}^{Nel} V_1^* &= \left[I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} \sum_{e=1}^{Nel} A^* W^{-\frac{1}{2}} \right]^{-1} + O(\Delta\tau^2) = \\ &= (I - \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}}) + O(\Delta\tau^2) = V + O(\Delta\tau^2) \end{aligned}$$

Aplicando la definición de consistencia dada en (5.2.1.5.3) y sustituyendo el valor obtenido:

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0^+} W \frac{F(\Delta\tau)y - y}{\Delta\tau} = \\ & = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0^+} W \frac{W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{i=1}^{N+1} V_i^{\circ} \right] W^{-\frac{1}{2}} [W y + \Delta\tau b] + O(\Delta\tau^2) - y}{\Delta\tau} = \\ & = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0^+} W \frac{W^{-\frac{1}{2}} (I - \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}}) W^{-\frac{1}{2}} [W y + \Delta\tau b] + O(\Delta\tau^2) - y}{\Delta\tau} = \\ & = b - A y \end{aligned}$$

siendo el método consistente con $O(\Delta\tau^2)$.

Veamos que también es incondicionalmente estable si lo es el algoritmo elemental, es decir si se verifica:

$$\| W^{-\frac{1}{2}} V_1^{\circ} W^{\frac{1}{2}} \| \leq 1 \quad (5.2.1.5.6)$$

Partiendo de la definición (5.2.1.5.4), $\forall y, z \in \mathbb{R}^m$, $\Delta\tau > 0$, se tiene,

$$\begin{aligned}
& \| F(\Delta\tau)y - F(\Delta\tau)z \| = \\
& = \left\| W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=1}^{Nel} V_1^e \right] W^{-\frac{1}{2}} (W y + \Delta\tau b) - W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=1}^{Nel} V_1^e \right] W^{-\frac{1}{2}} (W z + \Delta\tau b) \right\| = \\
& = \left\| W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=1}^{Nel} V_1^e \right] W^{\frac{1}{2}} (y - z) \right\| \leq \left\| W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=2}^{Nel} V_1^e \right] W^{\frac{1}{2}} (y - z) \right\|
\end{aligned}$$

Procediendo por inducción se llega a:

$$\| F(\Delta\tau)y - F(\Delta\tau)z \| \leq \| y - z \|$$

lo que prueba la estabilidad incondicional del esquema de aproximación de un paso cuando lo es el elemental. Si la matriz del sistema es simétrica definida positiva se asegura la condición (5.2.1.5.6). No obstante, para matrices no simétricas pueden aparecer problemas de estabilidad para valores propios complejos de la matriz:

$$W^{-\frac{1}{2}} V_1^e W^{\frac{1}{2}} = I + \Delta\tau W^{-1} A^e$$

Si la aproximación de V se realiza en dos pasos, la expresión (5.2.1.5.2) se transforma en,

$$F(\Delta\tau)y = W^{-\frac{1}{2}} \left[\prod_{e=1}^{Nel} V_2^e \right] \left[\prod_{e=Nel}^1 V_2^e \right] W^{-\frac{1}{2}} [W y + \Delta\tau b] + O(\Delta\tau^2) \tag{5.2.1.5.7}$$

donde:

$$V_2^{\circ} = \left(I + \frac{\Delta\tau}{2} W^{-\frac{1}{2}} A^{\circ} W^{-\frac{1}{2}} \right)^{-1}$$

Desarrollando los productos por inducción:

$$\begin{aligned} \left[\prod_{e=1}^{N_{el}} V_2^{\circ} \right] \left[\prod_{e=N_{el}}^1 V_2^{\circ} \right] &= \left[\prod_{e=1}^{N_{el}} (V_2^{\circ})^{-1} \prod_{e=N_{el}}^1 (V_2^{\circ})^{-1} \right]^{-1} = \\ &= \left[I + \frac{\Delta\tau}{2} W^{-\frac{1}{2}} \sum_{e=1}^{N_{el}} A^{\circ} W^{-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta\tau}{2} W^{-\frac{1}{2}} \sum_{e=N_{el}}^1 A^{\circ} W^{-\frac{1}{2}} \right]^{-1} + O(\Delta\tau^2) = \\ &= \left(I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}} \right) + O(\Delta\tau^2) = \\ &= \left(I - \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}} \right) + O(\Delta\tau^2) = V + O(\Delta\tau^2) \end{aligned}$$

Siguiendo el mismo proceso que en el caso anterior llegamos a plantear,

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0^+} W \frac{F(\Delta\tau)y - y}{\Delta\tau} = b - A y$$

y el método es consistente con W y A , cometiéndose un error de $O(\Delta\tau^2)$. La propiedad de conservación de la estabilidad incondicional del método se puede demostrar fácilmente siguiendo la misma metodología que en el caso anterior.

5.2.2.- METODOS DE GRADIENTE CONJUGADO.

El método del Gradiente Conjugado analizado en (5.1.1) es válido sólo para matrices simétricas y definidas positivas.

La generalización del método a una matriz cualquiera está limitada por la condición:

$$p_n^T A p_n \neq 0 \quad (5.2.2.1)$$

que es necesaria para el cálculo de β_n . Es decir, el algoritmo degenera si la matriz es indefinida.

Con esta condición, en [28] se establecen diferentes métodos basados en el algoritmo del Gradiente Conjugado, como lo son el método de la Ecuación Normal, el de Error Mínimo, el de Residuo Mínimo y el de Doble Gradiente Conjugado. Estos métodos sólo implican pequeñas variaciones en el algoritmo original y los proponemos adaptados elemento a elemento.

5.2.2.1.- METODO DE LA ECUACION NORMAL.

Sea el caso general de la matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$, no singular. Una primera idea para conseguir que la matriz del sistema sea simétrica es plantear el sistema:

$$Ax = b, \quad x, b \in \mathbb{R}^m \quad (5.2.2.1.1)$$

de otra forma equivalente, estableciendo:

$$A^T Ax = A^T b \quad (5.2.2.1.2)$$

denominada Ecuación Normal. Este problema corresponde al de minimización de la funcional:

$$J(v) = \frac{1}{2} (b - Av)^T (A^T A)^{-1} (b - Av) \quad (5.2.2.1.3)$$

Por tanto, se puede aplicar el método del Gradiente Conjugado a la Ecuación Normal, realizando una ligera modificación que evite operar explícitamente con la matriz $A^T A$.

A partir de la relación de conjugación:

$$P_{n+1}^T (A^T A) P_n = 0 \quad (5.2.2.1.4)$$

se obtiene:

$$\beta_{n+1} = \frac{(A^T r_{n+1})^T (A^T r_{n+1})}{(A^T r_n)^T (A^T r_n)} \quad (5.2.2.1.5)$$

y de la minimización de $J(v)$:

$$\alpha_n = \frac{(A^T r_n)^T (A^T r_n)}{(A p_n)^T (A p_n)} \quad (5.2.2.1.6)$$

$$\beta_{n+1}, \alpha_n \in \mathbb{R}^m.$$

En estas condiciones, el algoritmo del método de la Ecuación Normal resulta estructurado del modo que a continuación se detalla:

ALGORITMO DEL GRADIENTE CONJUGADO

ECUACION NORMAL

Primer paso: Inicialización.

$$n = 0$$

$$r_0 = b - Ax_0$$

$$p_0 = A^T r_0$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo.

$$\alpha_n = \frac{(A^T r_n)^T (A^T r_n)}{(A p_n)^T (A p_n)}$$

$$x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n$$

$$r_{n+1} = r_n - \alpha_n A p_n$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\text{¿ } \|r_{n+1}\| < \delta \|r_0\| \text{ ?}$$

si: detener el proceso.

no: continuar.

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$\beta_{n+1} = \frac{(A^T r_{n+1})^T (A^T r_{n+1})}{(A^T r_n)^T (A^T r_n)}$$

$$p_{n+1} = A^T r_{n+1} + \beta_{n+1} p_n$$

volver al segundo paso.

Al ser un algoritmo de Gradiente Conjugado converge, como máximo, en m iteraciones a la solución exacta si no existen errores de redondeo.

En la práctica, el algoritmo presenta algunos inconvenientes: es necesario calcular dos productos de matriz por vector, lo que aumenta considerablemente el número de operaciones a realizar; la efectividad del algoritmo disminuye con el mal condicionamiento de la matriz $A^T A$;

$$k(A^T A) = [k(A)]^2 \quad (5.2.2.1.3)$$

Por otro lado, algunos sistemas se comportan mal con esta transformación. Puede suceder que debido a errores dados por la precisión del ordenador, la matriz A representada sea no singular, pero la matriz $A^T A$ calculada sí sea singular, o al menos, esté muy cerca de serlo, dando lugar evidentemente a resultados poco fiables.

5.2.2.2.- METODO DEL ERROR MINIMO.

Kershaw [29] propone una idea basada en la descrita anteriormente para la Ecuación Normal. Para resolver (5.2.2.1.1) introduce el vector y mediante la relación:

$$x = A^T y \quad (5.2.2.2.1)$$

Aplicando el método del Gradiente Conjugado a la resolución del sistema:

$$AA^T y = b \quad (5.2.2.2.2)$$

se obtiene el algoritmo denominado del Error Mínimo, ya que corresponde a la minimización de la funcional:

$$F(x_n) = \|x - x_n\|^2 \quad (5.2.2.2.3)$$

El parámetro β_{n+1} se obtiene de la relación de conjugación:

$$P_{n+1}^T P_n = 0 \quad (5.2.2.2.4)$$

de donde:

$$\beta_{n+1} = \frac{r_{n+1}^T r_{n+1}}{r_n^T r_n} \quad (5.2.2.2.5)$$

Por otro lado α_n resulta de la minimización de la funcional:

$$J(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{v})^T (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{v}) \quad (5.2.2.2.6)$$

resultando:

$$\alpha_n = \frac{\mathbf{r}_n^T \mathbf{r}_n}{\mathbf{p}_n^T \mathbf{p}_n} \quad (5.2.2.2.7)$$

El algoritmo del método del Error Mínimo basado en estos resultados, presenta los mismos inconvenientes que el de la Ecuación Normal y su desarrollo se expone a continuación:

ALGORITMO DEL GRADIENTE CONJUGADO

ERROR MINIMO

Primer paso: Inicialización.

$$n = 0$$

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{A}^T \mathbf{r}_0$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo.

$$\alpha_n = \frac{\mathbf{r}_n^T \mathbf{r}_n}{\mathbf{p}_n^T \mathbf{p}_n}$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \alpha_n \mathbf{p}_n$$

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n - \alpha_n \mathbf{A} \mathbf{p}_n$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\text{¿ } \|\mathbf{r}_{n+1}\| < \delta \|\mathbf{r}_0\| \text{ ?}$$

si: detener el proceso.

no: continuar.

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$\beta_{n+1} = \frac{\mathbf{r}_{n+1}^T \mathbf{r}_{n+1}}{\mathbf{r}_n^T \mathbf{r}_n}$$

$$\mathbf{p}_{n+1} = \mathbf{A}^T \mathbf{r}_{n+1} + \beta_{n+1} \mathbf{p}_n$$

volver al segundo paso.

5.2.2.3.- METODO DEL RESIDUO MINIMO.

Cuando la matriz del sistema $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ no es simétrica definida positiva, la funcional:

$$J(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} (\mathbf{b} - A\mathbf{v})^T A^{-1} (\mathbf{b} - A\mathbf{v}) \quad (5.2.2.3.1)$$

no es convexa. En su lugar, se puede aplicar la técnica de minimización a la funcional:

$$J(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} (\mathbf{b} - A\mathbf{v})^T (\mathbf{b} - A\mathbf{v}) \quad (5.2.2.3.2)$$

que si lo es.

Se considerará la misma relación de conjugación que en el método de la Ecuación Normal:

$$\mathbf{p}_{n+1}^T (A^T A) \mathbf{p}_n = 0 \quad (5.2.2.3.3)$$

de la que se obtiene el siguiente valor para β_{n+1} :

$$\beta_{n+1} = - \frac{(\mathbf{A} \mathbf{r}_{n+1})^T (\mathbf{A} \mathbf{p}_n)}{(\mathbf{A} \mathbf{p}_n)^T (\mathbf{A} \mathbf{p}_n)} \quad (5.2.2.3.4)$$

El valor de α_n que se obtiene de la minimización de (5.2.2.3.2) es:

$$\alpha_n = \frac{(A^T r_n)^T (A^T r_n)}{(A p_n)^T (A p_n)} \quad (5.2.2.3.5)$$

Conocidas la expresiones de β_{n+1} y de α_n podemos establecer el algoritmo del método del Residuo Mínimo.

ALGORITMO DEL GRADIENTE CONJUGADO RESIDUO MINIMO

Primer paso: Inicialización.

$$\begin{aligned} n &= 0 \\ r_0 &= b - Ax_0 \\ p_0 &= r_0 \\ z_0 &= A p_0 \end{aligned}$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo.

$$\alpha_n = \frac{\mathbf{r}_n^T \mathbf{z}_n}{\mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_n}$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \alpha_n \mathbf{p}_n$$

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n - \alpha_n \mathbf{z}_n$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\text{¿ } \|\mathbf{r}_{n+1}\| < \delta \|\mathbf{r}_0\| \text{ ?}$$

si: detener el proceso.

no: continuar.

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$\beta_{n+1} = - \frac{(\mathbf{A} \mathbf{r}_{n+1})^T \mathbf{z}_n}{\mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_n}$$

$$\mathbf{p}_{n+1} = \mathbf{r}_{n+1} + \beta_{n+1} \mathbf{p}_n$$

$$\mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{A} \mathbf{r}_{n+1} + \beta_{n+1} \mathbf{z}_n$$

volver al segundo paso.

Nótese que se ha almacenado en z_n el producto $A p_n$ para no volver a calcularlo en la misma iteración, superando en este contexto al método de la Ecuación Normal, en el que se necesitaba calcular los productos $A p_n$ y $A^T r_n$ en cada iteración.

Axelsson [3] demuestra que este algoritmo converge si A es simétrica semidefinida positiva, o si la parte simétrica de A es definida positiva. Pero en la práctica, el algoritmo no puede degenerar excepto si r_{n+1} y p_n están alineados. En este caso sería necesario analizar el ángulo entre las direcciones de r_{n+1} y p_n , y adaptar un procedimiento de corrección que superase este problema cuando dicho ángulo fuera muy pequeño.

Los test numéricos realizados por *Axelsson* muestran que este método es más efectivo en cuanto a sus resultados que el de la Ecuación Normal y el del Error Mínimo, ya que no modifica el número de condicionamiento del sistema original.

5.2.2.4.- METODO DEL DOBLE GRADIENTE CONJUGADO.

Sea $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ una matriz no singular, en general no simétrica. Se define el sistema:

$$C \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix} \quad (5.2.2.4.1)$$

siendo C :

$$C = \begin{bmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \quad y \quad x, y, b \in \mathbb{R}^m \quad (5.2.2.4.2)$$

donde $C \in \mathbb{R}^{2m \times 2m}$ es una matriz simétrica no singular.

Sea $F(\mathbf{R})$ la funcional cuadrática definida por:

$$F(\mathbf{R}) = \mathbf{R}^T C^{-1} \mathbf{R} = \bar{\mathbf{r}}^T A^{-1} \mathbf{r} + \mathbf{r}^T (A^T)^{-1} \bar{\mathbf{r}} \quad (5.2.2.4.3)$$

$$\text{siendo} \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \bar{\mathbf{r}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} - A \mathbf{v} \\ \mathbf{b} - A^T \mathbf{v} \end{bmatrix} \quad (5.2.2.4.4)$$

Poniendo $F(\mathbf{R})$ en función de \mathbf{v} , resulta:

$$J(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T (A + A^T) \mathbf{v} - 4 \mathbf{b}^T \mathbf{v} + \mathbf{b}^T [A^{-1} + (A^T)^{-1}] \mathbf{b} \quad (5.2.2.4.5)$$

La funcional $J(\mathbf{v})$ es convexa si la parte simétrica de A es definida positiva. En este caso, se puede aplicar el método del Gradiente Conjugado para resolver el problema de minimización de $J(\mathbf{v})$, equivalente a la resolución del sistema $A \mathbf{x} = \mathbf{b}$. Utilizando la misma relación de conjugación que para el método clásico y minimizando $J(\mathbf{v})$ se obtienen los valores de β_{n+1} y α_n respectivamente, con lo que se está en disposición de establecer el algoritmo del Doble Gradiente Conjugado:

ALGORITMO DEL DOBLE GRADIENTE CONJUGADO

Primer paso: Inicialización.

$$n = 0$$

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{p}_0 = \bar{\mathbf{p}}_0 = \bar{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{r}_0$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo.

$$\alpha_n = \frac{\bar{r}_n^T r_n}{\bar{p}_n^T A p_n}$$

$$x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n$$

$$r_{n+1} = r_n - \alpha_n A p_n$$

$$\bar{r}_{n+1} = \bar{r}_n - \alpha_n A^T \bar{p}_n$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\text{¿ } \|r_{n+1}\| < \delta \|r_0\| \text{ ?}$$

si: detener el proceso.

no: continuar.

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$\beta_{n+1} = \frac{\bar{r}_{n+1}^T r_{n+1}}{\bar{r}_n^T r_n}$$

$$p_{n+1} = r_{n+1} + \beta_{n+1} p_n$$

$$\bar{p}_{n+1} = \bar{r}_{n+1} + \beta_{n+1} \bar{p}_n$$

volver al segundo paso.

El algoritmo converge a la solución del sistema $A x = b$, alcanzando el valor exacto de x cuando $r = 0$, siendo en general $\bar{r} \neq 0$ (excepto en el caso de que A sea simétrica, resultando este algoritmo idéntico al del Gradiente Conjugado Clásico).

El inconveniente de este método está en la necesidad de almacenar un mayor número de vectores que en los métodos anteriores, y en el cálculo de dos productos de matriz por vector en cada iteración. Pero el método no destruye el condicionamiento del sistema original ya que

$k(C) = k(A)$, lo cual es una propiedad de sumo interés.

La eficacia de este método ha sido comprobada en los ensayos numéricos de *Wong* [47]. Así mismo, en *Jacobs* [26] se puede encontrar una generalización del método al caso de sistemas lineales con coeficientes complejos.

6. - APLICACIONES A PROBLEMAS LINEALES.

6.1.- PROBLEMAS SIMETRICOS.

Se considerarán en este capítulo dos problemas frecuentes en Ingeniería, el problema de Elasticidad Plana y el de Transmisión de Calor lineal.

En ambos, la dificultad de encontrar una solución satisfactoria estará definida por la existencia de una singularidad. En el problema de Elasticidad Plana ésta vendrá dada por una fractura en el dominio de estudio. El problema consistirá en calcular los desplazamientos (problema con dos grados de libertad) de cada punto del dominio al someterlo a unas condiciones de contorno. Para ello aplicaremos el método de elementos finitos adaptativo que implicará la resolución de un sistema de ecuaciones simétrico en cada etapa de refinamiento.

En cambio, la singularidad en el problema de Transmisión de Calor aparece por la existencia de dos materiales de características muy diferentes, originándose gradientes altos de temperaturas. Igualmente , al tratar este problema mediante el método de elementos finitos adaptativo, se obtiene un sistema de ecuaciones simétrico en cada etapa de refinamiento, donde las incógnitas representan

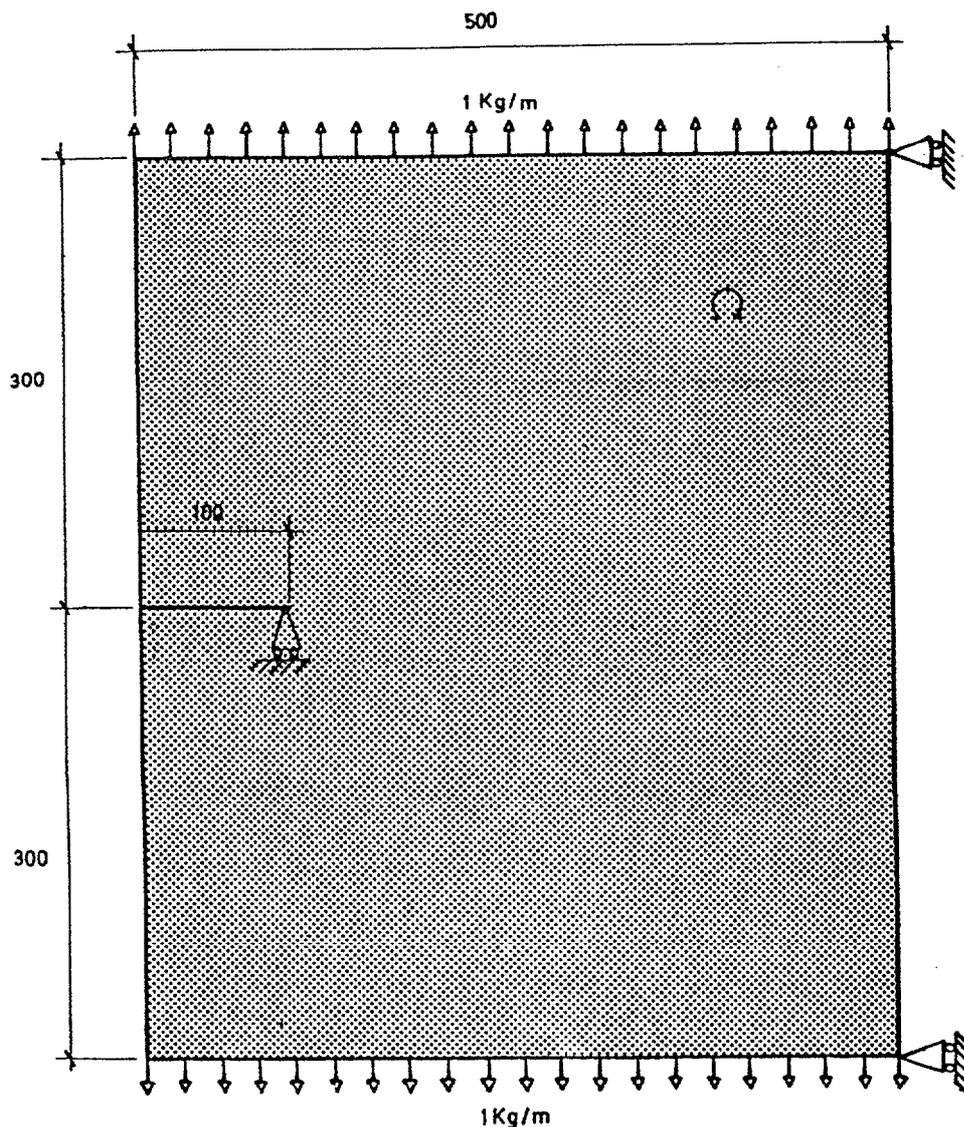
la temperatura en cada punto del dominio (problema con un grado de libertad).

El objetivo principal de estas dos aplicaciones es comparar los diferentes preconditionadores que se han propuesto para el método del Gradiente Conjugado, cuando forma parte de un proceso autoadaptativo, y sacar así conclusiones sobre la utilización más adecuada de cada uno, dependiendo de cuestiones como el número de condicionamiento de la matriz del sistema, orden del sistema, número de etapas de refinamiento o tolerancia exigida del error.

Por otro lado, se aplicará el método Multimalla, utilizando como suavizado el método del Gradiente Conjugado con preconditionador Diagonal.

6.1.1.- PROBLEMA DE ELASTICIDAD PLANA.

Sea una placa rectangular de $500 \times 600 \text{ cm}^2$ con una fractura de 100 cm situada transversalmente en la mitad de uno los lados mayores. Supongámosla sometida a tracción por una fuerza de 1 kg/m uniformemente distribuida en los lados menores. Se considerará el módulo de Young $E = 2 \cdot 10^4 \text{ kg/m}^2$ y el coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$. Se supondrá también que las fuerzas de volumen son nulas.



Formulación clásica del problema.

El cuerpo está definido en un dominio acotado $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ y lo supondremos fijo en una parte Γ_0 de su contorno Γ , de medida no nula en \mathbb{R} ; en la parte complementaria de Γ_0 supondremos que se ejercen unas fuerzas $g = (g_1, g_2) \in [\mathbb{L}^2(\Gamma)]^2$ y en Ω unas fuerzas distribuidas $f = (f_1, f_2) \in [\mathbb{L}^2(\Omega)]^2$, que en nuestras aplicaciones consideraremos nulas.

