

APLICACION DE ESQUEMAS EBE EN PROCESOS ADAPTATIVOS

GUSTAVO MONTERO GARCIA *
RAFAEL A. MONTENEGRO ARMAS *
GABRIEL WINTER ALTHAUS *
Y
LUIS FERRAGUT CANALS **

** Departamento de Matemática Aplicada de la
Universidad Politécnica de Canarias,
E.T.S. de Ingenieros Industriales,
4º Pabellón Seminario Tafira,
35194-Las Palmas*

*** Departamento de Matemática Aplicada y Métodos
Informáticos de la Universidad Politécnica de Madrid,
E.T.S. de Ingenieros de Minas,
c/Ríos Rosas 21, 28003-Madrid*

RESUMEN

Se presenta en este trabajo resultados de eficacia computacional de técnicas elemento a elemento de resolución de sistemas de ecuaciones asociados a métodos de elementos finitos adaptativos de refinamiento de mallado, en los problemas de elasticidad plana y convección-difusión en 2-D. Para el problema simétrico de elasticidad plana se exponen resultados comparativos obtenidos mediante el método de Gradiente Conjugado con preconditionadores Diagonal, Cholesky y Crout. El problema de convección-difusión no simétrico se aborda con métodos de Regularización Parabólica combinados con la técnica de Aceleración por Relajación y métodos derivados del Gradiente Conjugado. Asimismo se presenta la experiencia de aplicar el método Multimalla considerando esquemas elemento a elemento en las iteraciones de suavizado y en la resolución del sistema en la primera malla. Este trabajo está basado en el estudio desarrollado en Montero¹⁶.

SUMMARY

This paper compares results of computational efficacy from element by element techniques for solving equations systems which arise from the adaptive finite element methods, such as plane elasticity and convection diffusion problems in 2-D. Comparative results are exposed for the symmetric problem of plane elasticity using the Conjugate Gradient method with Diagonal, Cholesky and Crout preconditioners. For the non symmetric problem of convection diffusion, Parabolic Regularization with accelerated relaxation and several Gradient Conjugate methods are applied. The experience from solving these problems with Multigrid method using element by element schemes for smoothing iterations and to solve the first grid system, is showed. This work is based in the study developed in Montero¹⁶.

Recibido: Mayo 1989

INTRODUCCION

Los métodos adaptativos de refinamiento de mallados de elementos finitos generan 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.

En la utilización de métodos adaptativos de refinamiento de mallados, los nuevos elementos introducidos en cada malla destruyen la estructura de la matriz de rigidez, lo que dificulta la utilización de métodos directos que requieren una importante capacidad de memoria.

Una alternativa a este problema consiste en la aplicación de métodos iterativos EBE que no forman la matriz de rigidez y aprovechan la solución de la malla anterior como aproximación inicial. Las operaciones matriciales que gobiernan el algoritmo 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, siendo además la eficacia del método independiente de la numeración de los nodos.

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, siendo ello muy interesante al abordar problemas de gran rango.

METODOS ELEMENTO A ELEMENTO

Exponemos de forma resumida distintos métodos implementados elemento a elemento considerados en este trabajo.

Gradiente Conjugado Precondicionado (GCP)

Sea $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ una matriz simétrica definida positiva, no singular. El problema:

$$Ax = b \quad (1)$$

$b \in \mathbb{R}^m$, $x \in \mathbb{X}$, $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^m$, es bien conocido que equivale a la resolución del problema:

$$J(x) = \inf_{\forall v \in \mathbb{X}} J(v) \quad (2)$$

siendo el funcional considerado en el método de Gradiente Conjugado,

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

Con el objetivo de acelerar la convergencia, el problema (1) se transforma en el equivalente,

$$B^{-1}Ax = B^{-1}b \quad (3)$$

eligiendo la matriz de preconditionamiento B tal que la matriz del sistema (3) tenga un número de condicionamiento de menor valor que el de la matriz A de (1).

El algoritmo del método GCP presenta la forma siguiente:

Primer paso: Inicialización.

$$\begin{aligned} n &= 0 \\ r_o &= b - Ax_o \\ p_o &= z_o = B^{-1}r_o \end{aligned}$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo.