Debido a la acción de las fuerzas exteriores f y g el cuerpo se deforma y cada punto sufre un desplazamiento $u = (u_1, u_2)$. Al deformarse, se generan en el cuerpo unas tensiones elásticas que representamos por $\sigma_{ij}(u)$ hasta que se logra un equilibrio con las fuerzas exteriores.

Las ecuaciones que rigen éste fenómeno físico se estudian en la Teoría de la Elasticidad (ver *Landau y Lifshitz* [30]). Partiendo de ésta, la formulación clásica se establece de la siguiente forma:

"Hallar los desplazamientos $u = (u_1, u_2)$ tal que:

$$\sum_{j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(u) = f_i \quad \text{en } \Omega \quad i = 1, 2 \quad (6.1.1.1)$$

$$u_i = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_0 \quad i = 1, 2 \quad (6.1.1.2)$$

$$\sum_{j=1}^2 \frac{\partial}{\partial n} \sigma_{ij}(\mathbf{u}) = g_i \quad \text{en } \Gamma_1 \quad i = 1, 2 \quad (6.1.1.3)$$

donde aplicando la ley de Hooke:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^2 e_{ijkl} \epsilon_{kl}(\mathbf{u}) \quad (6.1.1.4)$$

siendo:

$$\epsilon_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \quad (6.1.1.5)$$

el tensor de deformaciones".

Formulación variacional del problema.

Consideremos un espacio $[H^1(\Omega)]^2$ y el siguiente subespacio $V = \left\{ \mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^2, v_i = 0 \text{ sobre } \Gamma_0 \quad i = 1, 2 \right\}$ llamado espacio de los desplazamientos admisibles (virtuales); sea $\mathbf{v} \in V$ cualquiera y multipliquemos (6.1.1.1) escalarmente por \mathbf{v} . Integrando:

$$\int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} v_i \, dx_1 dx_2 = \int_{\Omega} f_i v_i \, dx_1 dx_2 \quad (6.1.1.6)$$

Aplicando la fórmula de Green resulta:

$$\int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^2 \sigma_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{v}) \, dx_1 dx_2 = \int_{\Gamma_1} \sum_{i=1}^2 g_i v_i \, d\sigma +$$

$$+ \int_{\Omega} \sum_{i=1}^2 f_i v_i \, dx_1 dx_2 \quad (6.1.1.7)$$

donde se ha tenido en cuenta la expresión (6.1.1.3) y además que:

$$\sum_{i,j=1}^2 \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \sum_{i,j=1}^2 \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$$

debido a la simetría de σ_{ij} y ε_{ij} , y donde en Γ_1 se ha considerado la influencia de Γ_1^i ($i = 1, 2$).

A la expresión (6.1.1.7) hay que añadir las expresiones (6.1.1.2), (6.1.1.4) y (6.1.1.5) para obtener la formulación completa.

Cálculo de las matrices elementales.

La matriz elemental de rigidez es dada por:

$$\int_{\Omega} \begin{bmatrix} D\psi^{\circ} & 0 \\ 0 & D\psi^{\circ} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D\psi^{\circ} & 0 \\ 0 & D\psi^{\circ} \end{bmatrix} dx_1 dx_2 \quad (6.1.1.8)$$

siendo:

$$\begin{bmatrix} D\psi^{\circ} & 0 \\ 0 & D\psi^{\circ} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \psi_1^{\circ}}{\partial x_1} & \frac{\partial \psi_2^{\circ}}{\partial x_1} & \frac{\partial \psi_3^{\circ}}{\partial x_1} & 0 \\ \frac{\partial \psi_1^{\circ}}{\partial x_2} & \frac{\partial \psi_2^{\circ}}{\partial x_2} & \frac{\partial \psi_3^{\circ}}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \psi_1^{\circ}}{\partial x_1} & \frac{\partial \psi_2^{\circ}}{\partial x_1} & \frac{\partial \psi_3^{\circ}}{\partial x_1} & 0 \\ \frac{\partial \psi_1^{\circ}}{\partial x_2} & \frac{\partial \psi_2^{\circ}}{\partial x_2} & \frac{\partial \psi_3^{\circ}}{\partial x_2} & 0 \end{bmatrix}$$

y

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi + 2\mu & 0 & | & 0 & \xi \\ 0 & \mu & | & \mu & 0 \\ -0 & -\mu & | & -\mu & -0 \\ \xi & 0 & | & 0 & \xi + 2\mu \end{bmatrix}$$

con $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ y $\xi = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$

donde se observa que efectivamente se trata de un problema simétrico.

Para la resolución del problema mediante el programa NEPTUNO [11], hemos partido de un mallado de 5 elementos con un total de 7 nodos y 11 caras. Se ha realizado a continuación 4 procesos de refinamiento automático de la malla, es decir, dividir cada elemento en 4 nuevos repitiendo el proceso 4 veces. Con esto se obtiene una malla más fina que da lugar a un sistema de 1376 ecuaciones. Cuando se ha resuelto este sistema se ha aplicado 7 iteraciones de refinamiento aplicando el método de elementos finitos adaptativo con coeficiente de refinamiento de 0.9 (ver *Montenegro* [32]). La tolerancia que se ha exigido a la solución de cada sistema es 10^{-8} , ya que de su exactitud depende la fiabilidad de la estrategia de refinamiento llevada a cabo.

En la tabla (6.1.1.a) se presentan los resultados numéricos obtenidos para el método del Gradiente Conjugado con los diferentes preconditionadores utilizados. Para cada sistema (el resultante de cada proceso de refinamiento) se muestra el número de iteraciones realizadas por el método, el tiempo de CPU empleado en segundos y la memoria ocupada en cada caso. En las figuras (6.1.1.b) y (6.1.1.c) se comparan de forma gráfica estas dos últimas variables para cada método respectivamente. En la figura (6.1.1.d) se representan las deformaciones obtenidas en la placa a una escala ampliada. El tratamiento gráfico se ha realizado mediante un TEKTRONIX 4111.

TIPO DE PRECONDICIONADOR	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
DIAGONAL	1376	273	1219	47635
	1392	262	1177	48219
	1414	259	1186	49022
	1480	267	1282	51375
	1542	261	1307	53582
	1566	259	1327	54458
	1628	420	2228	56721
	1682	428	2339	58636
CHOLESKY	1376	199	2129	74515
	1392	183	1976	75435
	1414	183	2007	76700
	1480	189	2169	80397
	1542	188	2246	83864
	1566	185	2250	85244
	1628	191	2415	88809
	1682	197	2571	91816
CROUT	1376	200	2179	74515
	1392	184	2015	75435
	1414	184	2048	76700
	1480	190	2215	80397
	1542	187	2274	83864
	1566	186	2304	85244
	1628	190	2454	88809
	1682	199	2650	91816

Tabla 6.1.1.a

Figura 6.1.1.b

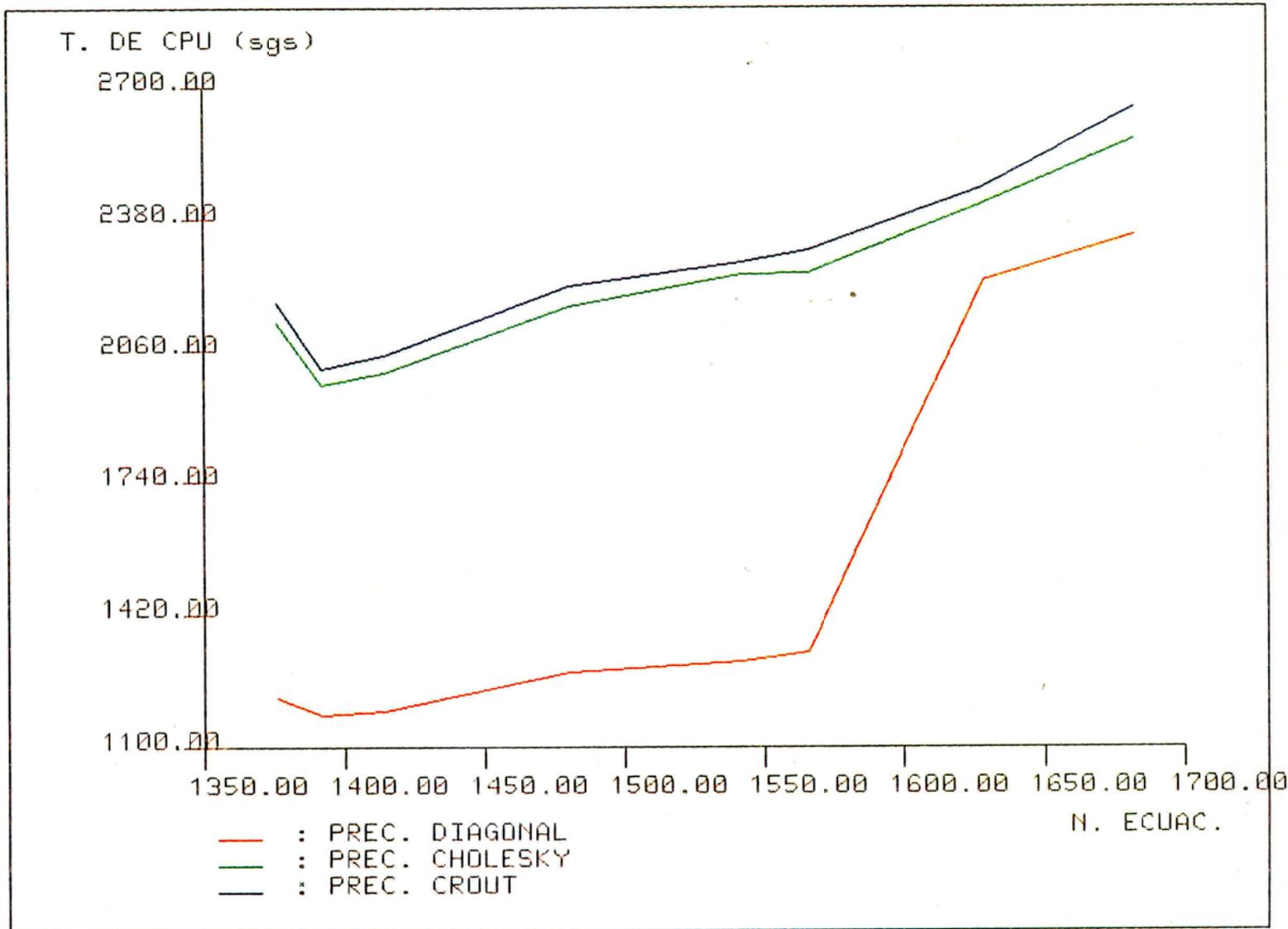
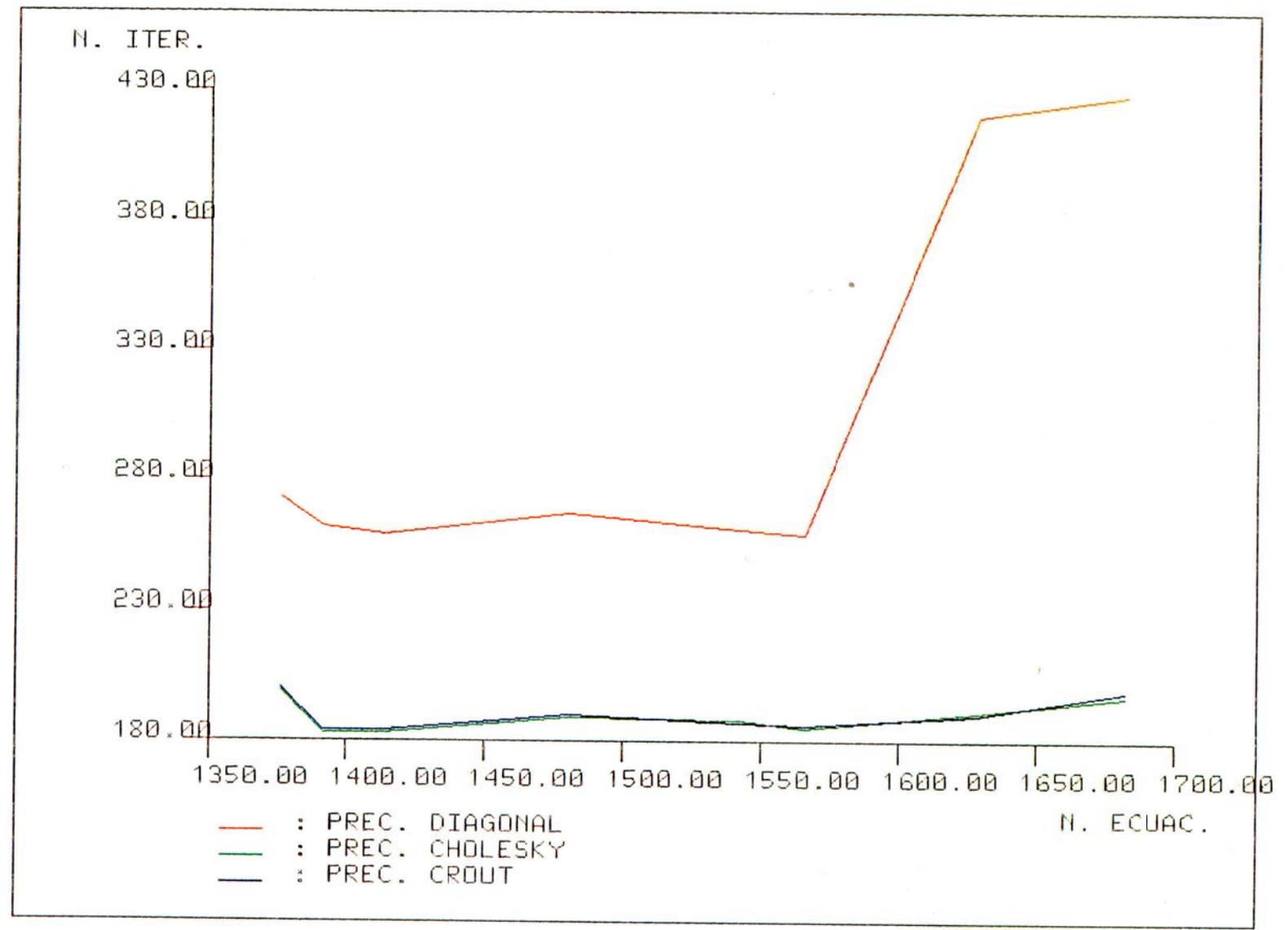
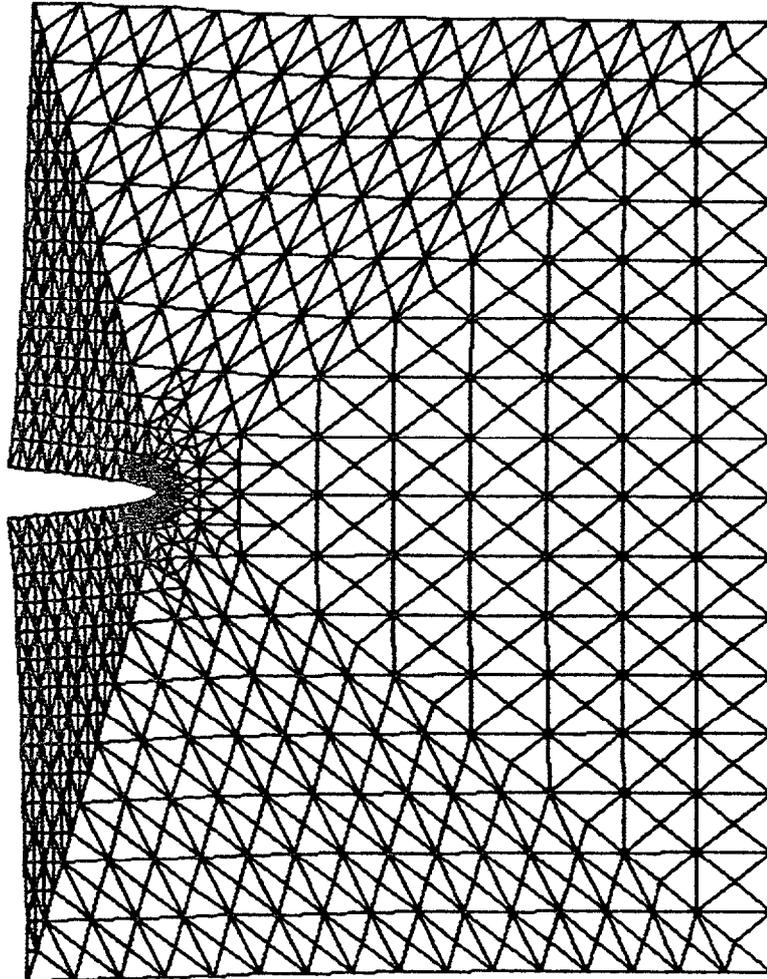


Figura 6.1.1.c





PROBLEMA DE ELASTICIDAD PLANA
PLACA DEFORMADA

Figura 6.1.1.c

Para el estudio de la efectividad del método Multimalla en sistemas simétricos, resolvemos este problema de Elasticidad Plana con otra estrategia de refinamiento.

Se han realizado 3 refinamientos automáticos, dando lugar a una malla inicial de 55 nodos, que con dos grados de libertad suponen 104 ecuaciones después de introducir las condiciones de contorno. Luego se han aplicado cinco etapas de refinamiento adaptativo con un coeficiente de 0.2. La tolerancia exigida a la solución ha sido 10^{-6} .

Los resultados se muestran en la tabla 6.1.1.d:

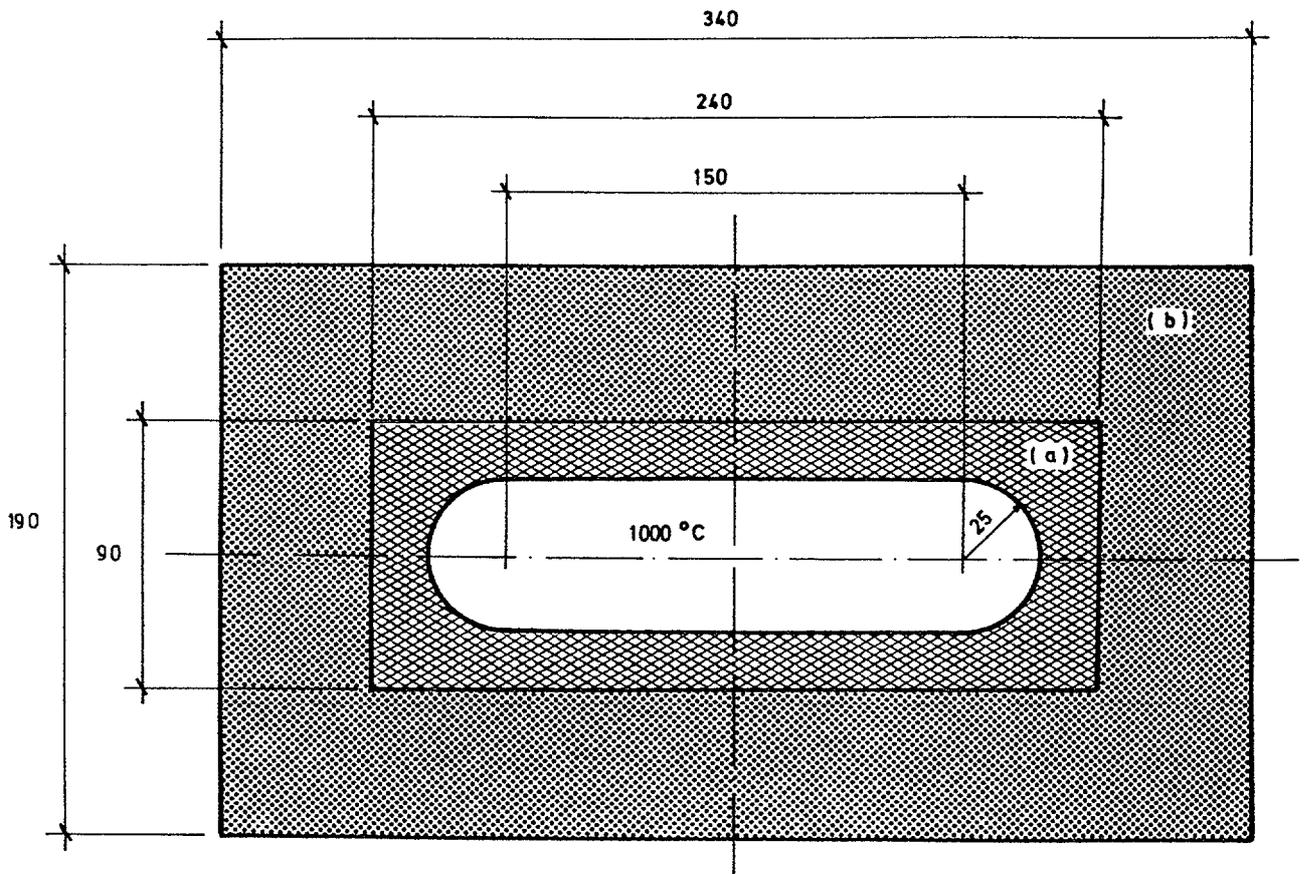
TIPO DE PRECONDICIONADOR	N ^o DE ECUAC.	N ^o DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
MULTIMALLA + G. C. P. D.	104	12	29	4623
	190	12	72	9253
	346	13	171	17705
	646	12	317	34281
	926	12	545	50099
G. C. P. D.	104	49	14	3157
	190	67	40	6184
	346	147	164	11598
	646	181	389	22122
	926	210	658	32174

Tabla 6.1.1.d

6.1.2.- PROBLEMA DE TRANSMISION DE CALOR LINEAL.

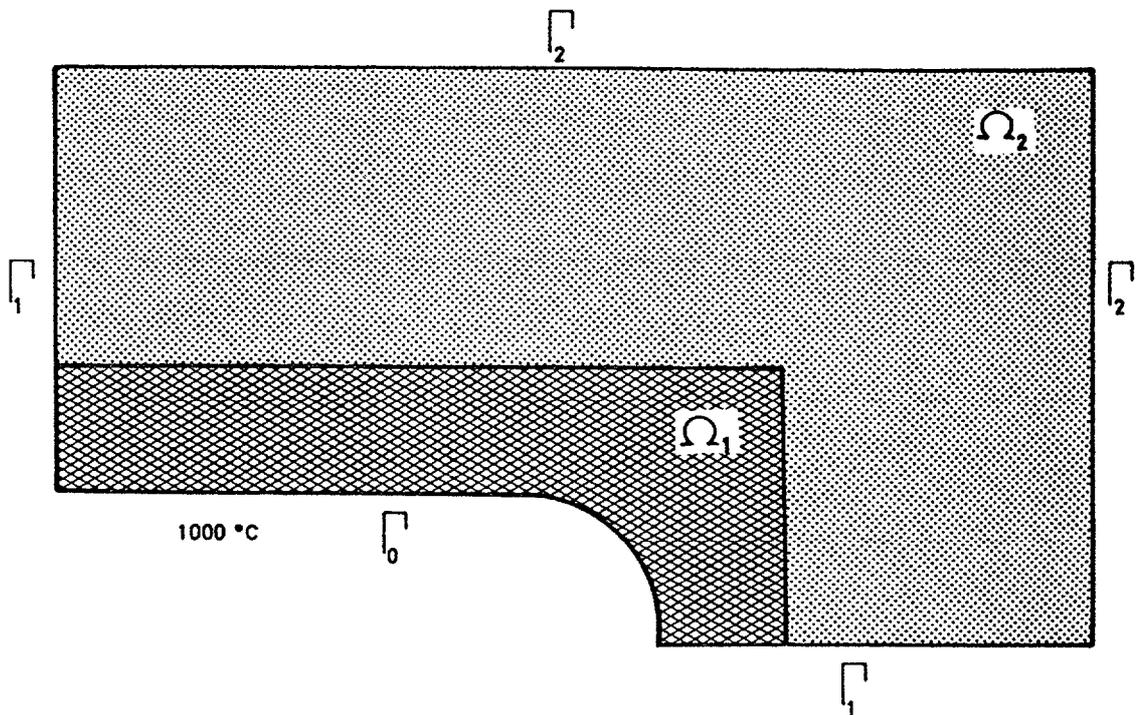
En este caso se considerará el estudio de la distribución de temperaturas en las paredes de un horno compuesto de dos materiales diferentes (la parte interna (a) de material refractario y la parte externa (b) de un material aislante adecuado) en régimen estacionario.

Las dimensiones del horno vienen dadas en centímetros en la siguiente figura:



La temperatura en el interior del horno es de 1000°C y se impone un flujo de calor en la pared exterior de 720 KJ/h m , siendo el coeficiente de convección de la misma de $36 \text{ KJ/h m }^{\circ}\text{C}$. La conductividad del material (a) es de $72 \text{ KJ/hm}^{\circ}\text{C}$ y la de (b) $0.01 \text{ KJ/hm}^{\circ}\text{C}$.

Debido a la simetría basta estudiar una cuarta parte de la sección del horno:



Formulación clásica del problema.

Sea $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ el dominio en estudio y Γ_i ($i=0,1,2$) distintas partes del contorno. La temperatura $u(x_1, x_2)$ verificará las siguientes ecuaciones:

$$-k \Delta u = f = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (6.1.2.1)$$

$$k \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_1 \quad (6.1.2.2)$$

$$-k \frac{\partial u}{\partial n} = h (u - u_\infty) \quad \text{sobre } \Gamma_2 \quad (6.1.2.3)$$

$$u = \bar{u}(x_1, x_2) \quad \text{sobre } \Gamma_0 \quad (6.1.2.4)$$

donde:

k es la conductividad térmica, k_a en (a) y k_b en (b).

f son las fuentes volumétricas de calor.

h es el coeficiente de convección en Γ_2 .

u_∞ es la temperatura exterior a la adherencia de Ω .

Formulación variacional del problema.

Sea v una función test perteneciente al espacio V donde:

$$V = \{ v \in H^1(\Omega) / v|_{\Gamma_0} = 0 \}$$

y multipliquemos la expresión la ecuación diferencial que gobierna el proceso de transmisión de calor por v e integremos en Ω :

$$-k \int_{\Omega} \Delta u v \, dx_1 dx_2 = \int_{\Omega} f v \, dx_1 dx_2 \quad (6.1.2.5)$$

Aplicando la fórmula de Green e incorporando las condiciones de flujo impuesto, obtenemos la formulación variacional del problema:

" Hallar $u \in H^1(\Omega)$, $u = \bar{u}(x_1, x_2)$ en Γ_0 , tal que

$$k \int_{\Omega} \vec{\nabla} u \cdot \vec{\nabla} v \, dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u v \, d\sigma = \int_{\Omega} f v \, dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u_{\infty} v \, d\sigma \quad (6.1.2.6)$$

Cálculo de las matrices elementales.

Llamando ψ_i° ($i=1,2,3$) a las funciones de forma en el elemento Ω_{\circ} (se utilizan elementos triangulares), el valor

de u en el elemento, según la técnica de los elementos finitos, vendrá dado por:

$$u|_{\Omega_e} = \sum_{i=1}^s \psi_i^{\circ} u_i^{\circ} \quad (6.1.2.7)$$

donde u_i° representa los valores de u en los nodos de Ω_e . Introduciendo las expresiones (6.1.2.7) en (6.1.2.6) se obtiene un sistema elemental de la forma:

$$\sum_{j=1}^s A_{ij}^{\circ} u_j^{\circ} = b_i^{\circ}$$

A continuación se refleja la contribución de cada una de las integrales:

$$k \int_{\Omega_e} \vec{\nabla} u \cdot \vec{\nabla} v \, dx_1 dx_2 \longrightarrow K^{\circ}$$

cuyo término general es:

$$K_{ij}^{\circ} = k \int_{\Omega_e} \left[\frac{\partial \psi_i^{\circ}}{\partial x_1} \frac{\partial \psi_j^{\circ}}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi_i^{\circ}}{\partial x_2} \frac{\partial \psi_j^{\circ}}{\partial x_2} \right] dx_1 dx_2 \quad (6.1.2.8)$$

y sobre Γ_2 :

$$\int_{\Gamma_2^e} h u v d\sigma \longrightarrow \Lambda^e$$

cuyo término general es:

$$\Lambda_{i,j}^e = \int_{\Gamma_2^e} h \psi_i^e \psi_j^e d\sigma \quad (6.1.2.9)$$

donde ψ_i^e y ψ_j^e son aquí las restricciones a Γ_2^e (siendo $\Gamma_2^e = \Gamma_2 \cap \bar{\Omega}_e$). Se puede observar en (6.1.2.8) y (6.1.2.9) que el problema es simétrico, teniendo en cuenta que $A_{i,j}^e = K_{i,j}^e + \Lambda_{i,j}^e$.

Para el cálculo del término:

$$\int_{\Omega} f v dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u_{\infty} v d\sigma \longrightarrow b^e$$

se utiliza, por ejemplo, la fórmula de integración numérica de Newton en el primer caso:

$$\int_{\Omega_e} f \psi_i^e dx_1 dx_2 = \frac{\text{Area}(\Omega_e)}{3} \sum_{j=1}^3 f(x_1^j, x_2^j) \quad (6.1.2.10)$$

siendo (x_1^j, x_2^j) las coordenadas del nodo j del elemento ($j=1,2,3$).

Y la fórmula trapezoidal sobre Γ_2^\bullet :

$$\int_{\Gamma_2^\bullet} h u_\infty \psi_i \, d\sigma = \frac{L}{2} [h u_\infty(x_1^o, x_2^o) + h u_\infty(x_1^L, x_2^L)] \quad (6.1.2.11)$$

siendo (x_1^o, x_2^o) y (x_1^L, x_2^L) las coordenadas de los extremos del lado y L su longitud. De esta forma obtenemos el segundo miembro:

$$b_i^\bullet = \int_{\Omega_e} f \psi_i^\bullet \, dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2^\bullet} h u_\infty \psi_i^\bullet \, d\sigma \quad (6.1.2.12)$$

En la resolución numérica del problema se ha partido de un mallado inicial de 16 elementos con un total de 15 nodos y 30 caras. Se han realizado primeramente 3 procesos de refinamiento automático que han dado lugar a un sistema de 528 ecuaciones, y apartir de aquí se ha aplicado el proceso de refinamiento adaptativo 7 veces con un coeficiente de refinamiento de 0.8. La tolerancia exigida a la solución es de 10^{-9} como en el caso anterior.

A continuación se presentan los resultados numéricos obtenidos para los diferentes métodos en la tabla (6.1.2.a), construida de forma similar que en el problema de Elasticidad Plana.

TIPO DE PRECONDICIONADOR	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
DIAGONAL	528	100	125	18823
	541	53	67	19291
	566	54	74	20191
	610	33	49	21775
	696	57	96	24871
	771	31	60	27571
	894	68	148	31986
	1118	64	177	40037
CHOLESKY	528	49	185	24967
	541	26	101	25591
	566	26	106	26791
	610	19	90	28903
	696	28	141	33031
	771	16	94	36631
	894	33	213	42516
	1118	30	246	53249
CROUT	528	49	208	24967
	541	26	117	25591
	566	26	122	26791
	610	17	89	28903
	696	28	163	33031
	771	17	114	36631
	894	33	246	42516
	1118	30	283	53249

Tabla 6.1.2.a

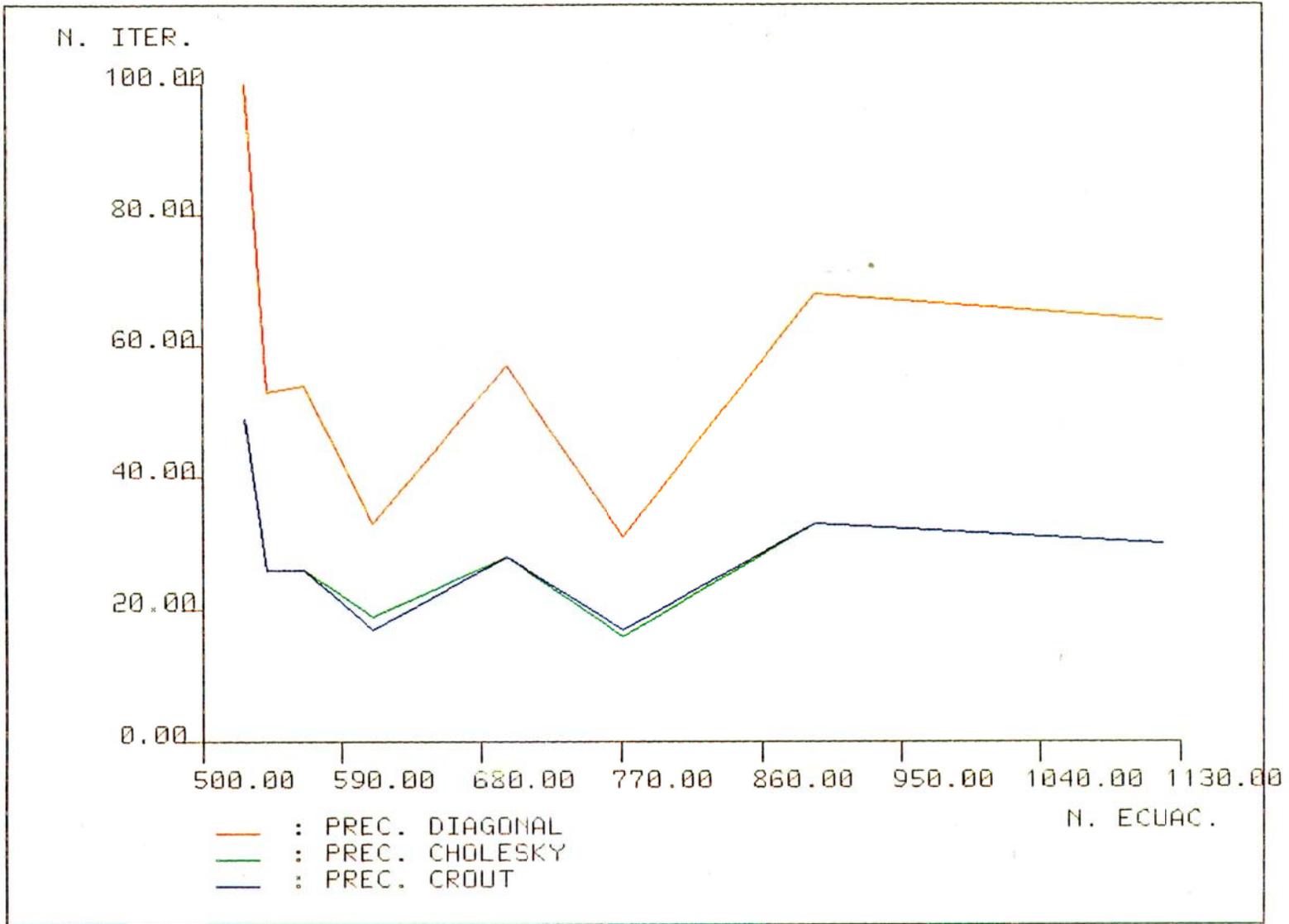
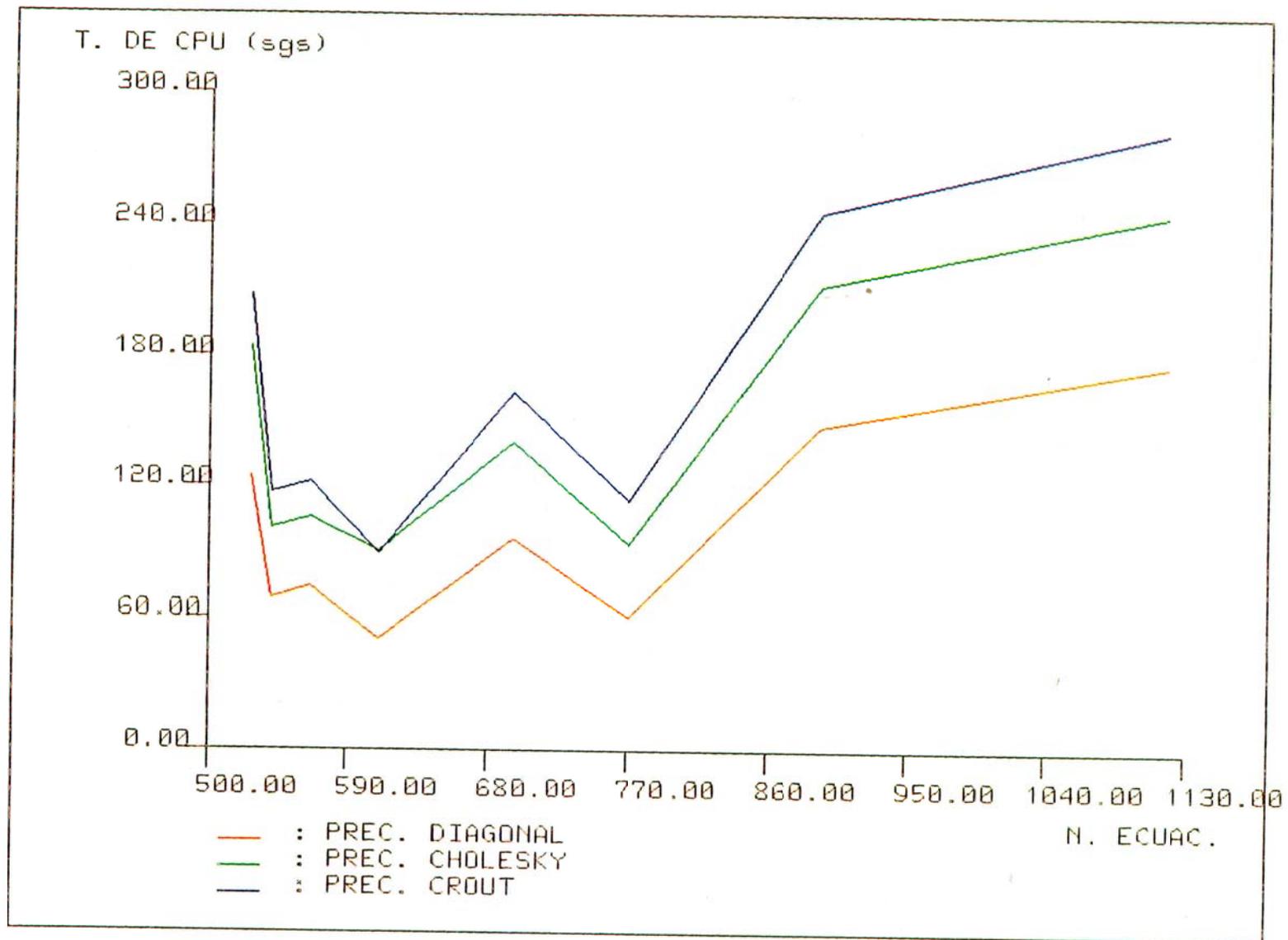


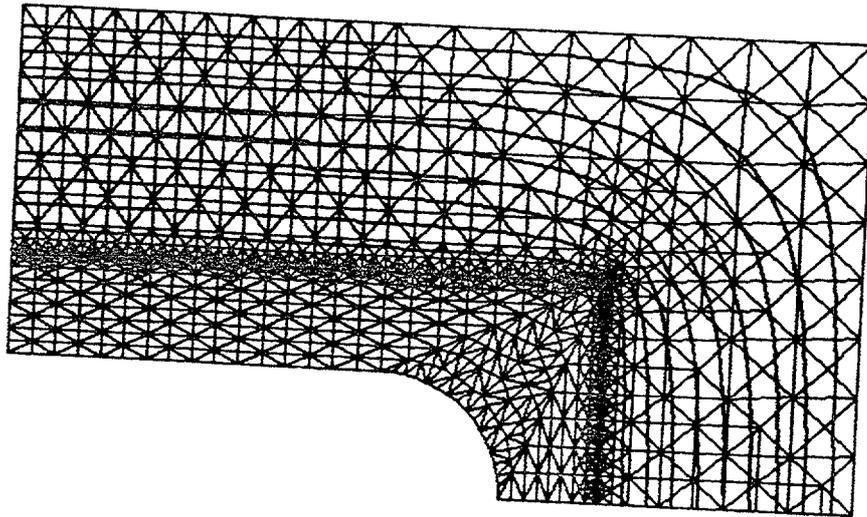
Figura 6.1.2.b

Figura 6.1.2.c



En las figuras (6.1.2.b) y (6.1.2.c) se comparan gráficamente iteraciones y tiempo de CPU para los distintos métodos.

Las líneas isoterma para la solución obtenida se representan en la figura (6.1.2.d).



Problema de Transmision de Calor Lineal
Distribucion de Temperaturas

Figura 6.1.2.d

En problemas lineales con matrices de rigidez simétricas, los resultados más satisfactorios corresponden al empleo del Precondicionador Diagonal, en cuanto a coste computacional por el menor tiempo de CPU invertido en la resolución y la menor capacidad de memoria utilizada. No obstante, hay que señalar que el número de iteraciones realizadas al utilizar un preconditionador de tipo Cholesky o Crout, se redujo considerablemente. Además se aprecia que la diferencia de tiempo de cálculo entre estos tres métodos disminuye cuando el orden del sistema crece en los procesos de refinamiento adaptativo, esperándose en problemas con mayor dimensión del vector incógnita que el preconditionador diagonal sea superado por los otros. Por otro lado, se observa menor influencia del mal condicionamiento del sistema en la convergencia del Gradiente Conjugado con Precondicionador de Cholesky o de Crout respecto al Diagonal, lo cual es de interés en problemas tridimensionales donde exista algún tipo de singularidad.

En cuanto a la memoria requerida, según la técnica de almacenaje expuesta en el capítulo 9, se produce un incremento al pasar del Diagonal al de Cholesky o al de Crout que es proporcional al número de elementos de la malla y al número de grados de libertad del problema.

Comparando los resultados obtenidos con el preconditionador de Cholesky y el de Crout entre sí, se puede concluir que son similares atendiendo a la memoria

utilizada y a iteraciones realizadas para una tolerancia exigida, invirtiendo el de Crout un tiempo de CPU ligeramente mayor.

En cuanto a la aplicación del método multimalla a problemas que tienen asociadas matrices de rigidez simétricas, utilizando el método del Gradiente Conjugado con Precondicionador Diagonal en los procesos de suavizado, hay que destacar que el número de iteraciones realizadas ha sido mayor en cada paso que para el Gradiente Conjugado Precondicionado, permaneciendo prácticamente constante. Por otro lado, el tiempo de cálculo invertido se reduce con respecto al de los otros métodos cuando la dimensión del sistema es elevada, convirtiéndolo a la técnica Multimalla en la más adecuada para problemas con mallados muy finos. La capacidad de memoria requerida al aplicar el algoritmo multimalla se asemeja a la de los precondicionadores de Cholesky y Crout, siendo superior en problemas con un solo grado de libertad y observándose menor requerimiento en problemas con más de un grado de libertad.

6.2.- PROBLEMA NO SIMETRICO.

Se estudia en este apartado el problema de convección-difusión de un fluido sometido a un campo circular de velocidades. Se trata de obtener la distribución de temperaturas en régimen estacionario.

La dificultad surge para velocidades altas del fluido. En estos casos aparecen capas límites que originan singularidades en la solución. Por tanto, es conveniente aplicar el Método de Elementos Finitos Adaptativo de tal forma que refine la malla inicial en aquellas zonas donde la solución sea más singular.

Al aplicar, como veremos a continuación, el método de difusión artificial, el problema que se plantea es no simétrico y por lo tanto el sistema resultante habrá que resolverlo mediante las técnicas propuestas anteriormente para sistemas no simétricos.

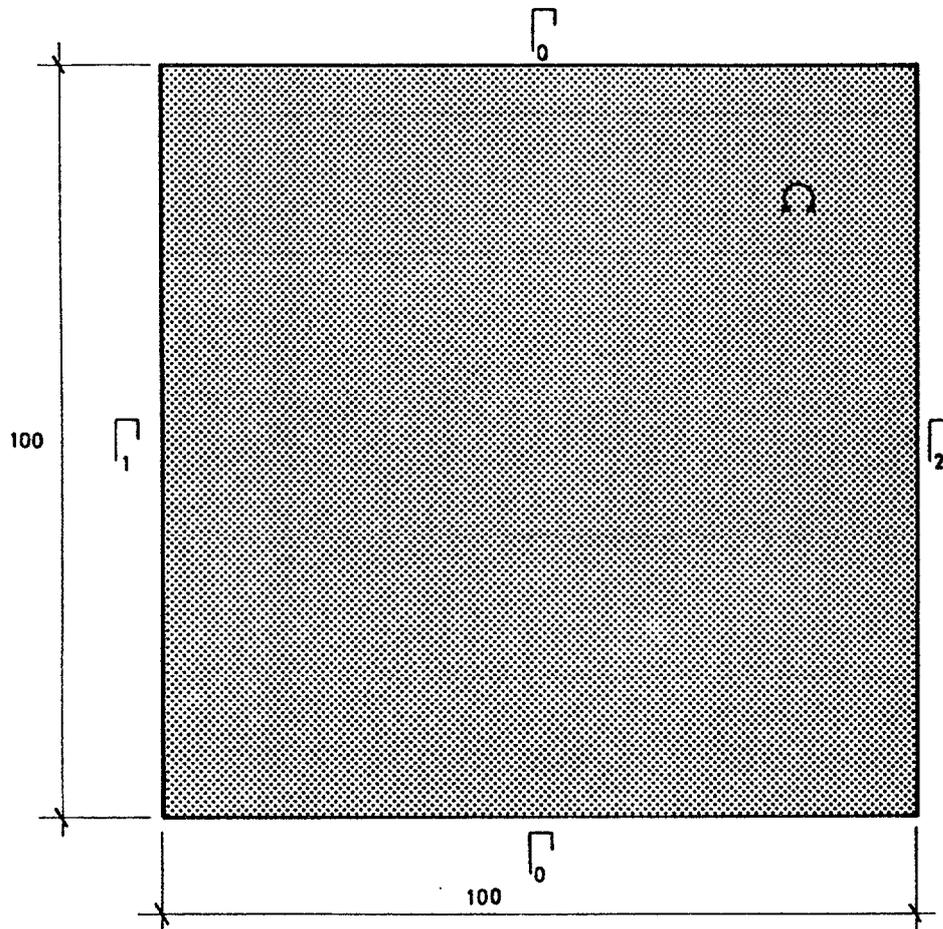
En primer lugar se utilizarán los métodos de Regularización Parabólica con aceleración por relajación aplicada de forma periódica. Se tendrán en cuenta las condiciones de estabilidad del método de Jacobi para este problema (recuérdese que los métodos implícitos propuestos son incondicionalmente estables).

A continuación, se aplicarán los métodos basados en el Gradiente Conjugado en las mismas condiciones de topología del mallado, criterio de refinamiento y tolerancia del error admitida, de forma que sea posible realizar un estudio comparativo tanto de estos métodos entre sí, como de éstos con los de Regularización Parabólica.

Finalmente, como en los problemas simétricos, se aplicará el método multimalla utilizando el Doble Gradiente como suavizado.

6.2.1.- PROBLEMA DE CONVECCION-DIFUSION APLICANDO DIFUSION ARTIFICIAL.

Se propone aquí el estudio de la distribución de temperaturas en un fluido sometido a un campo de velocidades. El dominio Ω en estudio es de forma cuadrada con 100 cms de lado, como se indica en la figura:

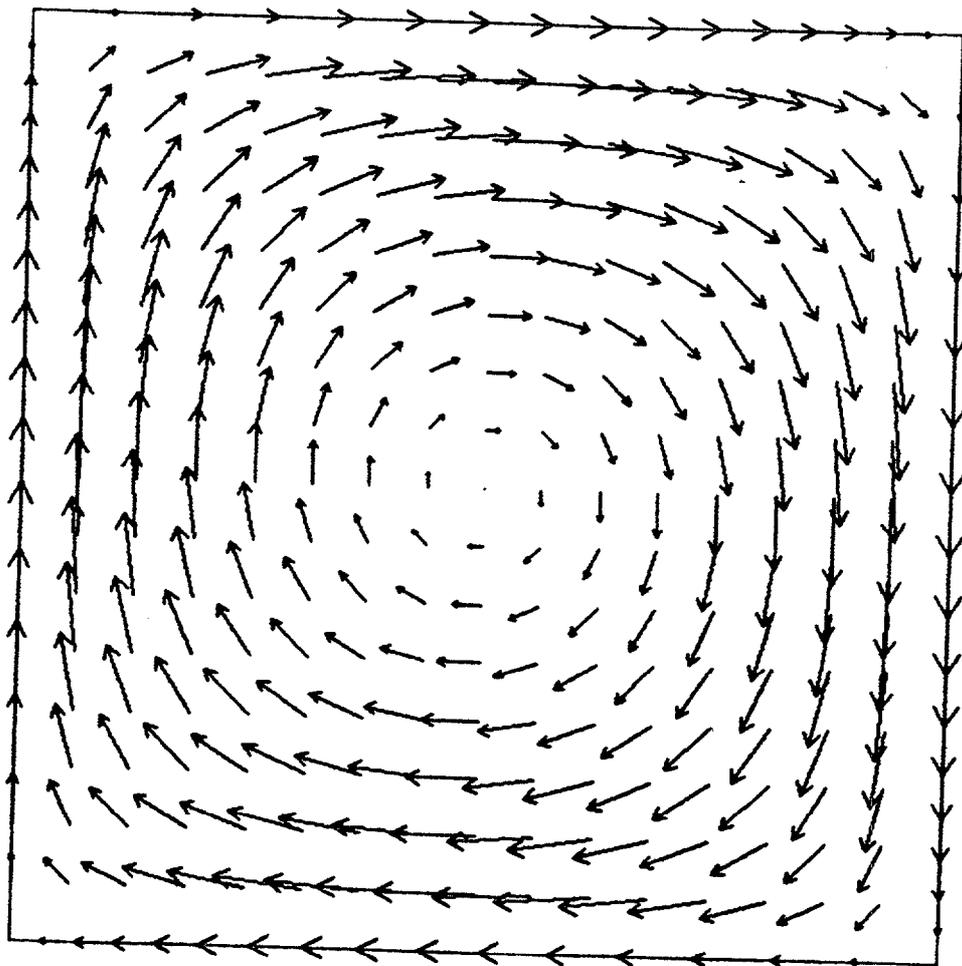


La temperatura en Γ_1 es de 1°C y en Γ_2 es de 0°C . Se considera una condición de flujo nulo $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ en el resto de la frontera Γ_0 . La conductividad del fluido es $1 \text{ KJ/hm}^\circ\text{C}$.