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{r_n^T z_n}{p_n^T A p_n} \\ x_{n+1} &= x_n + \alpha_n p_n \\ r_{n+1} &= r_n - \alpha_n A p_n \end{aligned}$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\begin{aligned} &\| r_{n+1} \| < \delta \| r_o \| ? \\ &\text{si: detener el proceso.} \\ &\text{no: continuar.} \end{aligned}$$

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$\begin{aligned} z_{n+1} &= B^{-1}r_{n+1} \\ \beta_{n+1} &= \frac{r_{n+1}^T z_{n+1}}{r_n^T z_n} \\ p_{n+1} &= z_{n+1} + \beta_{n+1} p_n \\ &\text{volver al segundo paso.} \end{aligned}$$

Precondicionadores

El preconditionador más sencillo es el propuesto por Jennings¹², el cual consiste en elegir B como la matriz diagonal de A :

$$B = D_s(A) \quad (4)$$

Entre los preconditionadores EBE propuestos en Hughes⁹ y Muller¹⁷, se consideran el de Cholesky:

$$B = D_s(A)^{\frac{1}{2}} \left(\prod_{e=1}^{Nel} L_p(\bar{A}^e) \right) \left(\prod_{e=Nel}^1 L_p^T(\bar{A}^e) \right) D_s(A)^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

siendo

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

y el de Crout:

$$B = D_s(A)^{\frac{1}{2}} \left(\prod_{e=1}^{Nel} L_p(\bar{A}^e) \right) \left(\prod_{e=1}^{Nel} D_p(\bar{A}^e) \right) \left(\prod_{e=Nel}^1 L_p^T(\bar{A}^e) \right) D_s(A)^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

teniendo $\bar{A}^e$ el mismo significado. Las matrices L_p , D_p y L_p^T corresponden a las respectivas factorizaciones.

Métodos de Gradiente Conjugado para sistemas no simétricos

A continuación se presentan métodos basados en el Gradiente Conjugado recogidos en Joly¹³.

Ecuación Normal

Consiste en aplicar el método del Gradiente Conjugado clásico al sistema:

$$A^T A x = A^T b \quad (7)$$

equivalente a la minimización del funcional,

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

de la cual se obtiene

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

y de la relación de conjugación

$$p_{n+1}^T(A^T A)p_n = 0$$

el otro parámetro que interviene en el algoritmo,

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

Error Mínimo

Basado en la idea anterior, Kershaw* aplica el método del Gradiente Conjugado clásico al sistema

$$AA^T y = b, \text{ siendo } x = A^T y \quad (8)$$

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

$$p_{n+1}^T p_n = 0$$

de donde:

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

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

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

resultando:

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

Residuo Mínimo

De la minimización de la funcional:

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

se obtiene

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

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

$$p_{n+1}^T (A^T A) p_n = 0$$

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

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

Doble Gradiente Conjugado

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

$$\begin{bmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix} \quad (9)$$

De la minimización del funcional

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

y de la misma relación de conjugación del Método del Gradiente Clásico, se obtiene el algoritmo:

Primer paso: Inicialización.

$$\begin{aligned} n &= 0 \\ r_o &= b - Ax_o \\ p_o &= \bar{p}_o = \bar{r}_o = r_o \end{aligned}$$

Segundo paso: Solución corregida y residuo.

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{\bar{r}_n^T r_n}{\bar{p}_n^T A p_n} \\ x_{n+1} &= x_n + \alpha_n p_n \\ r_{n+1} &= r_n - \alpha_n A p_n \\ \bar{r}_{n+1} &= \bar{r} - \alpha_n A^T \bar{p}_n \end{aligned}$$

Tercer paso: Verificación de convergencia.

$$\begin{aligned} &\delta \| r_{n+1} \| < \delta \| r_o \| ? \\ &\text{si: detener el proceso.} \\ &\text{no: continuar.} \end{aligned}$$

Cuarto paso: Dirección conjugada corregida.

$$\begin{aligned} \beta_{n+1} &= \frac{\bar{r}_{n+1}^T r_{n+1}}{\bar{r}_n^T r_n} \\ p_{n+1} &= r_{n+1} + \beta_{n+1} p_n \\ \bar{p}_{n+1} &= \bar{r}_{n+1} + \beta_{n+1} \bar{p}_n \\ &\text{volver al segundo paso.} \end{aligned}$$

Métodos de Regularización Parabólica

Consisten en plantear la ecuación diferencial asociada al problema elíptico del sistema original⁶:

$$\begin{aligned} W \frac{dy}{d\tau} + A y &= H(\tau)b \\ y(0) &= y_0 \end{aligned} \quad (10)$$

siendo $x = \lim_{\tau \rightarrow \infty} y(\tau)$ y $W = D_s(A)$.