El campo de velocidades viene dado por las ecuaciones:

$$\begin{aligned} v_1 &= C_v \left(y - \frac{1}{2} \right) (x - x^2) \\ v_2 &= C_v \left(\frac{1}{2} - x \right) (y - y^2) \end{aligned} \tag{6.2.1.1}$$

(siendo C_v un factor de amplificación de la velocidad) y se representa en la siguiente figura:



CAMPO DE VELOCIDADES ($U_{max} = C_v/8$)

Formulación clásica del problema.

El problema de convección-difusión planteado se puede formular de forma clásica como sigue (ver referencia [32]):

"Calcular la temperatura $u(x_1, x_2)$ en Ω tal que :

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} u - \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} u) = f = 0 \quad (6.2.1.2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_0 \quad (6.2.1.3)$$

$$u = \bar{u}_1(x_1, x_2) \quad \text{sobre } \Gamma_1 \quad (6.2.1.4)$$

$$u = \bar{u}_2(x_1, x_2) \quad \text{sobre } \Gamma_2 \quad (6.2.1.5)$$

siendo $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ la frontera del dominio Ω ".

Formulación variacional del problema.

Aplicando el método de difusión artificial, transformaremos la ecuación (6.2.1.2) añadiendo a la difusión k una difusión artificial k' en la dirección de la velocidad \vec{v} , siendo k' :

$$k' = \frac{1}{2} \gamma |\vec{v}| h \quad (6.2.1.6)$$

donde h es la máxima distancia entre dos puntos de un elemento cualquiera tomada en la dirección de la velocidad \vec{v} , y γ el parámetro de contracorriente ($0 \leq \gamma \leq 1$).

La ecuación (6.2.1.2) transformada de esta forma queda:

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} u - \vec{\nabla} \cdot [(\tilde{k} + \tilde{k}') \vec{\nabla} u] = f = 0 \quad (6.2.1.7)$$

siendo:

$$\tilde{k} = \begin{bmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{bmatrix} \quad y \quad \tilde{k}' = \begin{bmatrix} c^2 & cs \\ cs & s^2 \end{bmatrix}$$

donde c y s son las componentes de un vector unitario en la dirección de la velocidad.

Consideremos una función test w perteneciente al espacio $W = \{ w \in H^1(\Omega) / w|_{\Gamma_1 \cup \Gamma_2} = 0 \}$. Multiplicando la expresión (6.2.1.7) por w , e integrando en Ω :

$$\int_{\Omega} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} u) w \, d\Omega - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot [(\tilde{k} + \tilde{k}') \vec{\nabla} u] w \, d\Omega = \int_{\Omega} f w \, d\Omega \quad (6.2.1.8)$$

Aplicando la fórmula de Green, teniendo en cuenta que las funciones w se anulan en Γ_1 y Γ_2 y las condiciones de contorno dadas por (6.2.1.3), (6.2.1.4) y (6.2.1.5), resulta:

$$\int_{\Omega} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} u) w \, d\Omega + \int_{\Omega} [(k+k') \vec{\nabla} u] \cdot \vec{\nabla} w \, d\Omega = \int_{\Omega} f w \, d\Omega \quad (6.2.1.9)$$

anulándose las integrales de contorno ya que en este problema la condición (6.2.1.3) es de flujo nulo.

Cálculo de las matrices elementales.

Llamando ψ_i° ($i=1,2,3$) a las funciones de forma en el elemento Ω_{\bullet} (elementos triangulares), mediante la técnica de los elementos finitos, el valor de u en el elemento vendrá dado por:

$$u|_{\Omega_{\bullet}} = \sum_{i=1}^3 \psi_i^{\circ} u_i^{\circ} \quad (6.2.1.10)$$

donde u_i° representa los valores de u en los nodos del elemento Ω_{\bullet} .

El sistema elemental asociado a la formulación dada

por (6.2.1.9) será de la forma:

$$\sum_{j=1}^s A_{i j}^{\circ} u_j^{\circ} = b_i^{\circ} \quad (6.2.1.11)$$

siendo:

$$A_{i j}^{\circ} = \int_{\Omega_e} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \psi_j^{\circ}) \psi_i^{\circ} d\Omega + \int_{\Omega_e} [(k+k') \vec{\nabla} \psi_j^{\circ}] \cdot \vec{\nabla} \psi_i^{\circ} d\Omega \quad (6.2.1.12)$$

$$b_i^{\circ} = \int_{\Omega_e} f \psi_i^{\circ} d\Omega \quad (6.2.1.13)$$

donde se puede observar que el problema no es simétrico.

Condiciones de estabilidad del método de Jacobi.

El esquema en diferencias asociado al método explícito de Jacobi expuesto en el apartado 5.2.1.1 es el siguiente:

$$W \frac{y_j^{n+1} - y_j^n}{\Delta \tau} - \frac{k}{h^2} \left[y_{j+1}^n - 2 y_j^n + y_{j-1}^n \right] + \\ + \frac{v}{h} \left[\gamma (y_j^n - y_{j-1}^n) + \frac{1-\gamma}{2} (y_{j+1}^n + y_{j-1}^n) \right] = 0$$

donde k es la conductividad térmica del fluido, v el módulo del vector \vec{v} , h el diámetro de un elemento de un mallado regular, γ el parámetro contracorriente y W el término correspondiente a la matriz W del esquema de Jacobi, que se tomó como la diagonal de A . Agrupando términos se llega a la siguiente expresión:

$$W \frac{y_j^{n+1} - y_j^n}{\Delta\tau} = \left(\frac{k}{h^2} + \frac{v(1+\gamma)}{2h} \right) y_{j-1}^n + \left(-\frac{2k}{h^2} - \frac{v\gamma}{h} \right) y_j^n + \left(\frac{k}{h^2} - \frac{v(1-\gamma)}{2h} \right) y_{j+1}^n$$

Simplifiquemos el esquema con la notación:

$$a_1 = \frac{k}{h^2} + \frac{v(1+\gamma)}{2h}, \quad a_2 = -\frac{2k}{h^2} - \frac{v\gamma}{h}, \quad a_3 = \frac{k}{h^2} - \frac{v(1-\gamma)}{2h}$$

siendo por tanto $W = -a_2$, resultando,

$$y_j^{n+1} = -\frac{\Delta\tau}{a_2} \left[a_1 y_{j-1}^n + a_2 \left(1 - \frac{1}{\Delta\tau} \right) y_j^n + a_3 y_{j+1}^n \right]$$

Realizando el análisis de estabilidad de este esquema en el sentido de *Von Neuman* se obtiene,

$$y_j^{n+1} = -\frac{\Delta\tau}{a_2} \left[a_1 e^{-i\xi h} + a_2 \left(1 - \frac{1}{\Delta\tau} \right) + a_3 e^{i\xi h} \right] y_j^n$$

que se puede representar como:

$$y_j^{n+1} = G(\xi) y_j^n$$

donde $G(\xi)$ es el factor de amortiguamiento y la condición de estabilidad del esquema es $|G(\xi)| \leq 1$. Partiendo de la expresión transformada de $G(\xi)$:

$$G(\xi) = 1 - \frac{\Delta\tau}{a_2} \left[a_2 + (a_1 + a_3) \cos \xi h \right] - i \frac{\Delta\tau}{a_2} (a_3 - a_1) \sin \xi h$$

la condición resulta,

$$\Delta\tau \operatorname{sen}^2 \frac{\xi h}{2} \left[1 - \frac{(a_1 - a_3)^2}{a_2^2} \right] - 1 + \Delta\tau \frac{(a_1 - a_3)^2}{a_2^2} \leq 0$$

por tanto,

$$\Delta\tau \leq \operatorname{Min} \left[\frac{a_2^2}{(a_1 - a_3)^2}, 1 \right]$$

y sustituyendo los valores de a_1, a_2 y a_3 ,

$$\Delta\tau \leq \operatorname{Min} \left[\left[\frac{2k}{vh} + \gamma \right]^2, 1 \right]$$

El valor utilizado para γ es el óptimo para el la solución en los nodos coincide con la exacta:

$$\gamma = \operatorname{Cth}^2 (P_e/2) - 2/P_e$$

siendo P_e el número de Peclet,

$$P_e = \frac{vh}{k}$$

Finalmente la condición de estabilidad del esquema explícito de Jacobi para el problema formulado es:

$$\Delta\tau \leq \text{Min} \left[Cth^2 (Pe/2), 1 \right]$$

por lo tanto se reduce a:

$$\Delta\tau \leq 1$$

Esta condición obtenida de un estudio en un esquema unidimensional con coeficientes constantes es indicativa para la elección de los valores de $\Delta\tau$ en las aplicaciones bidimensionales con coeficientes variables que hemos abordado.

En esta aplicación hemos considerado de interés el estudio del comportamiento de los diferentes métodos para distintos valores del campo de velocidades, empezando por un problema con un coeficiente $C_v = 100$, que dará lugar a soluciones suaves que no presentan fuentes singularidades y por tanto el sistema a resolver no se espera que esté mal condicionado.

La estrategia de refinamiento seguida en este caso consiste en partir de un mallado de 8 elementos, con un total de 9 nodos y 16 caras, resultando un sistema de 3 ecuaciones, y realizar 9 iteraciones de refinamiento con un coeficiente de 0.7. La tolerancia exigida a la solución es de 10^{-9} .

Las tablas (6.2.1.1.a) y (6.2.1.1.b) muestran los resultados numéricos obtenidos con los métodos propuestos para la resolución de sistemas no simétricos, para este caso. En las figuras (6.2.1.1.c) y (6.2.1.1.d) se representan las iteraciones y el tiempo de CPU respectivamente. La solución se presenta de forma gráfica mediante las isoterma en la figura (6.2.1.1.e).

METODO	N ^o DE ECUAC.	N ^o DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
JACOBI $\Delta\tau = 0.5$ RELAJACION CADA 10 ITERACIONES	3	30	0.3	200
	11	60	1.5	504
	17	83	3.4	802
	27	93	5.6	1158
	51	153	18.3	2226
	96	184	41.6	4144
	154	236	87.1	6516
	233	369	206.7	9846
322	378	296.2	13658	
468	606	723.4	19832	
APROXIMACION DE UN PASO $\Delta\tau = 2.$ RELAJACION CADA 10 ITERACIONES	3	30	0.7	272
	11	42	2.9	702
	17	40	4.5	1126
	27	47	7.7	1626
	51	58	18.8	3144
	96	71	44.1	5872
	154	100	99.7	9252
	233	127	192.0	13995
322	124	263.8	19427	
468	182	565.8	28229	
APROXIMACION DE DOS PASOS $\Delta\tau = 2.$ RELAJACION CADA 10 ITERACIONES	3	40	1.4	272
	11	44	4.7	702
	17	45	8.0	1126
	27	50	13.4	1626
	51	60	31.8	3144
	96	75	74.9	5872
	154	97	156.7	9252
	233	127	316.2	13995
322	127	435.1	19427	
468	189	947.0	28229	

Tabla 6.2.1.1.a

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
GRADIENTE CONJUGADO	3	3	0.6	197
	11	11	0.5	493
	17	17	1.3	785
	27	>27	(2.9)	1131
	51	>51	(10.7)	2175
	96	>96	(37.3)	4048
	154	>154	(97.4)	6362
	233	>233	(226.8)	9613
	322	>322	(435.7)	13336
	468	>468	(931.1)	19364
GRADIENTE CONJUGADO	3	3	0.7	197
	11	11	0.6	493
	17	17	1.2	785
	27	>27	(2.9)	1131
	51	>51	(11.0)	2175
	96	>96	(37.2)	4048
	154	>154	(97.3)	6362
	233	>233	(225.1)	9613
	322	>322	(429.6)	13336
	468	>468	(916.4)	19364
GRADIENTE CONJUGADO	3	>3	(0.5)	200
	11	>11	(0.3)	504
	17	>17	(0.7)	802
	27	>27	(1.7)	1158
	51	>51	(6.0)	2226
	96	68	15.3	4144
	154	132	46.7	6516
	233	118	63.5	9846
	322	110	82.5	13658
	468	147	160.8	19832
DOBLE GRADIENTE CONJUGADO	3	3	0.7	203
	11	11	0.5	515
	17	17	1.3	819
	27	24	2.6	1185
	51	34	7.4	2277
	96	45	18.6	4240
	154	59	39.0	6670
	233	73	73.6	10079
	322	84	117.4	13980
	468	96	199.5	20300

Tabla 6.2.1.1.b

Figura 6.2.1.1.c

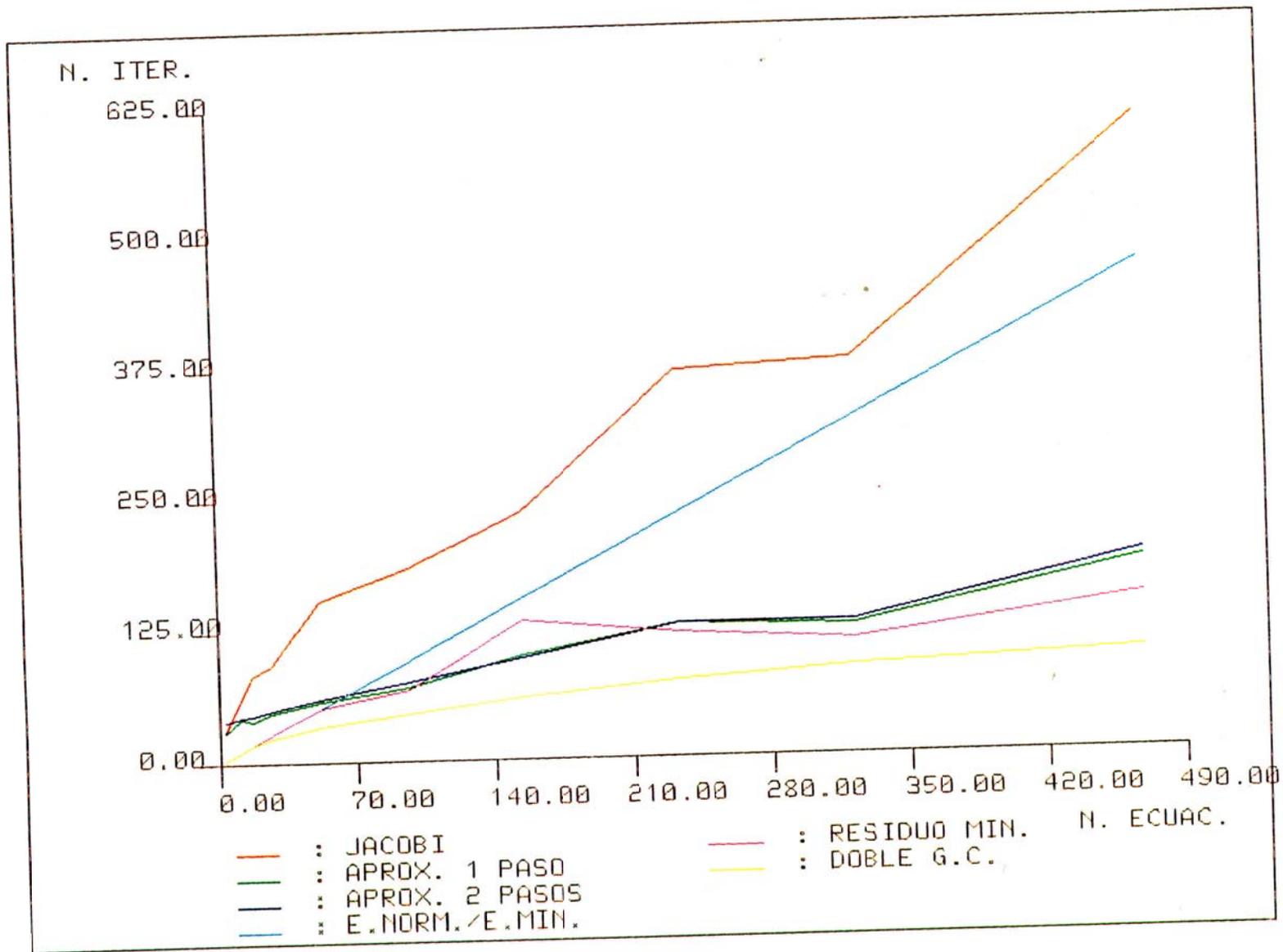
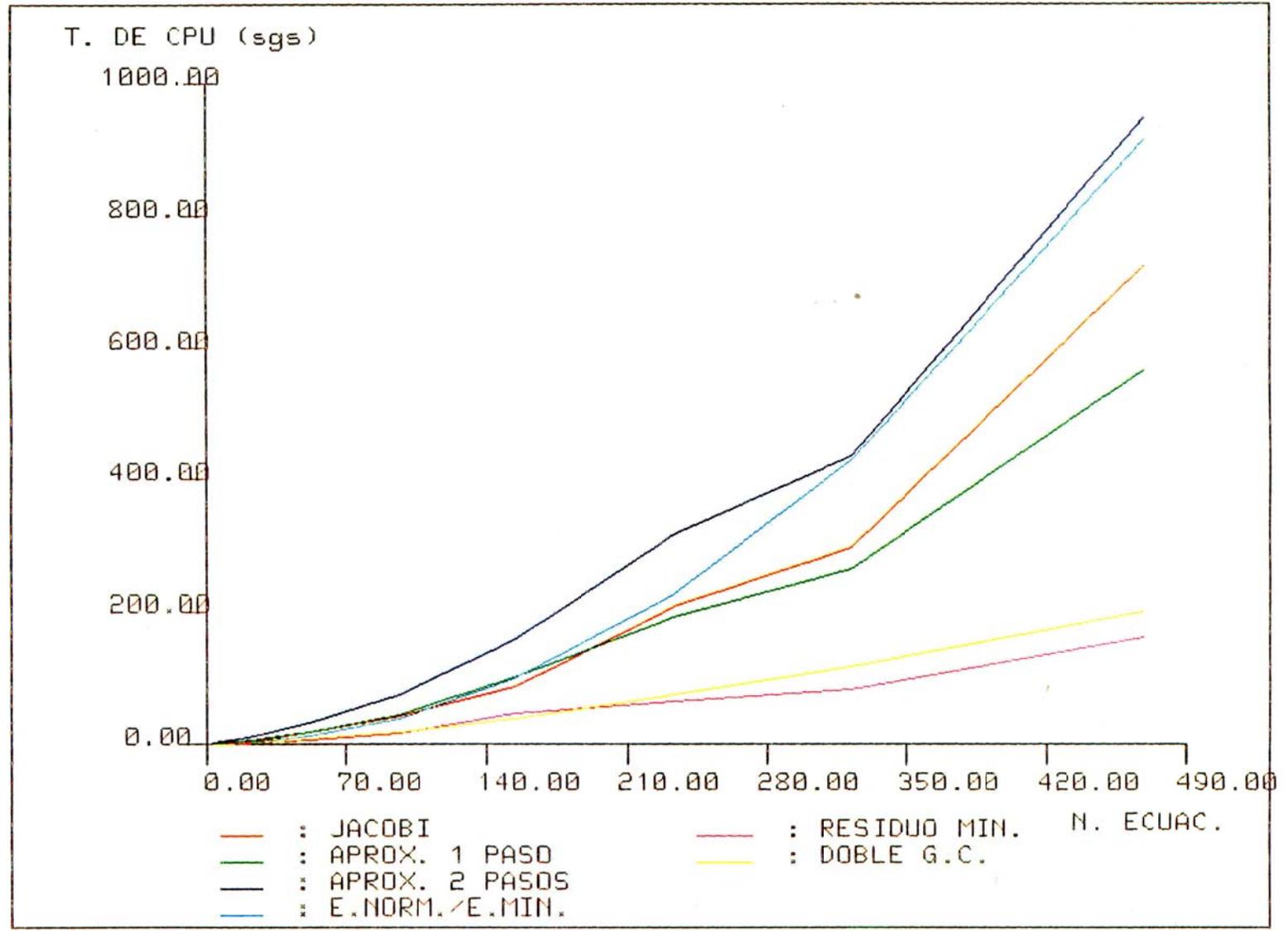
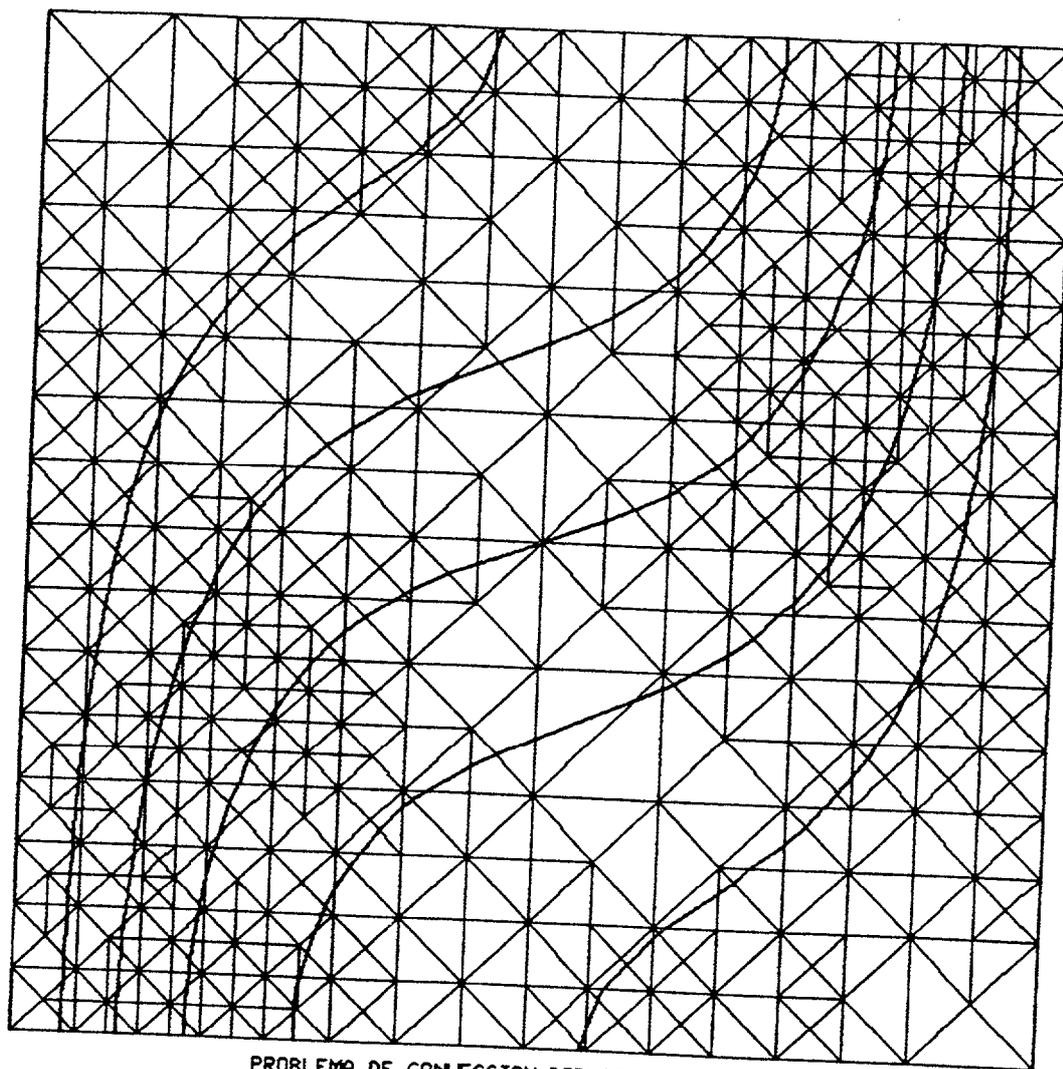


Figura 6.2.1.1.d





PROBLEMA DE CONVECCION-DIFUSION ($Cu=100$)

DISTRIBUCION DE TEMPERATURAS

Figura 6.2.1.1.e

El segundo caso que se ha tratado, es para $C_v = 1000$ y aquí aparecen ya singularidades debido a la capa límite, por lo que las matrices resultantes van estar mal condicionadas. Se ha partido de un mallado inicial igual al del caso planteado anteriormente, procediéndose seguidamente a realizar 3 procesos de refinamiento automático, ya que este problema exige una malla inicial relativamente fina. Después de resolver el sistema resultante de 255 ecuaciones, se han aplicado 4 iteraciones de refinamiento adaptativo con un coeficiente de 0.6, exigiendo a la solución una tolerancia de 10^{-9} .