Planteamos el esquema en diferencias general

$$\begin{aligned} (W + \theta \Delta\tau A)y_{n+1} &= [W - (1 - \theta)\Delta\tau A]y_n + \Delta\tau b \\ y_n &= y_0 \quad \text{para } n = 0 \quad (\theta \in \mathbb{R}; y_{n+1}, y_n \in \mathbb{R}^m) \end{aligned}$$

Método de Jacobi

Para $\theta = 0$, obtenemos el esquema explícito de Jacobi,

$$y_{n+1} - y_n = \Delta\tau W^{-1}r_n \quad (11)$$

Métodos implícitos

Para $\theta = 1$, obtenemos el esquema implícito:

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

siendo

$$\begin{aligned} r_n &= b - A y_n \quad (\text{vector residuo}) \\ V &= (I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A W^{-\frac{1}{2}})^{-1} \end{aligned}$$

La aproximación de la matriz V puede realizarse en un paso,

$$\begin{aligned} V &\simeq V_1 = \prod_{e=1}^{Nel} V_1^e = V_1^1 V_2^2 \dots V_1^{Nel} \\ V_1^e &= (I + \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} A^e W^{-\frac{1}{2}})^{-1} \\ y_{n+1} - y_n &= \Delta\tau W^{-\frac{1}{2}} \left(\prod_{e=1}^{Nel} V_1^e \right) W^{-\frac{1}{2}} r_n \end{aligned} \quad (12)$$

o en dos pasos,

$$V \simeq V_2 = \left(\prod_{e=1}^{Nel} V_2^e \right) \left(\prod_{e=Nel}^1 V_2^e \right)$$

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

$$y_{n+1} - y_n = \Delta \tau W^{-\frac{1}{2}} \left(\prod_{e=1}^{Nel} V_2^e \right) \left(\prod_{e=Nel}^1 V_2^e \right) W^{-\frac{1}{2}} r_n \quad (13)$$

Estos métodos se demuestran que son incondicionalmente estables si lo es el algoritmo elemental.

Aceleración por Relajación

Es posible²² acelerar el proceso haciendo periódicamente un ajuste de gran magnitud en la dirección del vector Δy

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

Planteando el esquema general en diferencias de la forma,

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

el parámetro de búsqueda ω_n se puede determinar a partir de la minimización de la función potencial:

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

obteniéndose,

$$\omega_n = \frac{\Delta y_n^T r_n}{\Delta y_n^T A \Delta y_n} \quad (14)$$

ASPECTOS COMPUTACIONALES

Todos los productos de matriz por vector se realizan utilizando únicamente las matrices elementales:

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

También se efectúan así las operaciones de factorización y remonte correspondientes al producto de la matriz de preconditionamiento inversa por un vector $B^{-1}p$, según las expresiones (5) y (6).

El almacenamiento de las matrices elementales en el caso simétrico se hace por bloques como se indica en la Figura 1.

Dichos bloques se almacenan en un macrovector Figura 2.

Para el caso no simétrico, se muestran los bloques en la Figura 3, colocándose consecutivamente en el macrovector de la misma forma que en el caso simétrico.

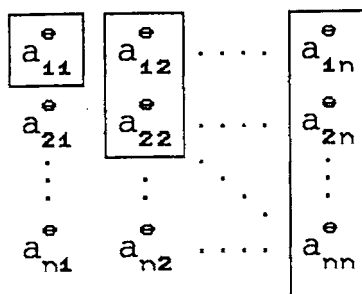


Figura 1. Matriz elemental simétrica.

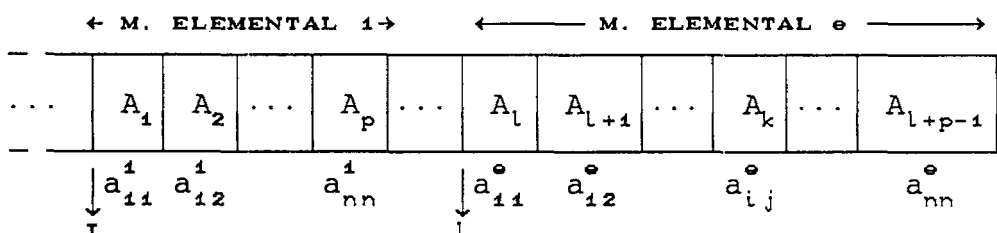


Figura 2. Almacenamiento en el macrovector.