Las tablas (6.2.1.2.a) y (6.2.1.2.b) muestran los resultados numéricos obtenidos para $C_v = 1000$. Los mismos se comparan en las figuras (6.2.1.2.c) y (6.2.1.2.d) respecto al número de iteraciones, y en (6.2.1.2.e) y (6.2.1.2.f) respecto al tiempo de CPU empleado por los diferentes métodos. La solución obtenida se representa en la figura (6.2.1.2.g).

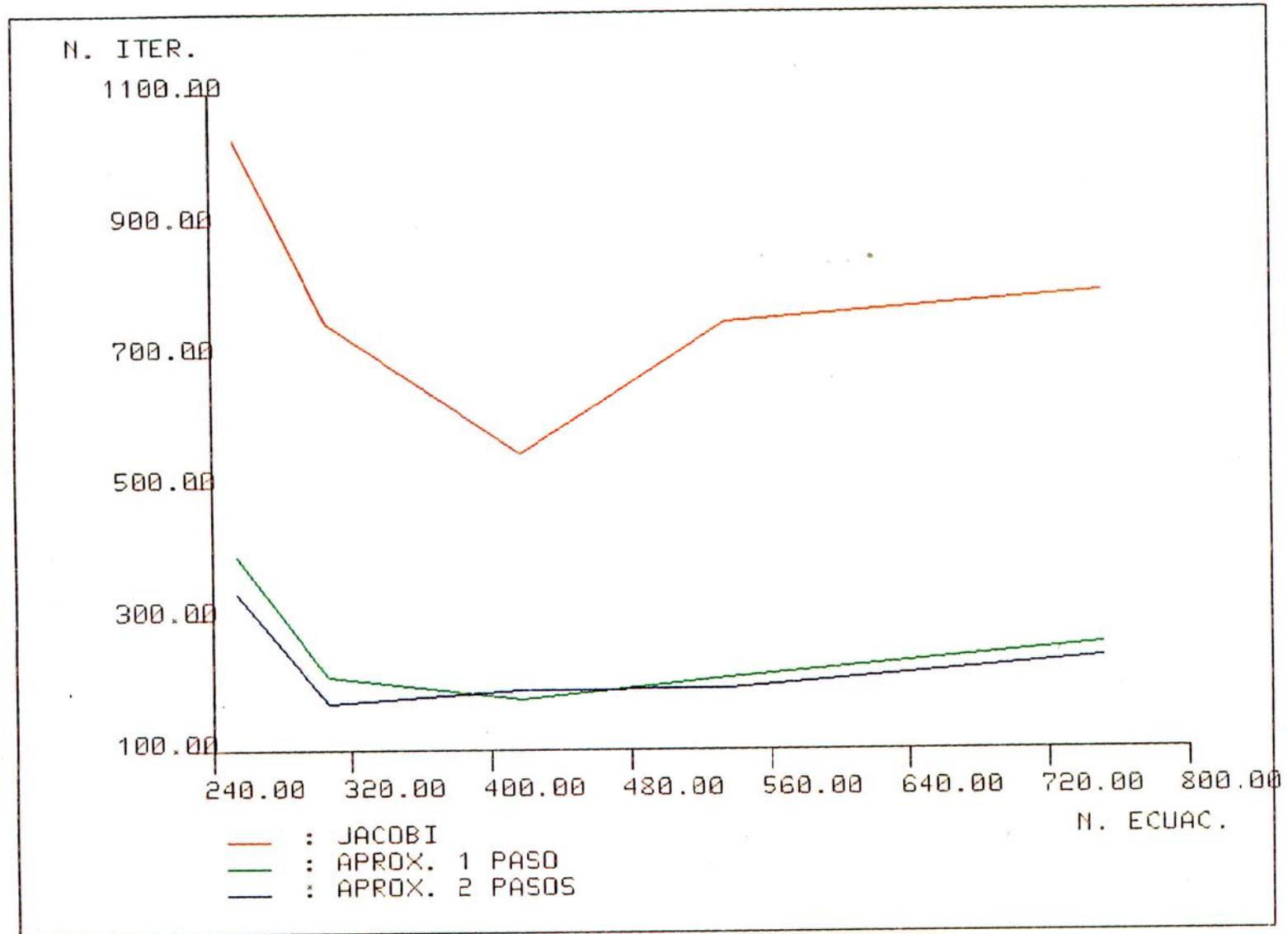
METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
JACOBI $\Delta\tau = 0.5$ RELAJACION CADA 750 ITERACIONES	255	1029	577.7	10980
	307	750	507.7	13100
	417	549	508.6	17904
	535	750	891.9	22778
	751	794	1334.8	31968
APROXIMACION DE UN PASO $\Delta\tau = 2.$ RELAJACION CADA 20 ITERACIONES	255	394	657.1	15588
	307	210	421.2	18608
	417	177	487.5	25464
	535	209	736.7	32408
	751	258	1286.1	45513
APROXIMACION DE DOS PASOS $\Delta\tau = 2.$ RELAJACION CADA 20 ITERACIONES	255	338	876.0	15588
	307	171	532.5	18608
	417	190	815.0	25464
	535	192	1051.9	32408
	751	239	1855.2	45513

Tabla 6.2.1.2.a

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
GRADIENTE CONJUGADO	255	183	199.4	10725
	307	204	266.4	12793
	417	246	442.8	17487
	535	326	753.4	22243
	751	423	1383.2	31217
GRADIENTE CONJUGADO	255	184	195.9	10725
	307	206	263.3	12793
	417	249	435.2	17487
	535	332	747.2	22243
	751	429	1370.8	31217
GRADIENTE CONJUGADO	255	>255	(142.0)	10980
	307	>307	(204.3)	13100
	417	>417	(381.7)	17904
	535	>535	(630.7)	22778
	751	699	(1159.2)	31968
DOBLE GRADIENTE CONJUGADO	255	142	150.6	11235
	307	131	166.3	13407
	417	145	254.9	18321
	535	162	362.4	23313
	751	179	572.2	32719

Tabla 6.2.1.2.b

Figura 6.2.1.2.c



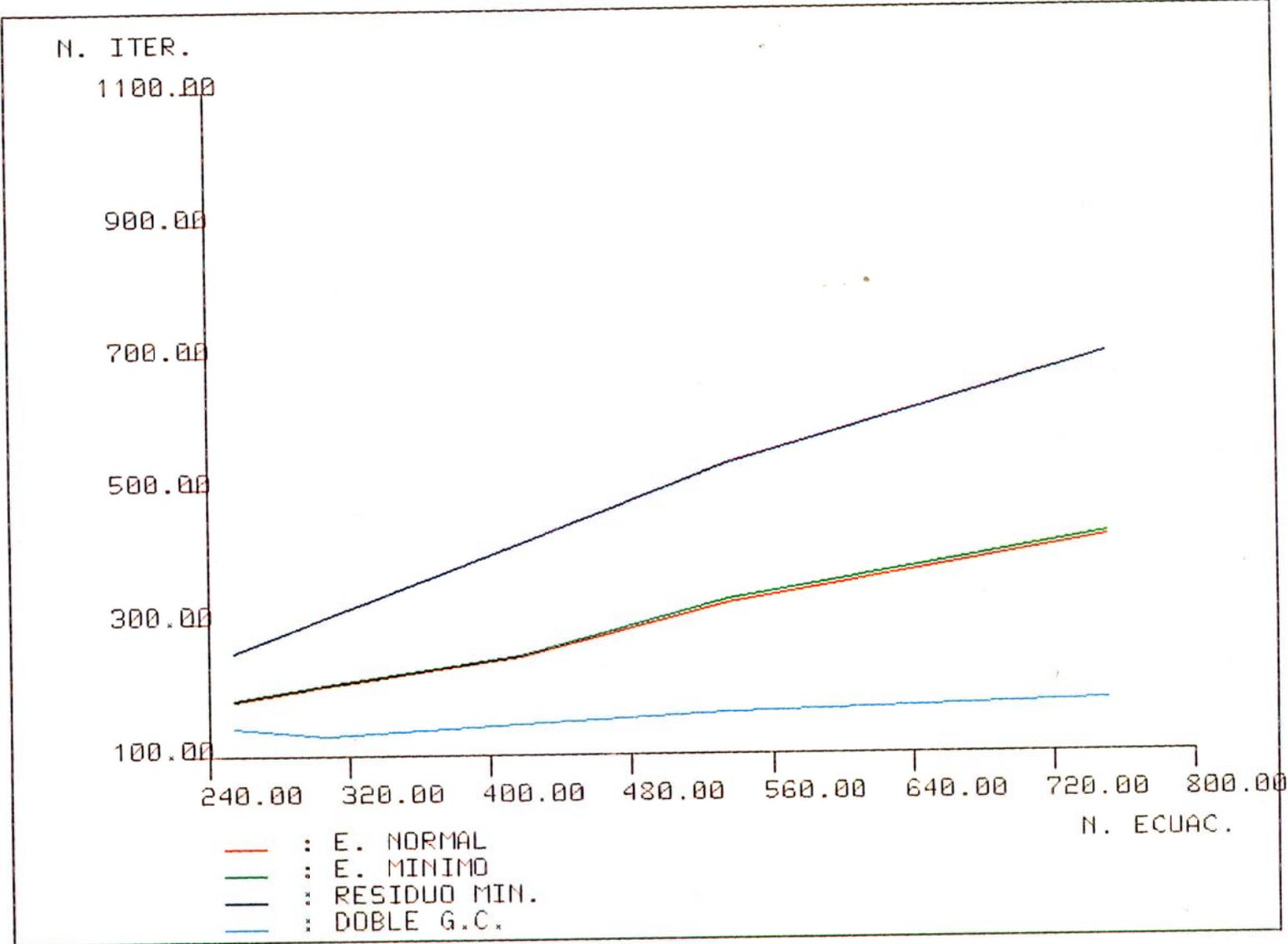
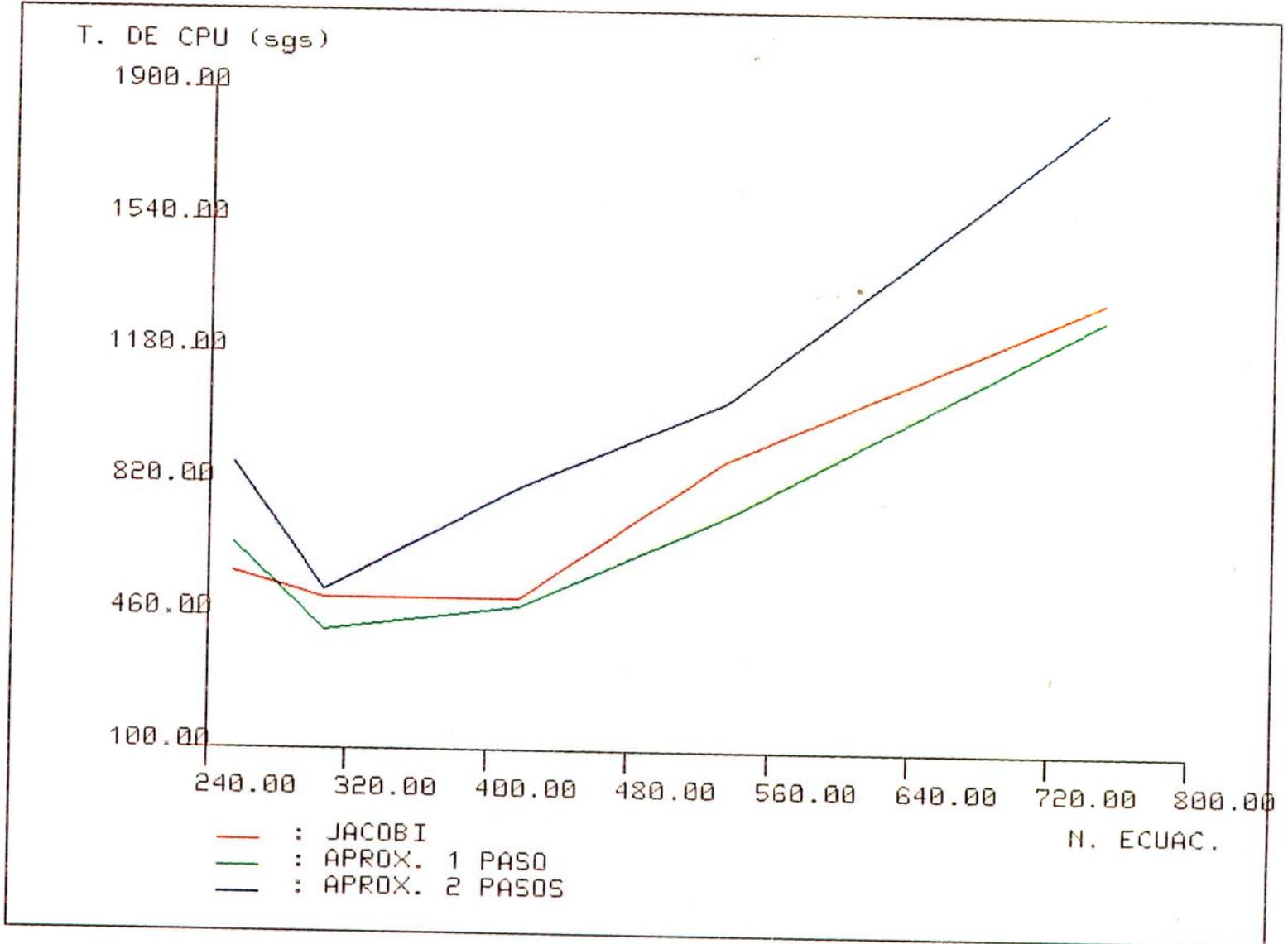


Figura 6.2.1.2.d

Figura 6.2.1.2.e



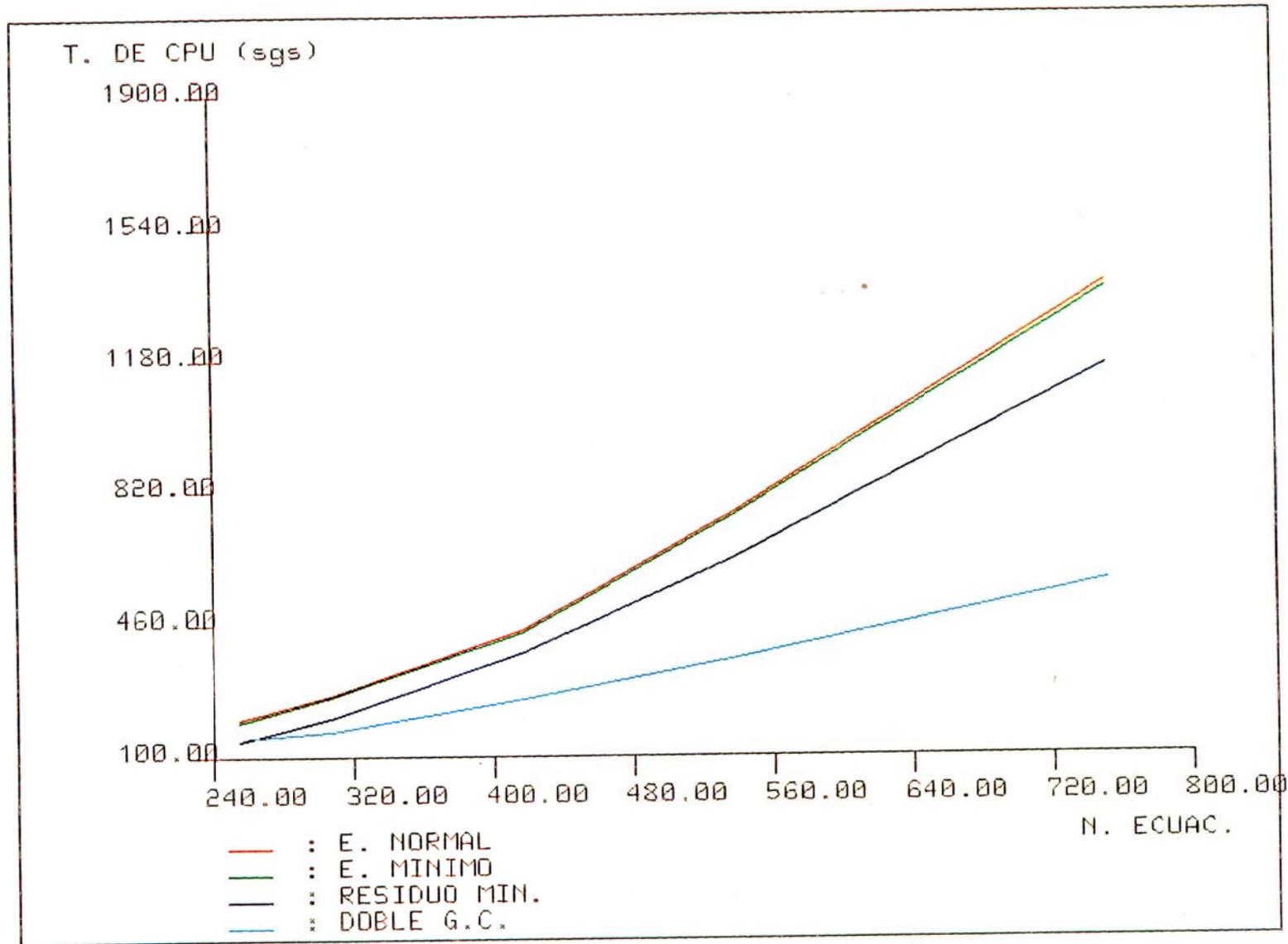
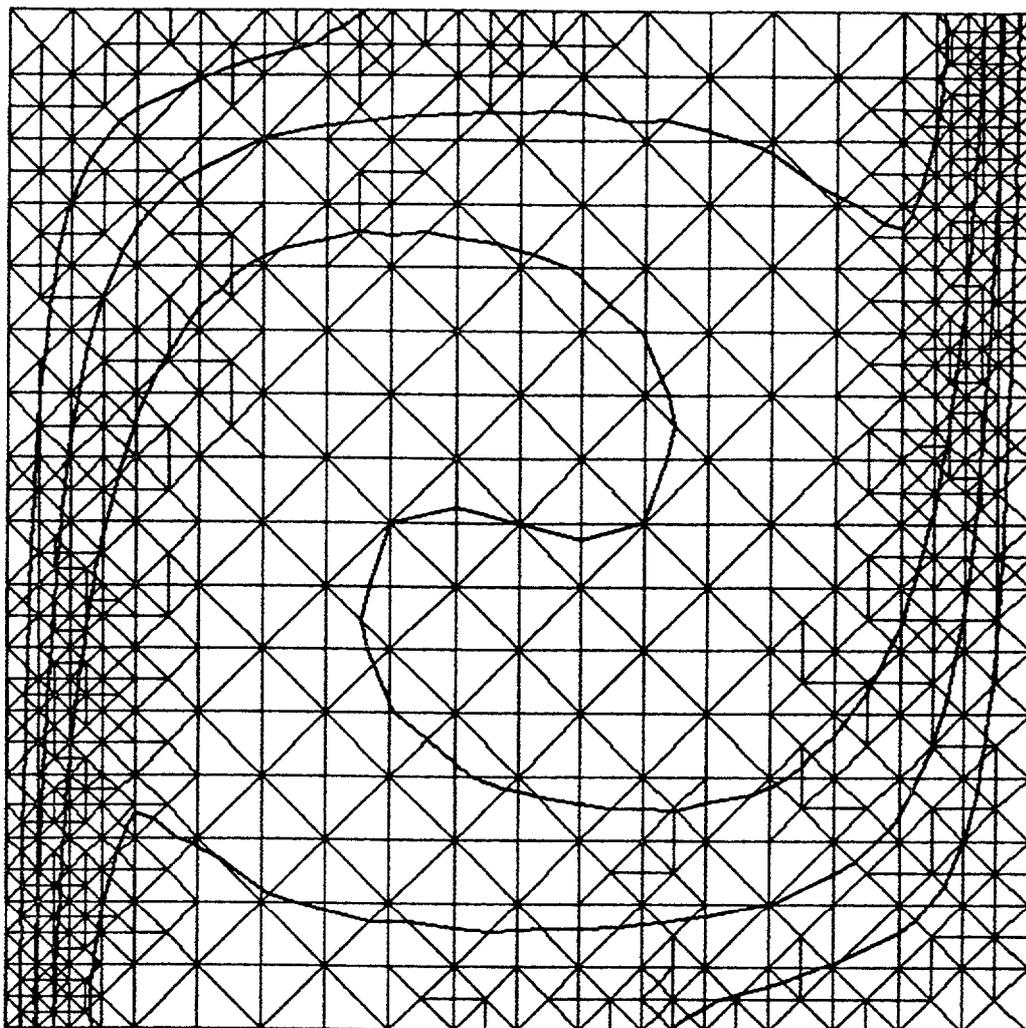


Figura 6.2.1.2.F



PROBLEMA DE CONVECCION-DIFUSION (Cu=1000)

DISTRIBUCION DE TEMPERATURAS

Figura 6.2.1.2.g

La resolución del problema se complica aumentando el coeficiente C_v a 10000. El problema es fuertemente singular y las matrices de los sistemas que resultan están muy mal condicionadas, dificultándose aún más la convergencia de los métodos utilizados. El mallado de partida ha sido el mismo que en los casos anteriores, realizándose como en el anterior, 3 procesos de refinamiento automático, originando un sistema de 255 ecuaciones. Una vez resuelto este sistema con un error menor de 10^{-9} , se ha refinado 7 veces con un coeficiente de refinamiento de 0.3.

Los resultados numéricos para $C_v = 10000$ se muestran en las tablas (6.2.1.3.a) y (6.2.1.3.b). Las iteraciones y el tiempo de CPU se comparan en las figuras (6.2.1.3.c) y (6.2.1.3.d) respectivamente.

La solución obtenida se representa en la figura (6.2.1.3.e).

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
JACOBI $\Delta\tau = 0.5$ RELAJACION CADA 1000 ITERACIONES	255	2450	1395.2	10980
	354	1502	1203.9	15290
	374	1375	1164.4	16222
	390	1055	934.6	16940
	400	2000	1813.4	17406
	420	1435	1368.0	18292
	486	1925	2125.0	21124
	608	2225	3070.0	26389
APROXIMACION DE UN PASO $\Delta\tau = 1.5$ RELAJACION CADA 500 ITERACIONES	255	732	1192.2	15588
	354	586	1315.9	21734
	374	601	1432.9	23062
	390	561	1395.2	24086
	400	500	1286.7	24750
	420	523	1422.4	26014
	486	620	1935.0	30052
	608	693	2696.0	37549
APROXIMACION DE DOS PASOS $\Delta\tau = 1.$ RELAJACION CADA 1000 ITERACIONES	255	1080	2870.7	15588
	354	1000	3726.4	21734
	374	1000	3945.9	23062
	390	1000	4114.4	24086
	400	1000	4230.5	24750
	420	1000	4463.7	26014
	486	1000	5141.6	30052
	608	1027	6632.0	37549

Tabla 6.2.1.3.a

METODO	Nº DE EQUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
GRADIENTE CONJUGADO	255	>255	(277.1)	10725
	354	>354	(536.6)	14936
	374	>374	(600.1)	15848
	390	>390	(652.9)	16550
	400	>400	(685.2)	17006
	420	>420	(754.9)	17872
	486	>486	(1010.2)	20638
	608	>608	(1584.7)	25781
ERROR MINIMO	255	>255	(271.2)	10725
	354	>354	(525.7)	14936
	374	>374	(589.2)	15848
	390	>390	(643.5)	16550
	400	>400	(675.0)	17006
	420	>420	(744.4)	17872
	486	>486	(995.6)	20638
	608	>608	(1558.6)	25781
GRADIENTE CONJUGADO	255	>255	(143.4)	10980
	*346	_____	_____	_____
	*368	_____	_____	_____
	*384	_____	_____	_____
	*394	_____	_____	_____
	*414	_____	_____	_____
	*478	_____	_____	_____
	*605	_____	_____	_____
DOBLE GRADIENTE CONJUGADO	255	>255	(278.2)	11235
	354	314	480.2	15644
	374	330	534.3	16596
	390	323	544.5	17330
	400	350	605.6	17806
	420	357	647.9	18712
	486	437	919.2	21610
	608	472	1247.0	26997

* Debido al error cometido en la solución, se desvirtua el proceso de refinamiento, obteniéndose mallados diferentes.