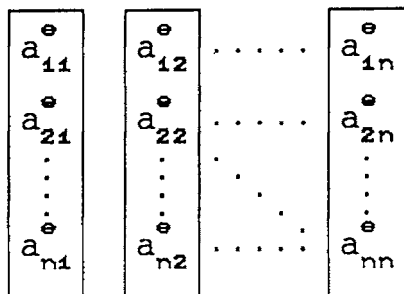


Figura 3. Matriz elemental no simétrica.

Algunas características comunes a las operaciones básicas en las que interviene una matriz elemental son:

- 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 el último incorporado según la etapa de refinamiento.
- Aparece siempre un bucle interior al de elementos, en caras por elementos, 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 (adviértase que las condiciones tipo Dirichlet se introducen en este paso).
- Todas estas operaciones están gobernadas por la simetría de las matrices elementales, lo que computacionalmente se traduce en un condicional.

Las subrutinas que conforman estos métodos se han introducido en el código adaptativo NEPTUNO² y todos los resultados en tiempos de CPU están referidos a la utilización de un VAX 11/750.

PROBLEMA DE ELASTICIDAD PLANA

Se ha considerado una placa rectangular de $500 \times 600 \text{ cm}^2$ con una fractura de 100 cm situada transversalmente en la mitad de uno de 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. Figura 4.

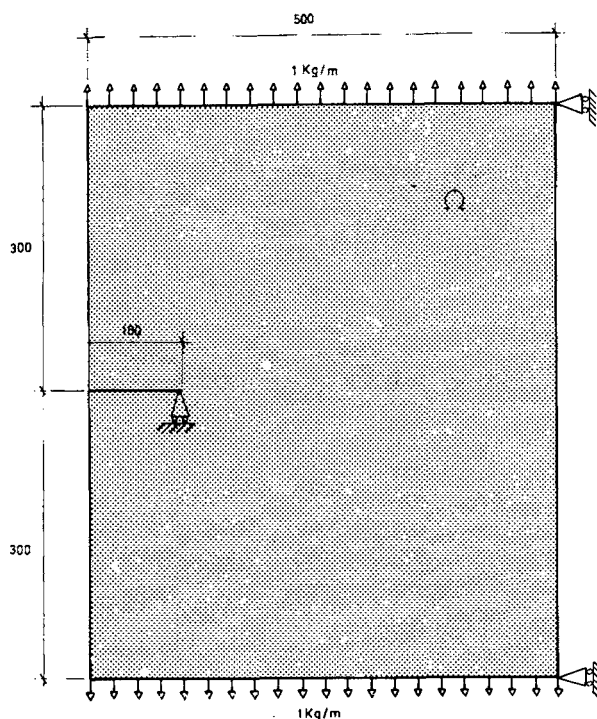


Figura 4. Problema de elasticidad. Dominio y condiciones de contorno.

La formulación del problema es:

$$\sum_{j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(\mathbf{u}) = 0 \quad \text{en } \Omega \quad i = 1, 2$$

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

$$\sum_{j=1}^2 \sigma_{ij}(\mathbf{u}) n_j = 1 \quad \text{en } \Gamma_1 \quad i = 1, 2$$

siendo u los desplazamientos a calcular.

Para la resolución, partimos de un mallado inicial de 5 elementos, del cual obtenemos una malla más fina realizando 4 procesos de refinamiento automático. A continuación se ha aplicado 7 iteraciones de refinamiento con el método de elementos finitos adaptativo con coeficiente de refinamiento de 0.9 (ver Montenegro¹⁵). La tolerancia que se ha exigido a la solución de cada sistema es 10^{-9} . En la Tabla I se presentan los resultados numéricos obtenidos para el método del Gradiente Conjugado con los diferentes preconditionadores utilizados. Para cada sistema resultante del 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 la Figura 5 se representan las deformaciones obtenidas en la placa a una escala ampliada.

TIPO DE PRECONDICIONADOR	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITERAC.	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 I. Resultados para los diferentes preconditionadores.

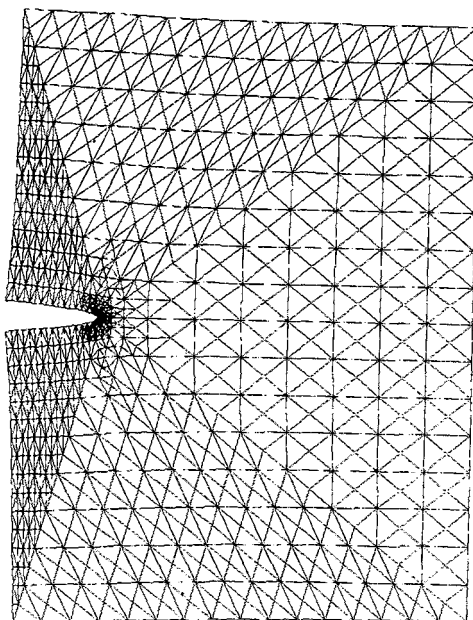


Figura 5. Placa deformada.

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITERAC.	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 II. Resultados comparativos del método Multimalla y del GC preconditionador Diagonal.

Para el estudio de la efectividad del método Multimalla, resolvemos este problema 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 introducidas las condiciones de contorno y se ha 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 II.

PROBLEMA DE CONVECCION-DIFUSION

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.

Para velocidades altas del fluido aparecen capas límites que originan singularidades en la solución. Por tanto, se utiliza 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 el método de difusión artificial, el problema que se plantea es no simétrico.

Se utilizan los métodos de Regularización Parabólica con aceleración por relajación aplicada de forma periódica, teniéndose en cuenta las condiciones de estabilidad del método de Jacobi para este problema, y 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 se aplicará el método multimalla utilizando el Doble Gradiente como suavizado.

El dominio Ω en estudio es de forma cuadrada con 100 cms de lado, como se indica en la Figura 6.

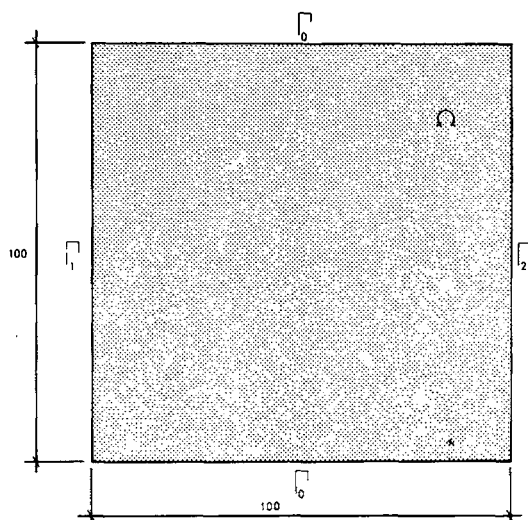


Figura 6. Problema de convección-difusión. Dominio de Estudio.

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:

$$v_1 = C_v(y - \frac{1}{2})(x - x^2)$$

$$v_2 = C_v(\frac{1}{2} - x)(y - y^2)$$

siendo C_v un factor de amplificación de la velocidad.

La formulación del problema es,

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot (k \nabla \mathbf{u}) = f$$

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

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

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

siendo $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ la frontera del dominio Ω y u la temperatura en Ω .

Aplicando el método de difusión artificial, las matrices elementales resultan no simétricas:

$$A_{ij}^e = \int_{\Omega_e} (\mathbf{v} \cdot \nabla \psi_j^e) \psi_i^e d\Omega + \int_{\Omega_e} [(k + k') \nabla \psi_j^e] \cdot \nabla \psi_i^e d\Omega$$

en consecuencia la matriz del sistema global es también no simétrica.

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

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

donde k es la conductividad térmica del fluido, v el módulo del vector $\mathbf{v}$, 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 es la diagonal de A .

El análisis de estabilidad de este esquema en el sentido de Von Neuman permite obtener una cota de $\Delta \tau$,

$$\Delta \tau \leq \text{Min} \left(\left(\frac{2k}{vh} + \gamma \right)^2, 1 \right)$$

que para el valor utilizado del parámetro contracorriente,

$$\gamma = Cth^2 \left(\frac{P_e}{2} \right) - \frac{2}{P_e}$$

siendo P_e el número de Peclet, se reduce a:

$$\Delta \tau \leq 1$$

Esta condición obtenida de un estudio en un esquema unidimensional con coeficientes constantes debe ser considerada a modo indicativo en la elección de los valores de $\Delta\tau$ en aplicaciones bidimensionales con coeficientes variables.

En esta aplicación hemos considerado de interés el estudio del comportamiento de los diferentes métodos para distintos valores del campo de las velocidades, empezando por un problema con un coeficiente $C_v = 100$, que dará lugar a soluciones suaves que no presentan fuertes singularidades y sistemas a resolver no mal condicionados.

La estrategia de refinamiento seguida en este caso consiste en partir de un mallado de 8 elementos, 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} .