Tabla 6.2.1.3.b

Figura 6.2.1.3.c

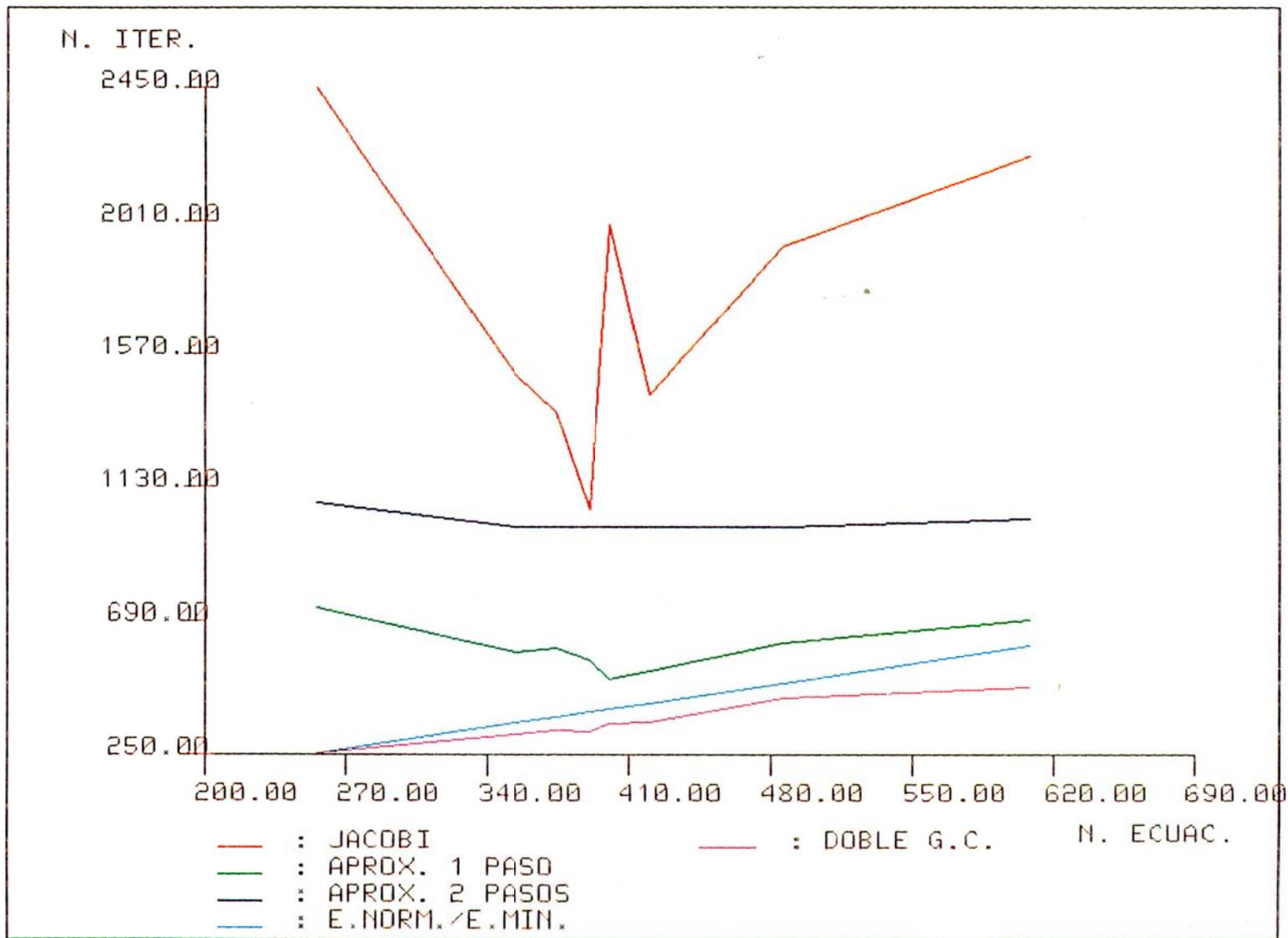
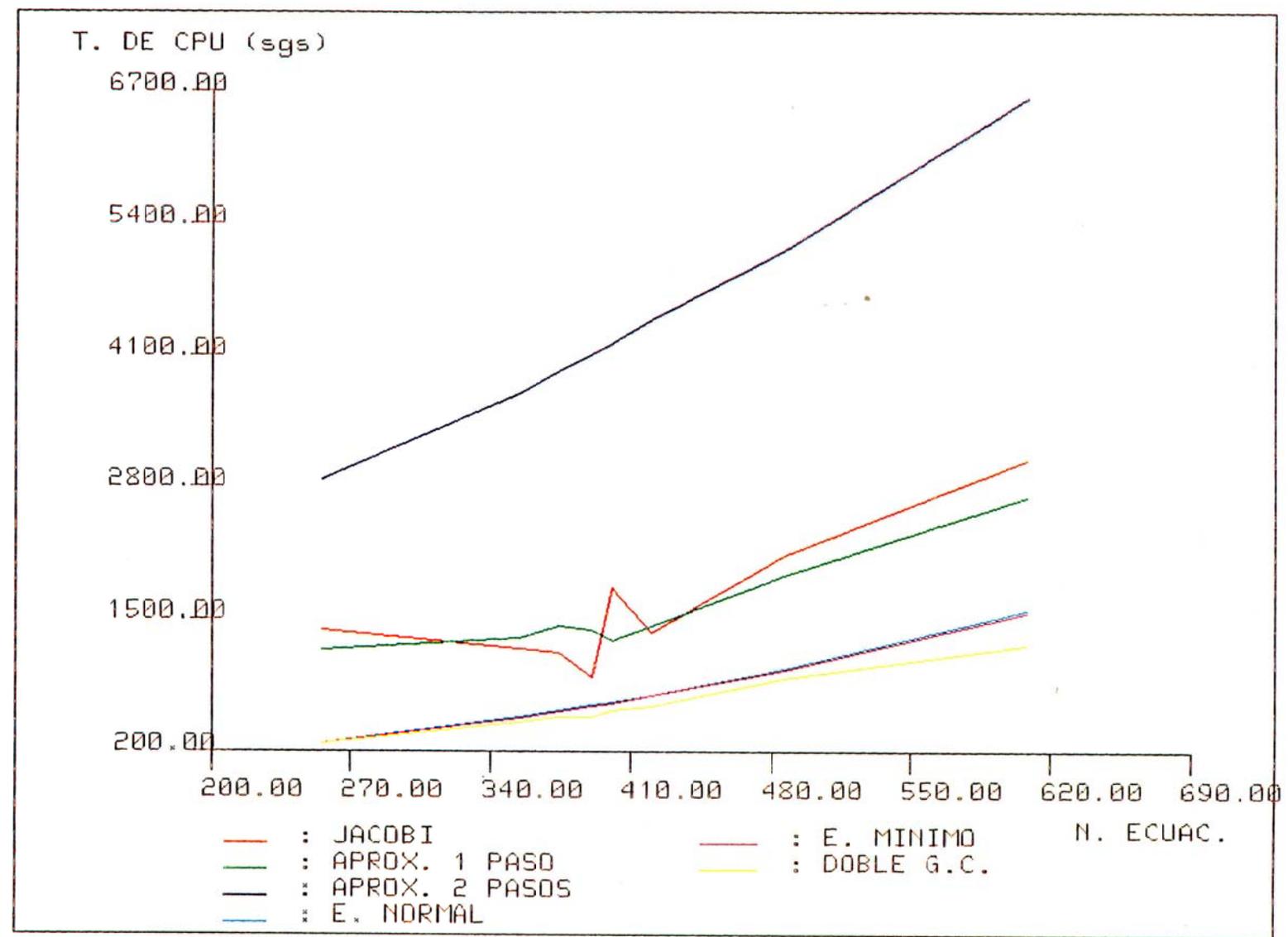
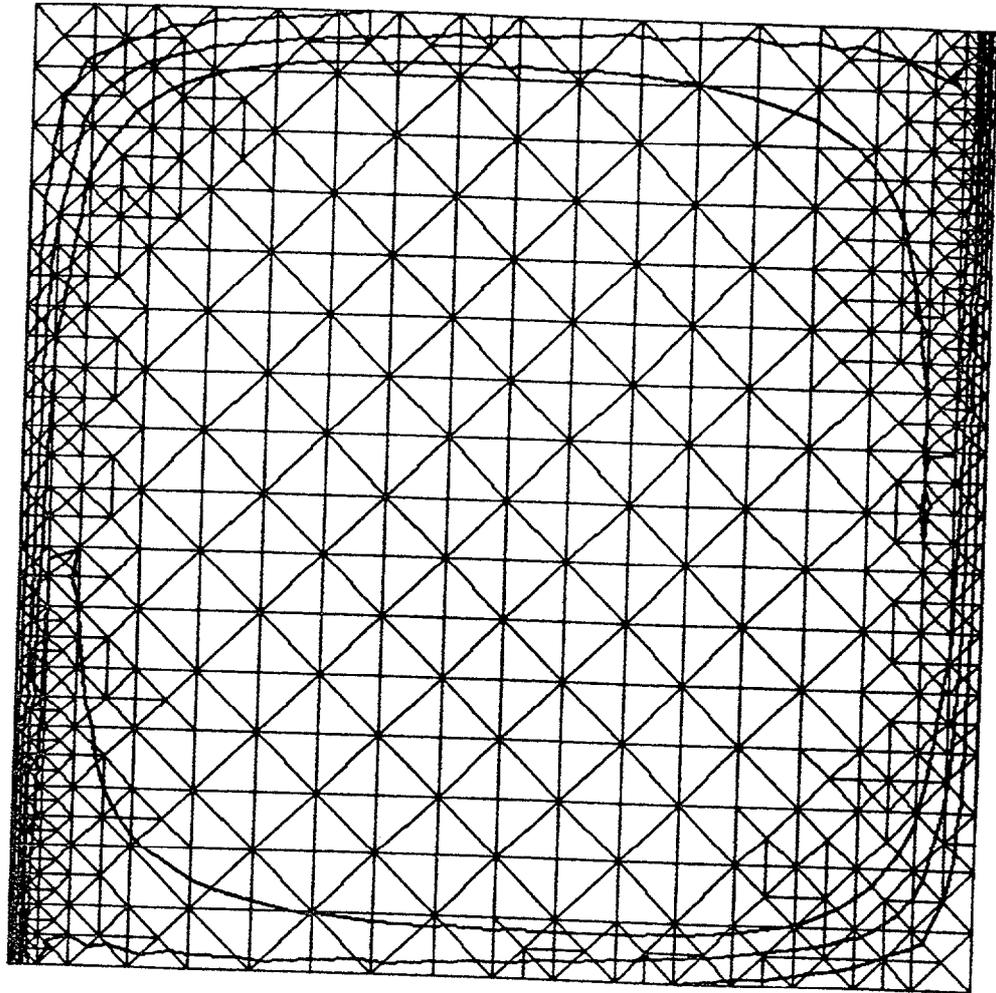


Figura 6.2.1.3.d





PROBLEMA DE CONVECCION-DIFUSION ($Cu=10000$)
DISTRIBUCION DE TEMPERATURAS

Figura 6.2.1.3.e

Este mismo problema con $C_v = 100$ se ha resuelto mediante otra estrategia de refinamiento para obtener algunas conclusiones sobre la aplicación del método Multimalla con suavizado mediante Doble Gradiente Conjugado a sistemas no simétricos.

Se han realizado tres refinamientos automáticos dando lugar a una malla con 81 nodos. Se ha aplicado entonces cuatro etapas de refinamiento adaptativo con un coeficiente de 0.2.

Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 6.2.1.4:

TIPO DE PRECONDICIONADOR	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
MULTIMALLA + D. G. C.	63	3	22	4540
	231	2	65	16422
	905	2	268	63048
	3577	1	546	246764
D. G. C.	63	38	10	2867
	231	58	58	10221
	905	102	417	39399
	3577	130	2127	154673

Tabla 6.2.1.4

En el problema lineal de Convección-Difusión con matriz no simétrica asociada, hemos considerados tres casos con distintos valores del término de Convección, que determina la mayor o menor singularidad del problema. Cuando el problema no es singular ($C_v = 100$), los métodos en general han tenido un comportamiento satisfactorio. Respecto a los de Regularización Parabólica, el método de Aproximación de Un Paso converge a la solución con menos iteraciones que el de Dos Pasos y Jacobi, e invierte un tiempo de cálculo más reducido. Sin embargo, la eficacia de estos métodos está ligada a la elección adecuada de dos parámetros, el de pseudo tiempo dado por la condición de estabilidad y el que gobierna el proceso de aceleración por relajación.

Por otro lado, la aplicación de los métodos de Gradiente Conjugado han aportado diferentes resultados. Los métodos de la Ecuación Normal y el Error Mínimo han funcionado prácticamente igual en cuanto a iteraciones y a tiempo de CPU, aunque no han llegado a la solución, como teóricamente se esperaba, en un número de iteraciones igual al de ecuaciones. El método del Residuo Mínimo es sin duda (ver capítulo 5) el más rápido de todos, aunque inicialmente en el proceso adaptativo no tenga una convergencia aceptable. No obstante, se presenta como el más adecuado cuando se parte de una aproximación inicial bastante buena y el sistema no tiene un pésimo número de condicionamiento. En

cambio, la influencia del mal condicionamiento del sistema sobre el método del Doble Gradiente Conjugado es menor, obteniéndose resultados en convergencia y tiempo de CPU comparables a los del Residuo Mínimo, pero aceptables desde la resolución de la primera malla del proceso adaptativo. Se observa una mayor regularidad en los resultados de este último, presentándose como un método más seguro que el anterior frente a problemas singulares.

Al aumentar el carácter singular del problema ($C_v = 1000$) los métodos de Regularización Parabólica siguen en la misma línea, detectándose una mejora en la convergencia para el método de Aproximación de Dos Pasos. De igual forma se puede observar una mejor convergencia de los métodos de Gradiente Conjugado al tomarse un mallado inicial más fino en el proceso adaptativo. El método de Doble Gradiente Conjugado mejora en iteraciones y tiempo de CPU al de Residuo Mínimo que incluso es superado por el de la Ecuación Normal y Error Mínimo.

Finalmente, cuando el problema es muy singular ($C_v = 10000$) se ratifican las conclusiones anteriores, obteniéndose una convergencia poco aceptable en los métodos de la Ecuación Normal y Error Mínimo, los cuales no llegan a la tolerancia exigida en el número teóricamente máximo de iteraciones, y unos resultados muy satisfactorios con el Doble Gradiente Conjugado, al que el mal condicionamiento del sistema afecta en menor medida que a los demás métodos.

Con el método del Residuo Mínimo, no se consigue la convergencia, desvirtuándose el proceso de refinamiento de mallado del proceso adaptativo. En los métodos de Regularización Parabólica cabe destacar que las posibilidades de elección de los parámetros son cada vez más restringidas.

Respecto a la aplicación del método Multimalla, se ha obtenido una convergencia satisfactoria en sistemas de gran dimensión, aunque para fuertes singularidades se tiene que aumentar las iteraciones de suavizado debido a la falta de preconditionador en el Doble Gradiente Conjugado. El número de iteraciones del algoritmo Multimalla se mantiene prácticamente constante para los diferentes sistemas asociados a cada malla.

7.- APLICACIONES A PROBLEMAS NO LINEALES.

7.1.- INTRODUCCION A PROBLEMAS NO LINEALES.

Estudiaremos en este capítulo la resolución de un problema de transmisión de calor no lineal, aplicando los diferentes esquemas desarrollados.

Es preciso distinguir la naturaleza de la no linealidad. Esta puede ser debida a conductividades de los materiales dependientes de la solución del problema (o sea, de la temperatura en cada punto del dominio), o a la existencia de flujo por radiación en la frontera. En nuestro caso, consideraremos un problema en el que la no linealidad viene dada por conductividades dependientes de la temperatura.

Como se comprobó en 6.1.2, la existencia de dos materiales de características muy dispares origina una singularidad en la solución y es por tanto conveniente aplicar una técnica de resolución autoadaptativa, teniendo en cuenta que el proceso constará de dos lazos, uno de iteraciones autoadaptativas de refinamiento y otro incluido en éste de iteraciones de linealización en la resolución del sistema no lineal.

Para la resolución del sistema no lineal que aparece en cada iteración autoadaptativa, existen diferentes posibilidades. Aquí se propone el método del Punto Fijo y el método de Newton, no sólo debido a su simplicidad de implementación, sino a que permiten conservar la estructura elemento a elemento para la resolución del sistema lineal que resulta en cada proceso de linealización. Con este fin se han introducido los algoritmos de dichos métodos en la formulación variacional del problema.

La utilización del método del Punto Fijo da lugar a la resolución de un sistema simétrico en cada paso de linealización, lo que nos va a permitir un estudio comparativo de los métodos de resolución para problemas simétricos. En cambio, el método de Newton nos conduce a la resolución de uno no simétrico en cada paso, por lo que podremos realizar el mismo estudio para los métodos de resolución de problemas no simétricos. Por otro lado, podremos observar cuál de las dos estrategias es la más apropiada para problemas no lineales, cuando se aplican con esquemas elemento a elemento.

7.2.- PROBLEMA DE TRANSMISION DE CALOR NO LINEAL.

Consideraremos aquí el mismo problema planteado en (6.1.2) con la salvedad de que las conductividades de los materiales del horno se tomarán variables con la temperatura de la forma siguiente:

$$k_a = 72 + C_a u \quad (\text{material refractario})$$

$$k_b = 1.8 + C_b u \quad (\text{material aislante})$$

donde C_a y C_b son dos constantes que determinarán si el problema es fuertemente no lineal, o, por el contrario, si la no linealidad es débil. Habrá que tener en cuenta que cuanto más fuerte sea la no linealidad mayor dificultad se encontrará para la convergencia de los dos métodos antes citados. En esta aplicación hemos considerado $C_a = 10^{-2}$ y $C_b = 10^{-4}$.

Formulación Clásica.

Sea $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ el dominio formador por las paredes del horno y Γ_i ($i=0,1,2$) las fronteras del mismo. Se puede formular el problema de Transmisión de Calor no lineal de

forma clásica como sigue:

"Calcular $u(x_1, x_2)$ tal que verifique:

$$-\vec{\nabla} \cdot (k(u) \vec{\nabla} u) = f = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (7.2.1)$$

$$k \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_1 \quad (7.2.2)$$

$$-k \frac{\partial u}{\partial n} = h (u - u_\infty) \quad \text{sobre } \Gamma_2 \quad (7.2.3)$$

$$u = \bar{u} (x_1, x_2) \quad \text{sobre } \Gamma_0 \quad (7.2.4)$$

donde k, h, f y u_∞ se corresponden con la nomenclatura seguida en (6.1.2)".

Formulación Variacional.

Considerando una función test $v \in \mathbb{V}$, donde \mathbb{V} es el espacio:

$$\mathbb{V} = \{ v \in H^1(\Omega) / v|_{\Gamma_0} = 0 \}$$

Multiplicando (7.2.1) por v , integrando en Ω y aplicando la fórmula de Green, podemos establecer la siguiente formulación variacional:

" Hallar $u \in H^1(\Omega)$, $u|_{\Gamma_0} = \bar{u}(x_1, x_2)$, tal que:

$$\int_{\Omega} k(u) \vec{\nabla} u \cdot \vec{\nabla} v \, dx_1 \, dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u v \, d\sigma =$$

$$= \int_{\Omega} f v \, dx_1 \, dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u_{\infty} v \, d\sigma$$

(7.2.5)

$\forall v, v \in V$ ".

Consideremos ahora la resolución de este problema mediante el método del Punto Fijo y el método de Newton (ver *Winter* [46]), donde se realizará una linealización en cada paso en dimensión infinita. Aplicando el método del Punto Fijo se puede establecer la anterior formulación como sigue:

" Dado $u_n \in H^1(\Omega)$, $u_n|_{\Gamma_0} = \bar{u}(x_1, x_2)$,
hallar $u_{n+1} \in H^1(\Omega)$, $u_{n+1}|_{\Gamma_0} = \bar{u}(x_1, x_2)$, tal que:

$$\int_{\Omega} k(u_n) \vec{\nabla} u_{n+1} \cdot \vec{\nabla} v \, dx_1 \, dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u_{n+1} v \, d\sigma =$$

$$= \int_{\Omega} f v \, dx_1 \, dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u_{\infty} v \, d\sigma$$

(7.2.6)

En cambio para el método de Newton la formulación variacional resulta:

" Dado $u_n \in H^1(\Omega)$, $u_n|_{\Gamma_0} = \bar{u}(x_1, x_2)$,
hallar $u_{n+1} \in H^1(\Omega)$, $u_{n+1}|_{\Gamma_0} = \bar{u}(x_1, x_2)$, tal que:

$$\int_{\Omega} k(u_n) \vec{\nabla} u_{n+1} \cdot \vec{\nabla} v \, dx_1 dx_2 + \int_{\Omega} k'(u_n) (u_{n+1} - u_n) \vec{\nabla} u_n \cdot \vec{\nabla} v \, dx_1 dx_2 +$$

$$\int_{\Gamma_2} h u_{n+1} v \, d\sigma = \int_{\Omega} f v \, dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2} h u_{\infty} v \, d\sigma \quad (7.2.7)$$

siendo $k'(u_n) = \left. \frac{dk(u)}{du} \right|_{u=u_n}$.

Cálculo de las matrices elementales.

El tratamiento del problema mediante el método de los elementos finitos nos conduce a sistemas elementales lineales algebraicos en cada iteración de la forma:

$$\sum_{j=1}^s [A_{ij}^{\circ}(u_n^{\circ})] \{u_{n+1}^{\circ}\}_j = b_i^{\circ} \quad (7.2.8)$$

donde la matriz elemental de rigidez A^\bullet y el vector elemental de carga b^\bullet tienen expresiones diferentes según se utilice el método del Punto Fijo o el de Newton.

Utilizando el método del Punto Fijo resulta:

$$A_{ij}^\bullet = \int_{\Omega_\bullet} k(u_n^\bullet) \vec{\nabla}\psi_j^\bullet \cdot \vec{\nabla}\psi_i^\bullet dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2^\bullet} h \psi_j^\bullet \psi_i^\bullet d\sigma \quad (7.2.9)$$

$$b_i^\bullet = \int_{\Omega_\bullet} f \psi_i^\bullet dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2^\bullet} h u_\infty \psi_i^\bullet d\sigma$$

donde se puede observar que el problema resultante es simétrico.

Para el método de Newton queda:

$$A_{ij}^\bullet = \int_{\Omega_\bullet} k(u_n^\bullet) \vec{\nabla}\psi_j^\bullet \cdot \vec{\nabla}\psi_i^\bullet dx_1 dx_2 + \int_{\Omega_\bullet} k'(u_n^\bullet) \psi_j^\bullet \vec{\nabla}u_n^\bullet \cdot \vec{\nabla}\psi_i^\bullet dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2^\bullet} h \psi_j^\bullet \psi_i^\bullet d\sigma \quad (7.2.10)$$

$$b_i^\bullet = \int_{\Omega_\bullet} f \psi_i^\bullet dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma_2^\bullet} h u_\infty \psi_i^\bullet d\sigma + \int_{\Omega_\bullet} k'(u_n^\bullet) u_n^\bullet \vec{\nabla}u_n^\bullet \cdot \vec{\nabla}\psi_i^\bullet dx_1 dx_2$$

Condiciones de estabilidad del método de Jacobi.

El esquema explícito de Jacobi asociado al problema de transmisión de calor es:

$$W \frac{y_j^{n+1} - y_j^n}{\Delta\tau} - k \frac{y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n}{h^2} = 0$$

La condición de estabilidad en el sentido de *Von Neuman* es conocida y se obtiene siguiendo el mismo proceso que para la aplicación anterior, tomando W como la diagonal de la matriz del sistema A ,

$$W = \frac{2k}{h^2}$$

Del desarrollo de $|G(\xi)| \leq 1$, resulta la condición $\Delta\tau \leq 1$.

Los resultados obtenidos para la estabilidad del método de Jacobi sobre esquemas unidimensionales, sirven de referencia para la elección adecuada del parámetro $\Delta\tau$ en los problemas bidimensionales que se han considerado.

Para la resolución del problema se ha seguido la misma estrategia que en la aplicación (6.1.2), 3 procesos de refinamiento automático, hasta llegar a un mallado lo suficientemente fino como para iniciar el proceso adaptativo de resolución. Este proceso parte de la resolución del sistema obtenido para la malla anterior (528 ecuaciones) y consiste en 7 iteraciones adaptativas con coeficiente de refinamiento 0.8. La tolerancia exigida a la solución es de 10^{-9} , con un número máximo de linealizaciones igual a 10.

En las tablas (7.2.a) a la (7.2.h) se incluyen los resultados numéricos para cada una de las mallas. En la columna de *número de iteraciones* aparecen las iteraciones realizadas por el método elegido para cada uno de los procesos de linealización del problema. En las figuras (7.2.i) y (7.2.j) se comparan los tiempos de CPU totales consumidos en la resolución de los sistemas no lineales de cada malla por los diferentes métodos. La solución se representa en la figura (7.2.k).

MALLA 1

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO + G. C. P. DIAG.	528	106 76 50 13	134.8 97.3 64.8 18.6	18823
PUNTO FIJO + G. C. P. CHOL.	528	52 38 25 8	188.6 139.5 94.0 34.3	24967
PUNTO FIJO + G. C. P. CROUT	528	53 38 25 8	221.1 161.5 107.7 38.7	24967
NEWTON + JACOBI $\Delta T=1$, RELAJACION CADA 100 ITERAC.	528	2400 2400 1400 38	2794.8 2807.8 1667.7 43.3	21895
NEWTON + APROX. DE UN PASO $\Delta T=2$, RELAJACION ACADA 100 ITERAC.	528	603 518 343 8	2023.9 1743.9 1155.7 33.7	31111
NEWTON + APROX. DOS PASOS $\Delta T=2$, RELAJACION CADA 100 ITERAC.	528	604 520 344 8	3219.8 2777.8 1840.3 49.4	31111
NEWTON + G. C. E. NORMAL	528	>528 ⋮ }10 >528	—	21367
NEWTON + G. C. E. MINIMO	528	>528 ⋮ }10 >528	—	21367
NEWTON + G. C. R. MINIMO	528	381 413 270 8	431.3 469.8 306.7 11.3	21895
NEWTON + DOBLE G. C.	528	400 379 267 13	873.2 832.5 587.9 30.8	22423

Tabla 7.2.a

MALLA 2

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO + G. C. F. DIAG.	541	73 50 18	95.8 66.4 25.5	19291
PUNTO FIJO + G. C. F. CHOL.	541	35 24 9	132.6 93.0 38.9	25591
PUNTO FIJO + G. C. F. CROUT	541	35 24 9	152.0 106.2 43.9	25591
NEWTON + JACOBI	541	900 100 1	1081.1 122.1 3.5	22441
NEWTON + APROX. DE UN PASO	541	253 38 1	873.6 137.4 10.3	31891
NEWTON + APROX. DOS PASOS	541	251 39 1	1376.8 219.3 12.3	31891
NEWTON + G. C. E. NORMAL	—	—	—	—
NEWTON + G. C. E. MINIMO	541	>541 ⋮ >541 } 10	—	21900
NEWTON + G. C. R. MINIMO	541	328 111 0	384.9 131.3 3.4	22441
NEWTON + DOBLE G. C.	541	311 151 0	702.5 342.1 2.4	22982

Tabla 7.2.b

MALLA 3

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO + G. C. F. DIAG.	580	77 46 5	108.6 66.0 9.6	20695
PUNTO FIJO + G. C. F. CHOL.	580	37 23 3	150.5 96.2 18.6	27463
PUNTO FIJO + G. C. F. CROUT	580	37 23 3	174.0 109.9 20.4	27463
NEWTON + JACOBI	580	735 100 1	945.1 130.7 3.7	24079
NEWTON + APROX. DE UN PASO	580	300 28 1	1112.9 111.0 11.1	34231
NEWTON + APROX. DOS PASOS	580	300 30 1	1769.3 183.4 13.4	34231
NEWTON + G. C. E. NORMAL	—	—	—	—
NEWTON + G. C. E. MINIMO	—	—	—	—
NEWTON + G. C. R. MINIMO	580	332 92 0	412.3 116.5 3.6	24079
NEWTON + DOBLE G. C.	580	318 124 0	768.6 302.8 2.5	24659

Tabla 7.2.c

MALLA 4

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO + G. C. P. DIAG.	668	63 11	103.5 20.6	23863
PUNTO FIJO + G. C. P. CHOL.	668	31 6	148.6 35.4	31687
PUNTO FIJO + G. C. P. CROUT	668	31 6	169.0 39.4	31687
NEWTON + JACOBI	668	452 2	677.8 5.8	27775
NEWTON + APROX. DE UN PASO	668	174 1	750.8 12.8	39511
NEWTON + APROX. DOS PASOS	668	170 2	1169.1 22.4	39511
NEWTON + G. C. E. NORMAL	—	—	—	—
NEWTON + G. C. E. MINIMO	—	—	—	—
NEWTON + G. C. R. MINIMO	668	220 2	321.4 5.7	27775
NEWTON + DOBLE G. C.	668	241 0	678.0 2.9	28443

Tabla 7.2.d

MALLA 5

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO + G. C. F. DIAG.	711	85 50 0	147.8 88.3 3.3	25411
PUNTO FIJO + G. C. F. CHOL.	711	40 25 0	200.2 128.4 11.7	33751
PUNTO FIJO + G. C. F. CROUT	711	40 25 0	229.8 147.2 12.7	33751
NEWTON + JACOBI	711	1900 100	3032.0 162.5	29581
NEWTON + APROX. DE UN PASO	711	417 19	1908.9 95.4	42091
NEWTON + APROX. DOS PASOS	711	417 22	3040.5 168.9	42091
NEWTON + G. C. E. NORMAL	_____	_____	_____	_____
NEWTON + G. C. E. MINIMO	_____	_____	_____	_____
NEWTON + G. C. R. MINIMO	711	339 66	503.7 105.1	29581
NEWTON + DOBLE G. C.	711	338 114	1011.1 343.2	30292

Tabla 7.2.e

MALLA 6

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO +	850	98	204.7	30402
G. C. P. DIAG.		51	108.4	
PUNTO FIJO +	850	45	270.1	40404
G. C. P. CHOL.		25	154.6	
PUNTO FIJO +	850	45	311.4	40404
G. C. P. CROUT		25	176.8	
NEWTON +	850	1900	3647.5	35403
JACOBI		100	195.3	
NEWTON +	850	471	2611.9	50406
APROX. DE UN PASO		13	82.6	
NEWTON +	850	469	4161.1	50406
APROX. DOS PASOS		16	152.6	
NEWTON +	—	—	—	—
G. C. E. NORMAL				
NEWTON +	—	—	—	—
G. C. E. MINIMO				
NEWTON +	850	312	583.8	35403
G. C. R. MINIMO		36	71.4	
NEWTON +	850	350	1257.5	36253
DOBLE G. C.		55	200.7	

Tabla 7.2.f

MALLA 7

METODO	N ^o DE ECUAC.	N ^o DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO + G. C. F. DIAG.	1094	110 48 0	297.1 132.6 5.2	39173
PUNTO FIJO + G. C. F. CHOL.	1094	51 23 1	395.1 185.6 21.0	52097
PUNTO FIJO + G. C. F. CROUT	1094	51 24 0	452.7 222.2 19.7	52097
NEWTON + JACOBI	1094	2190 94	7235.2 237.3	45635
NEWTON + APROX. DE UN PASO	1094	570 15	4059.4 120.4	65021
NEWTON + APROX. DOS PASOS	1094	555 18	6304.4 218.6	65021
NEWTON + G. C. E. NORMAL	_____	_____	_____	_____
NEWTON + G. C. E. MINIMO	_____	_____	_____	_____
NEWTON + G. C. R. MINIMO	1094	321 33	780.0 84.1	45635
NEWTON + DOBLE G. C.	1094	360 47	1677.2 223.1	46729

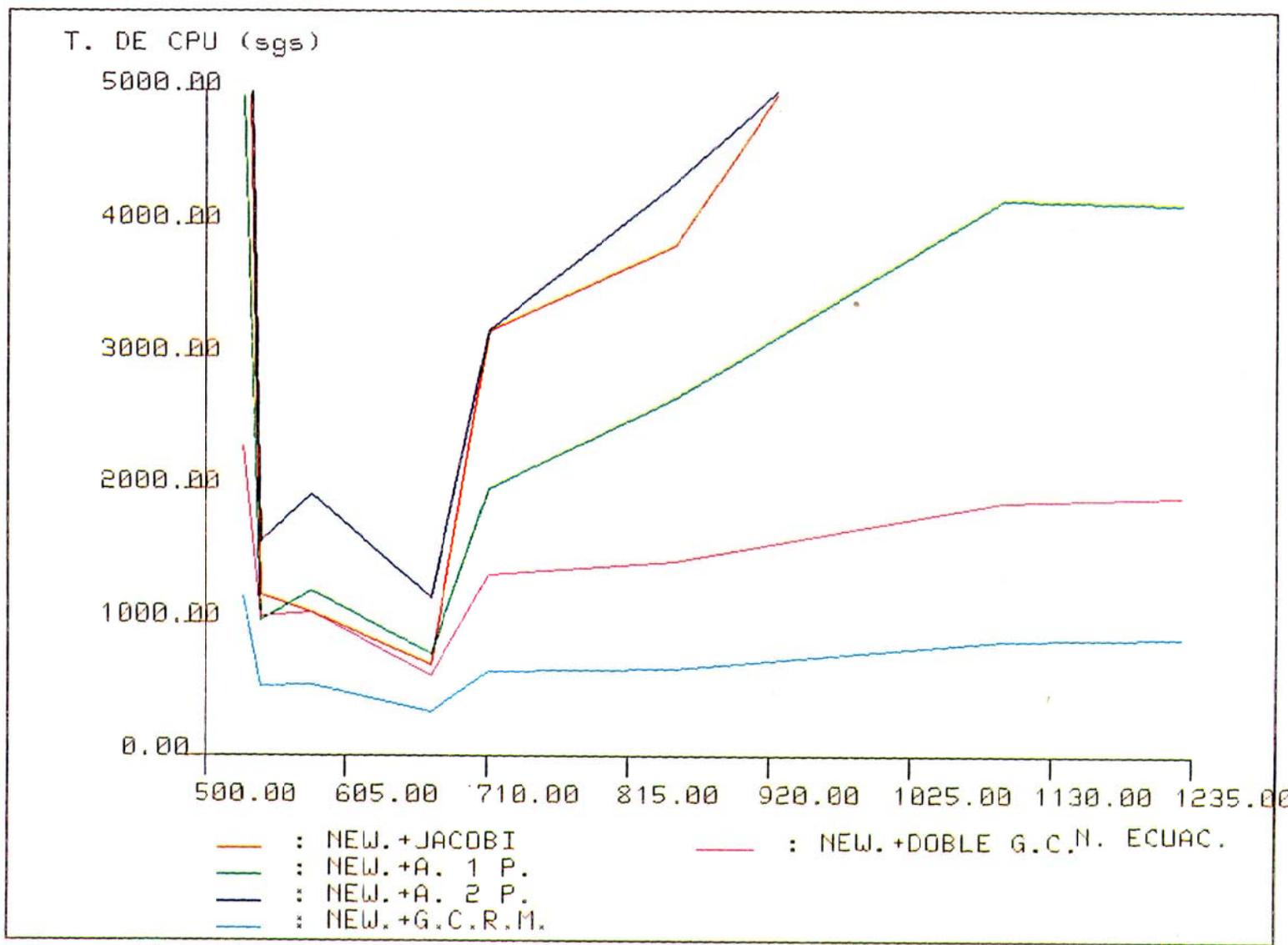
Tabla 7.2.g

MALLA 8

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITER.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
PUNTO FIJO + G. C. P. DIAG.	1227	104 50	316.7 155.3	43961
PUNTO FIJO + G. C. P. CHOL.	1227	49 22	427.3 200.3	58481
PUNTO FIJO + G. C. P. CROUT	1227	48 23	482.6 239.1	58481
NEWTON + JACOBI	1227	4533 200	12816.0 574.0	51221
NEWTON + APROX. DE UN PASO	1227	500 11	4050.2 104.5	73001
NEWTON + APROX. DOS PASOS	1227	500 15	6563.2 213.4	73001
NEWTON + G. C. E. NORMAL	_____	_____	_____	_____
NEWTON + G. C. E. MINIMO	_____	_____	_____	_____
NEWTON + G. C. R. MINIMO	1227	307 16	833.8 49.2	51221
NEWTON + DOBLE G. C.	1227	347 23	1821.5 125.7	52448

Tabla 7.2.h

Figura 7.2.1



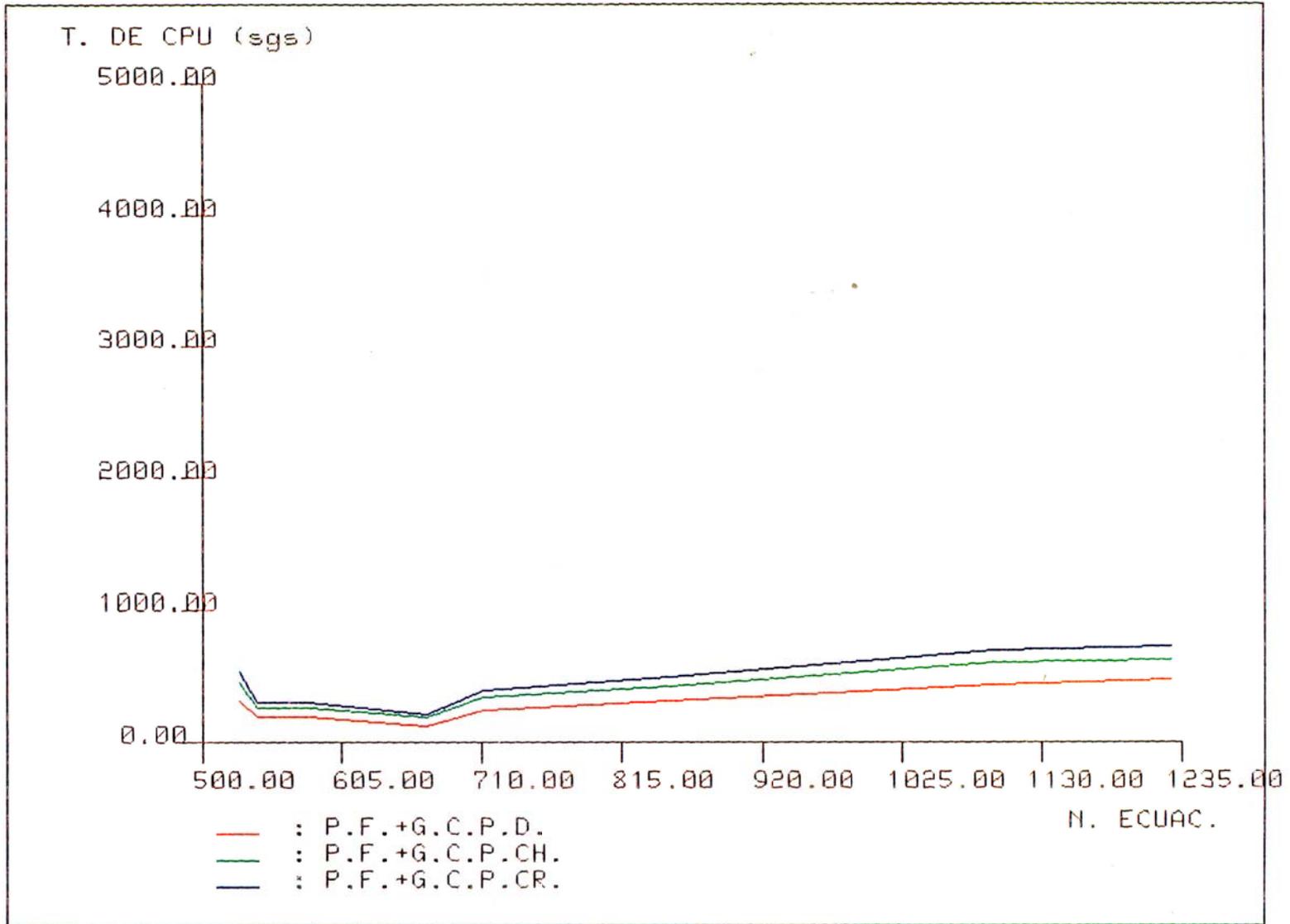
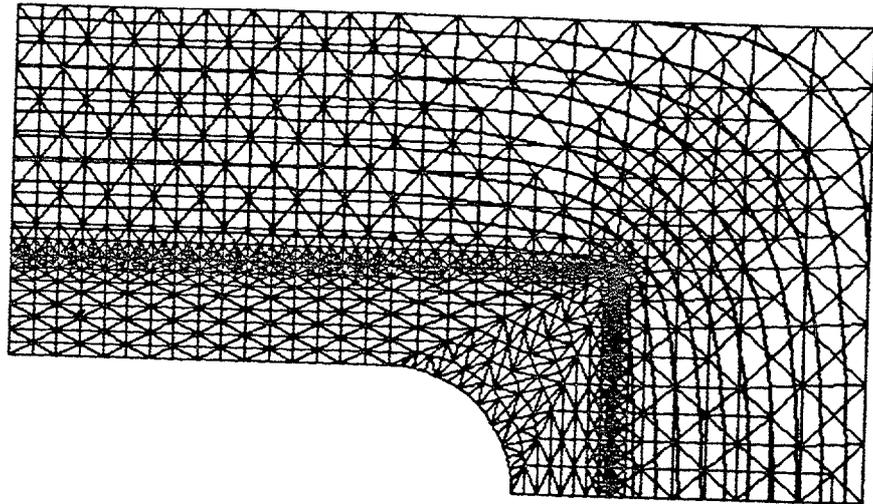


Figura 7.2.j



Problema de Transmision de Calor No Lineal
Distribucion de Temperaturas

Figura 7.2.k

Los resultados numéricos obtenidos para el problema no lineal, muestran claramente por un lado que el método del Punto Fijo, al estar asociado a matrices simétricas en cada linealización, ofrece ventajas frente al de Newton no sólo en cuanto a rapidez y a condicionamiento del sistema, sino también en el requerimiento de memoria. Además, se observa el efecto de los preconditionadores en el caso simétrico acelerando la convergencia. No obstante, el método de Newton ofrece una clara tendencia a realizar menos iteraciones de linealización que el del Punto Fijo, obteniéndose los mejores resultados para el caso no simétrico con el método del Residuo Mínimo como era de esperar dado su comportamiento en problemas lineales. Con todo, la utilización del método de Doble Gradiente Conjugado ha conseguido resultados satisfactorios, aunque en menor grado que los anteriores. Por otro lado, los métodos de la Ecuación Normal y del Error Mínimo no convergen desvirtuando no sólo el proceso de linealización sino toda la estrategia adaptativa. Respecto a los métodos de Regularización Parabólica, los resultados numéricos son menos satisfactorios que los de los métodos de Gradiente Conjugado, pero hay que destacar que decididamente que las Aproximaciones de Uno o Dos Pasos son más efectivas que el método de Jacobi, e incluso han realizado menos iteraciones en ciertas mallas del proceso que los métodos de Gradiente.

8. - CONCLUSIONES.

El trabajo realizado pretende transmitir de forma transparente la eficacia de la utilización de esquemas elemento a elemento en la resolución numérica de sistemas de ecuaciones, aportando las conclusiones que a continuación se exponen en base a las experiencias propias realizadas.

El método directo propuesto en el capítulo 2 para problemas unidimensionales, es sin duda más efectivo en cuanto a tiempo de cálculo que cualquier método iterativo de tipo gradiente o de regularización parabólica. Además se ha implementado optimizando el espacio de memoria requerido, debido al tratamiento informático de transformación propuesto, obteniendo una estructura en banda para la matriz del sistema. En los ensayos realizados tanto en sistemas simétricos como no simétricos se han obtenido resultados satisfactorios aún en problemas con singularidades (ver *Montenegro* [32]).

En cuanto a problemas bidimensionales, los ensayos realizados con problemas simétricos muestran una mayor eficacia del preconditionador Diagonal frente a los de Cholesky o Crout en cuanto a tiempo y memoria de ordenador, aunque se espera que en sistemas fuertemente mal condicionados se obtengan mejores resultados para estos

últimos, e incluso la no convergencia del Diagonal.

Respecto a problemas no simétricos, se observan mejores resultados aplicando métodos implícitos que con explícitos, aún a costa de un mayor requerimiento de memoria. No obstante, el Doble Gradiente Conjugado se presenta como un método que asegura la convergencia rápidamente a pesar del mal condicionamiento del sistema. La utilización del Residuo Mínimo con menor coste en tiempo de cálculo parece recomendable sólo cuando se dispone de una buena aproximación inicial y el sistema no está mal condicionado.

Los resultados numéricos obtenidos con el método Multimalla indican su eficacia en la resolución de sistemas de dimensión elevada. El suavizado mediante Gradiente Conjugado con Precondicionador Diagonal ha proporcionado resultados satisfactorios en sistemas simétricos, aunque en sistemas no simétricos podría pensarse en la combinación del método Multimalla con el Doble Gradiente Conjugado dotado de algún tipo de precondicionamiento para mejorar aún más el efecto de suavizado. El número de iteraciones del algoritmo Multimalla permanece constante, siendo el número de operaciones necesarias para la resolución de un sistema proporcional al orden del mismo. Esta propiedad no la poseen los otros métodos estudiados, siendo por tanto una ventaja a considerar cuando se resuelven sistemas de orden elevado.

El comportamiento de los métodos en problemas no

lineales, sugiere como más efectiva la utilización del método del Punto Fijo con el Gradiente Conjugado Precondicionado frente al de Newton. En la utilización del método de Newton, la combinación más efectiva se da con el método del Residuo Mínimo, o Doble Gradiente Conjugado si el problema tiene un carácter singular muy acusado.

En cuanto a posibles líneas futuras de continuación del tema analizado en este trabajo de tesis, son muchas las posibilidades que ofrece, algunas de las cuales son objeto de investigación en la actualidad.

El comportamiento de los preconditionadores de Cholesky y Crout frente al Diagonal en problemas tridimensionales posiblemente ofrezca mayores posibilidades para abordar fuertes singularidades. Además, la combinación del método Multimalla con estos puede dar lugar a mejores resultados no sólo en cuanto a convergencia sino también a coste de tiempo de cálculo.

Por otro lado, la investigación actual en el tema está encaminada hacia el desarrollo de preconditionadores en métodos de Gradiente Conjugado de aplicación a sistemas no simétricos, lo que conllevaría a una renovación del trabajo frente a las nuevas posibilidades.

El método de Regularización Parabólica también ofrece continuidad. La utilización de otros esquemas en diferencias junto con Aproximaciones de Uno o Dos Pasos, pueden conducir a la obtención de resultados satisfactorios.

9. - APENDICE.

9.1.- ASPECTOS COMPUTACIONALES.

La implementación en ordenador de los métodos presentados se ha realizado en lenguaje FORTRAN 77, en un VAX 11/750, por tanto, todos los resultados numéricos sobre tiempos de CPU obtenidos en las aplicaciones deben interpretarse de acuerdo con las características de este tipo de ordenadores.

Debido a la complejidad de los algoritmos y siguiendo la estructura clásica de los programas conocidos sobre el método de elementos finitos, se ha estructurado el proceso de resolución de un sistema de ecuaciones en varias subrutinas que se invocan entre sí y realizan los diferentes pasos del algoritmo. En las figuras (F.9.1), (F.9.2) y (F.9.3) se ilustran de forma global las distintas operaciones que componen el algoritmo de cada uno de los métodos propuestos. Se han separado los métodos de resolución propuestos para sistemas simétricos y para sistemas no simétricos. Puede comprobarse que los métodos con preconditionadores elemento a elemento utilizan un paquete más complejo de subrutinas que los métodos con preconditionador diagonal o que los de Gradiente Conjugado para sistemas no simétricos.

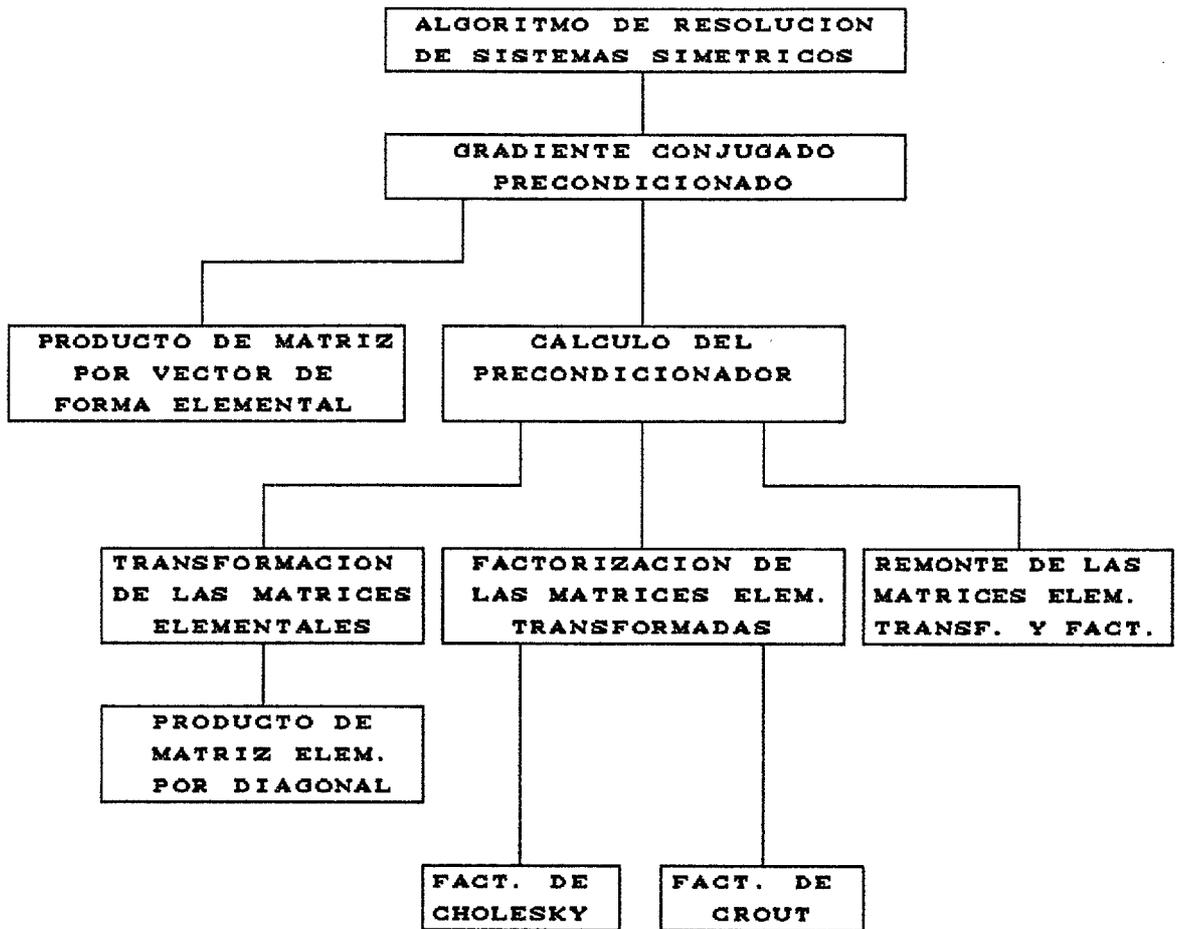


Figura (F.9.1).

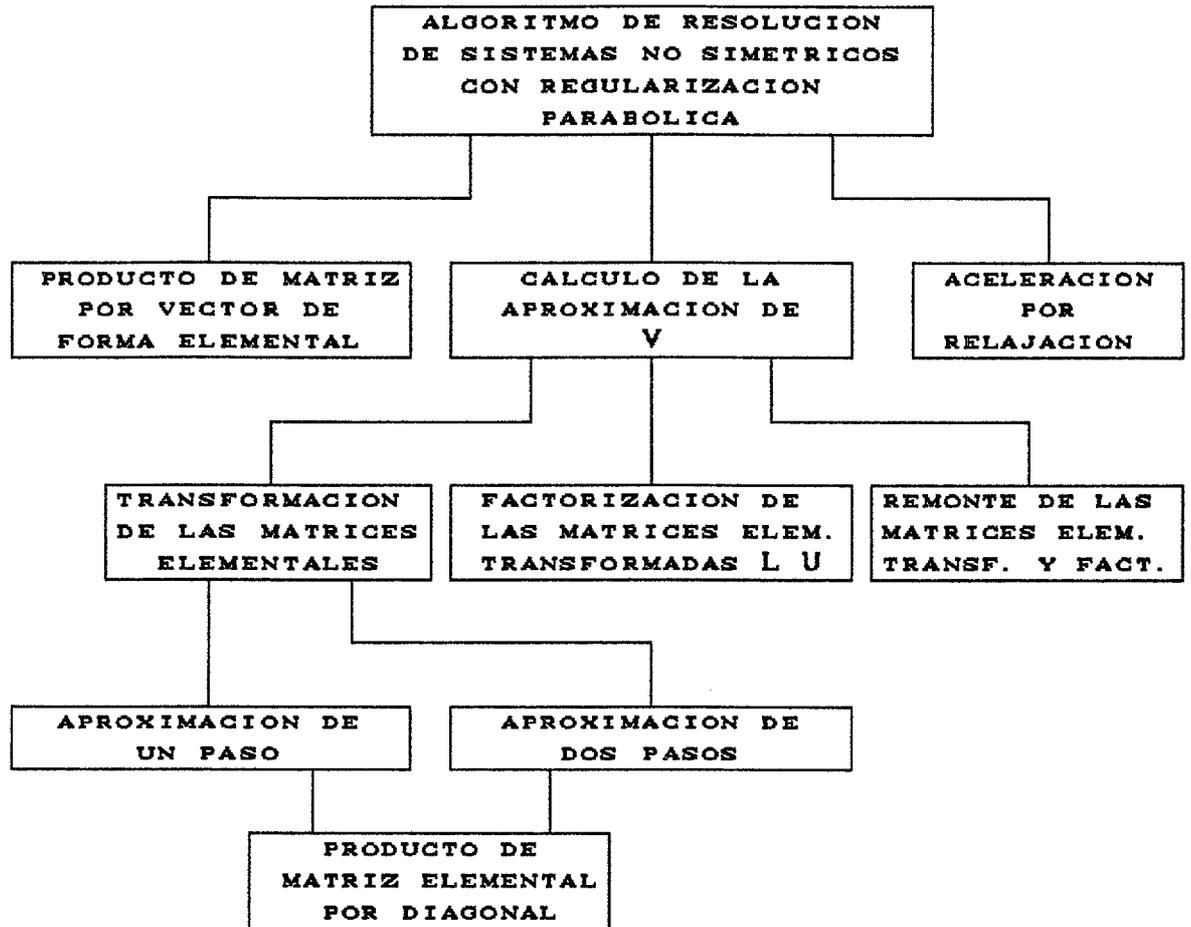


Figura (F.9.2)

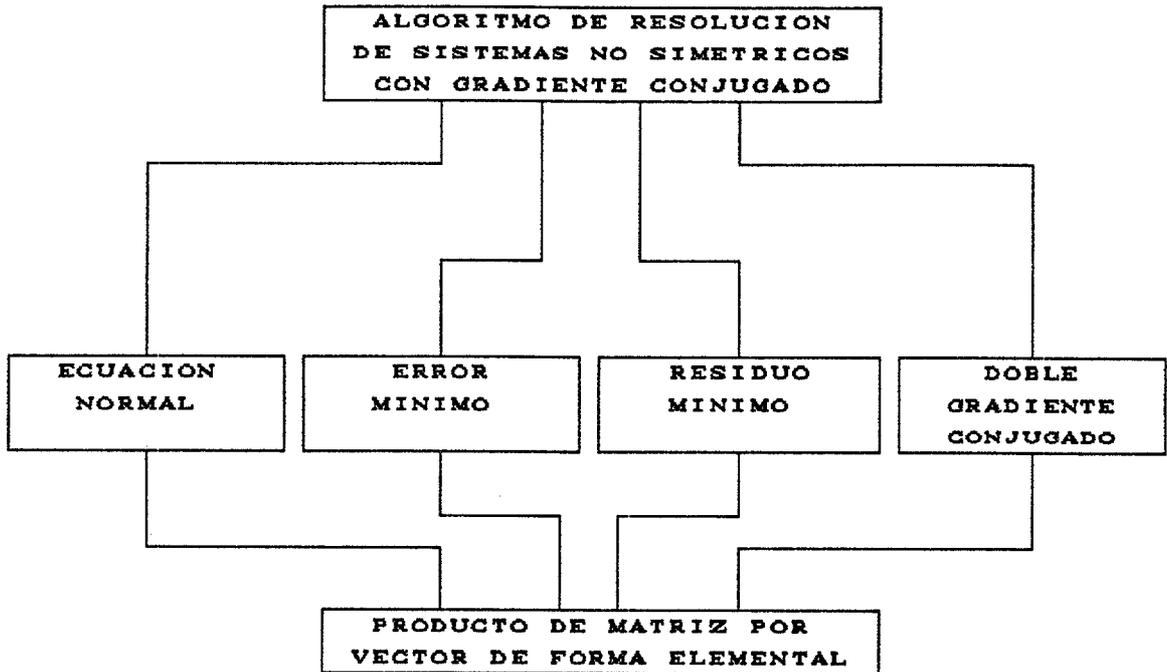


Figura (F.9.3)

Una operación muy frecuente es la del producto de la matriz del sistema (o de su traspuesta) por un vector. Este producto se realiza de la forma siguiente:

$$A v = \sum_{e=1}^{Nol} A^e v^e$$

como ya se expuso en capítulos anteriores. Esta es la operación básica de métodos como el de Gradiente Conjugado con Precondicionador Diagonal, Jacobi, o los métodos de Gradiente Conjugado para sistemas no simétricos.

Respecto a los métodos con preconditionadores elemento a elemento, aparecen otras operaciones matriciales además de la anterior. La primera es la transformación de las matrices elementales, en la cual se realiza el producto de cada matriz elemental por una matriz diagonal (en los casos de Regularización Parabóliza se multiplican por el parámetro $\Delta\tau$ de la discretización temporal) y la suma con la matriz identidad.

Una vez se han transformado las matrices elementales, se procede a realizar la factorización oportuna de cada matriz según el método que se halla elegido previamente:

Lo primero que debemos conocer es la posición donde comienza este bloque I_{m_e} , cuyo valor puede ser fijado al principio de la ejecución.

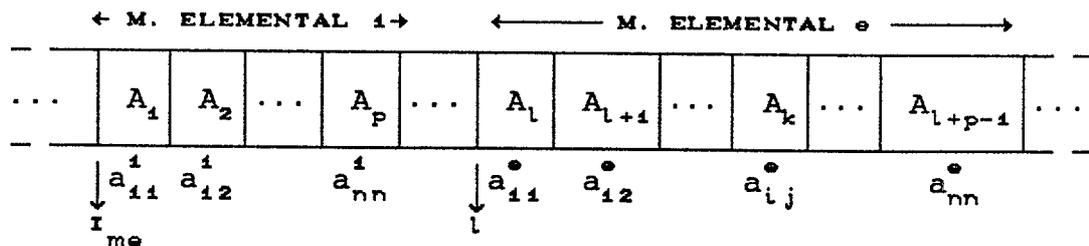
Localizado el bloque, estudiemos la forma en que está almacenada una matriz elemental $A^e \in \mathbb{R}^{n \times n}$:

$$A^e = \begin{bmatrix} a_{11}^e & a_{12}^e & \dots & a_{1n}^e \\ a_{21}^e & a_{22}^e & \dots & a_{2n}^e \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^e & a_{n2}^e & \dots & a_{nn}^e \end{bmatrix}$$

Si la matriz es simétrica sólo almacenamos:

$$\begin{array}{cccc} \boxed{a_{11}^e} & \boxed{a_{12}^e} & \dots & \boxed{a_{1n}^e} \\ a_{21}^e & \boxed{a_{22}^e} & \dots & a_{2n}^e \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^e & a_{n2}^e & \dots & a_{nn}^e \end{array}$$

tal que en el macrovector resulta:



donde la l -ésima posición de comienzo de los términos de la matriz del elemento Ω_e es:

$$l = p (e-1) + 1$$

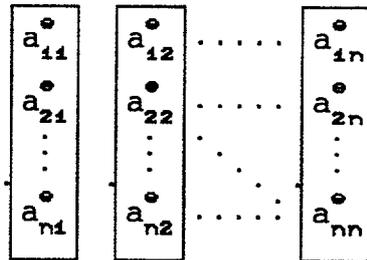
siendo p el número de términos de la matriz que hay que almacenar:

$$p = \frac{n (n+1)}{2}$$

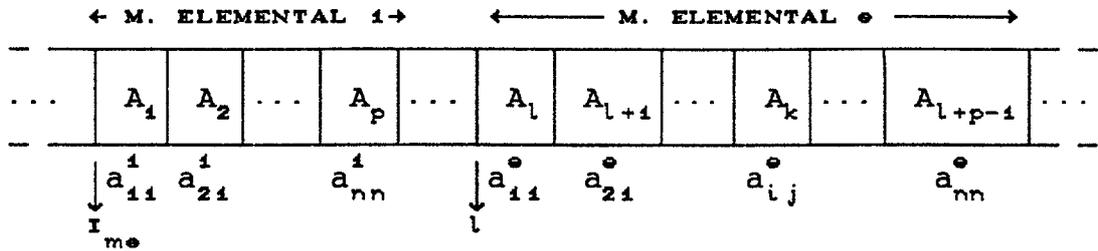
De esta forma, la posición k -ésima que ocupa un término cualquiera a_{ij} vendrá dado por la relación:

$$k = l - 1 + \frac{(j-1) j}{2} + i$$

Para el caso de matriz no simétrica será necesario almacenar todos los términos de la matriz elemental:



resultando el almacenamiento en el macrovector:



siendo los nuevos valores de p , l y k los siguientes:

$$p = n^2$$

$$l = p (e-1) + 1$$

$$k = l - 1 + (j-1) n + i$$

Conocida la posición de cualquiera de los términos de la matriz elemental del elemento Ω_e , podemos concretar algunas características comunes de las operaciones básicas:

- Puesto que todas las operaciones se realizan elemento a elemento, existe un bucle en elementos que los recorre ordenadamente de acuerdo con su numeración desde el primero hasta último incorporado según la etapa de refinamiento.

- Aparece siempre un bucle interior al de elementos, en caras por elemento, a fin de localizar la numeración global de los nodos del elemento cuya aportación al sistema de ecuaciones se está calculando.

- Finalmente, existe un bucle, también interior al de elementos, realizado en nodos por elemento, donde se localizan los términos de la matriz elemental y se operan adecuadamente sólo en el caso de que tengan aportación al sistema de ecuaciones (nótese que las condiciones de contorno tipo Dirichlet se introducen en este paso).

- Todas estas operaciones están gobernadas por la condición de simetría o no simetría de las matrices elementales, traduciéndose computacionalmente en un condicional que aparece en todas estas subrutinas.

10. - BIBLIOGRAFIA.

- [1] L. ADAMS
m-Step Preconditioned Conjugated Gradient Methods.
SIAM, J. Sci. Stat. Comput., Vol 6, No. 2, April 1985.
- [2] O. AXELSSON
Conjugate Gradient Type Methods for Unsymmetric and Inconsistent Systems of Linear Equations.
Linear Algebra and its Applications, V, 29, (1980).
- [3] O. AXELSSON, I. GUSTAFSSON
A Modified Upwind Scheme for Convective transport equations and the use of a Conjugate Gradient Method for the solution of Non-symmetric systems of equations.
J. Inst. Maths. Applics., V, 23, (1979).
- [4] I. BABUSKA, J. CHANDRA, J.E. FLAHERTY
Adaptive computational methods for partial differential equations.
SIAM. Filadelfia 1983.

- [5] I. BABUSKA, O.C. ZIENKIEWICZ, J. GAGO, E.R.A. OLIVEIRA
Accuracy estimates and adaptive refinements in finite element computations.
Editorial John Wiley & Sons. Gran Bretaña 1986.
- [6] N. BAKHVALOV
Métodos Numéricos.
Editorial Paraninfo, S.A., Madrid 1980.
- [7] E.B. BECKER, G.F. CAREY, J.T. ODEN
Finite elements. An introduction. (Volume I).
Editorial Prentice-Hall, Inc. New Jersey 1981.
- [8] R.L. BURDEN, J.D. FAIRES, A.C. REYNOLD
Numerical Analysis.
Editorial Prindle, Weber & Schmidt, Boston 1981.
- [9] G.F. CAREY, J.T. ODEN
Finite Elements. A second course. (Volume II).
Editorial Prentice-Hall, Inc., New Jersey 1983.
- [10] P.G. CIARLET
Introduction à L'Analyse numérique matricielle et à L'Optimisation.
Editorial Masson, Paris 1985.

- [11] L. FERRAGUT
NEPTUNO, un Sistema Adaptativo de Elementos Finitos.
Dpto. de Matemática Aplicada y Métodos Informáticos,
E.T.S.I. de Minas, Madrid 1987.
- [12] L. FERRAGUT
*Una solución al problema de la programación de los
métodos de elementos finitos autoadaptativos.*
Anales de Ingeniería Mecánica, Año 5, No. 1, Diciembre
1987.
- [13] N. GASTINEL
Análisis Numérico Lineal.
Editorial Reverté, S.A., Barcelona 1975.
- [14] J. GENET, F. PETRIZ
*Iteración defect-correction para un problema de
perturbación singular.*
Actas IX CEYDA, pag. 207-212, Valladolid 1986.
- [15] R. GLOWINSKI, H. KELLER, L. REINHART
*Continuation-Conjugate Gradient Methods for the least
square solution of nonlinear boundary value problems.*
Rapports de Recherche, No. 141, INRIA, Paris 1982.

- [16] G. H. GOLUB, G. A. MEURANT
Résolution numérique des grands systèmes linéaires.
Editorial Eyrolles, Paris 1983.
- [17] W. HACKBUSH
Multigrid Methods and Applications
Springer-Verlag, 1985
- [18] T. J. R. HUGHES
*Analysis of transient algorithms with particular
reference to stability behavior.*
Computational Methods in Transient Analysis (to
appear).
- [19] T. J. R. HUGHES, I. LEVIT, J. WINGET
*An Element-by-Element solution algorithm for problems
of Structural and Solid Mechanics.*
Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering;
Vol. 36, 241-254, (1983).
- [20] T. J. R. HUGHES, I. LEVIT, J. WINGET
*Element-by-Element implicit algorithms for Heat
Conduction.*
Journal of Engineering Mechanics, Vol 109, No. 2,
April 1983.

- [21] T. J. R. HUGHES, I. LEVIT, J. WINGET
Implicit unconditionally stable element-by-element algorithms for Heat Conduction Analysis.
J. Engrg. Mech. Div. ASCE (to appear).
- [22] T. J. R. HUGHES, I. LEVIT, J. WINGET, T. TEZDUYAR
New Alternating Direction Procedures in Finite Element Analysis Based Upon EBE Approximate Factorizations.
Computer Methods for Nonlinear Solid and Structural Mechanics, 75-109, AMD - Vol 54, ASME, New York 1983.
- [23] T. J. R. HUGHES, W. K. LIN
Implicit-explicit finite elements in transient Analysis: Stability Theory.
J. Appl. Mech. Vol 45, 371-374, 1978.
- [24] T. J. R. HUGHES, W. K. LIN
Implicit-explicit finite elements in transient Analysis: implementation and numerical examples.
J. Appl. Mech. Vol 45, 375-378, 1978.

- [25] T.J.R. HUGHES, A. RAEFSKY, A. MULLER, J. WINGET,
I. LEVIT
*A Progress Report on EBE solution procedures in Solid
Mechanics.*
Numerical Methods for Nonlinear problems, Vol 2,
18-26, Pineridge Press, Swansea, U.K. 1984.
- [26] D.A.H. JACOBS
*Generalization of the Conjugate Gradient Method for
solving Non-symmetric and complex systems of algebraic
equations.*
Central Electricity Research Laboratoires (1980).
- [27] A. JENNING, G.M. MALIK
*The solution of Sparse Linear Equations by the
Conjugate Gradient Method.*
International Journal for Numerical Methods in
Engineering, Vol 12, 141-158, 1978.
- [28] P. JOLY
*Resolutions de systemes lineaires non symetriques par
des methodes de gradient conjugue.*
Université P. et M. Curie.

- [29] D. S. KERSHAW
The incomplete Cholesky - conjugate gradient method for the iterative solution of systems of linear equations.
J. of Computational Physics, V, 26, (1978).
- [30] L. D. LANDAU, E. M. LIFSHITZ
Teoría de la Elasticidad
Reverté, 1969.
- [31] D. G. LUENBERGER
Introduction to Linear and Nonlinear Programming.
Addison-Wesley Publishing Company, 1973.
- [32] R. MONTENEGRO
Aplicación de los métodos de elementos finitos adaptativos a problemas de convección-difusión.
Tesis Doctoral, U.P.C., Las Palmas 1989.
- [33] R. MONTENEGRO, G. MONTERO
MEFA1, un sistema adaptativo de elementos finitos en una dimensión.
Dpto. de Matemática Aplicada, E.T.S.I.I. de U.P.C.,
Las Palmas 1987.

- [34] A. MULLER, T.J.R. HUGHES
Precondicionadores elemento-por-elemento y globales. Una perspectiva.
Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería, Vol 2, 1, 27-41, 1986.
- [35] B. NOUR-OMID, B.N. PARLETT
Element Preconditioning using Splitting Techniques.
SIAM, J. Sci. Stat. Comput., Vol 6, No. 3, 761-770, July 1985.
- [36] J. OLIVER, M. CASTELEIRO, E. OÑATE
Aplicaciones del método de los elementos finitos en ingeniería. Volumen 3 : Diseño por ordenador, Técnicas de cálculo numérico, Mecánica de fluidos y Problemas térmicos.
Universitat Politècnica de Catalunya Edicions, Barcelona 1986.
- [37] M. ORTIZ, P.M. PINSKY, R.L. TAYLOR
Unconditionally Stable Element-by-Element algorithms for dynamic problems.
Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg., Vol 36, 223-239, 1983.

- [38] A. RALSTON
Introducción al Análisis Numérico.
Editorial Limusa, S.A., Méjico 1978.
- [39] P.A. RAVIART, J.M. THOMAS
Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles.
Editorial Masson. Paris 1983.
- [40] M.C. RIVARA
A grid generator based on 4-triangles conforming. Mesh-refinement algorithms.
Int. Jour. for Numerical Methods in Eng. To appear.
- [41] M.C. RIVARA
Algorithms for refining triangular grids suitable for adaptive and multigrid techniques.
International Journal Numerical Methods in Engineering; Vol.20, 745-756, (1984).
- [42] M. SIBONY, J.-CL. MARDON
Analyse Numérique I. Systèmes Linéaires et non Linéaires.
Editorial Hermann, Paris 1982.

- [43] J. STOER, R. BURLIRSCH
Introduction to Numerical Analysis.
Editorial Springer-Verlag, New York 1980.
- [44] J.M. WINGET
Element-by-Element solution procedures for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis.
Ph. D. Thesis, California
Institute of Technology, Pasadena, California 1983.
- [45] J.M. WINGET, T.J.R. HUGHES
Solution algorithms for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis employing Element-by-Element iterative strategies.
Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering,
1985.
- [46] G. WINTER
Aplicación de los métodos de Quasi-Newton a problemas no lineales de transferencia de calor.
Tesis Doctoral , U.P.C., Las Palmas 1984.
- [47] Y.S. WONG
Iterative methods for problems in numerical analysis.
D. Phil. Th. Oxford University.

[48] O.C. ZIENKIEWICZ

El método de los elementos finitos.

Editorial Reverté, S.A. Barcelona 1980.

[49] O.C. ZIENKIEWICZ, R. LÖHNER

Accelerated 'Relaxation' or Direct Solution ? Future Prospects for FEM.

Int. Jour. for Numerical Methods in Eng., vol 21,1-11,
(1985)