La Tabla III muestra los resultados numéricos obtenidos con los métodos propuestos para la resolución de sistemas no simétricos, para este caso.

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 a 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

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITERAC.	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
ERROR MINIMO	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

Tabla III. Resultados obtenidos para $C_v = 100$.

METODO	N° DE ECUAC.	N° DE ITERAC.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
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
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

Tabla III.CONT. Resultados obtenidos para $C_v = 100$.

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITERAC.	TIEMPO DE CPU (seg)	MEMORIA OCUPADA
APROXIMACION DE DOS PASOS $\Delta\tau = 2.$	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
RELAJACION CADA 10 ITERACIONES				

Tabla III.CONT. Resultados obtenidos para $C_v = 100$.

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} .

La Tabla IV muestra los resultados numéricos obtenidos para $C_v = 1000$.

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 la Tabla V.

Este mismo problema con $C_v = 100$ se ha resuelto mediante otra estrategia de refinamiento para obtener 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 han aplicado entonces cuatro etapas de refinamiento adaptativo con un coeficiente de 0.2.

En la Tabla VI se muestran los resultados obtenidos.

Las figuras que representan las respectivas distribuciones de temperatura para cada uno de los problemas resueltos se muestran en Montero¹⁶.

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.

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITERAC.	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 ERROR MINIMO	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 RESIDUO MINIMO	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
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 IV. Resultados obtenidos para $C_v = 1000$.

METODO	N° DE ECUAC.	N° DE ITERAC.	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
RESIDUO MINIMO	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

Tabla V. Resultados obtenidos para $C_0 = 10000$. *El proceso de refinamiento se desvirtúa debido al error cometido en la solución, obteniéndose mallados diferentes.

METODO	Nº DE ECUAC.	Nº DE ITERAC.	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 V.CONT. Resultados obtenidos para $C_v = 10000$.

Para el problema simétrico, nuestra experiencia muestra una mayor eficacia del preconditionador Diagonal frente a los de Cholesky o Crout en cuanto a tiempo y memoria de ordenador, aunque es de esperar que en sistemas fuertemente mal condicionados o en problemas tridimensionales con mayor número de incógnitas, se obtengan mejores resultados para estos últimos.

Respecto al problema no simétrico, se observan mejores resultados para los métodos implícitos frente a los 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 en caso de disponer de una buena aproximación inicial y en sistemas no mal condicionados.

Los resultados numéricos obtenidos con el método Multimalla indican su eficacia

METODO	Nº DE ECUACION	Nº DE ITERACION	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 VI. Resultados comparativos del método Multimalla y del Doble Gradiente Conjugado.

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 preconditionamiento 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 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 éstos puede dar lugar a mejores resultados en cuanto a convergencia y coste de tiempo de cálculo, sobretodo si se utilizan ordenadores vectoriales y/o paralelos. Por otro lado, la investigación sobre desarrollo de preconditionadores en métodos de Gradiente Conjugado de aplicación a sistemas no simétricos puede conducir a métodos aún más eficaces que los actuales.

REFERENCIAS

1. O. Axelsson. "Conjugate Gradient Type Methods for Unsymmetric and Inconsistent Systems of Linear Equations", *Linear Algebra and its Applications*, Vol. V, No. 29, (1980).
2. L. Ferragut, "NEPTUNO, un Sistema Adaptativo de Elementos Finitos", Dpto. de Matemática Aplicada y Métodos Informáticos, E.T.S.I. de Minas, Madrid, España, (1987).
3. L. Ferragut, "Una solución al problema de la programación de los métodos de elementos

- finitos autoadaptativos", *Anal. Ing. Mec.*, Año 5, No. 1, (1987).
4. W. Hackbush, "*Multigrids Methods and Applications*", Springer-Verlag, (1985).
 5. T.J.R. Hughes, "Analysis of transient algorithms with particular reference to stability behavior", *Comput. Meth. Trans. Anal.* (a aparecer).
 6. T.J.R. Hughes, I. Levit y J. Winget, "An Element-by-Element solution algorithm for problems of Structural and Solid Mechanics", *Comp. Meth. Appl. Mech. and Engng.*, Vol. **36**, pp. 241-254, (1983).
 7. T.J.R. Hughes, I. Levit y J. Winget, "Element-by-Element implicit algorithms for Heat Conduction", *J. of Engng. Mech.*, Vol. **109**, No. 2, April (1983).
 8. T.J.R. Hughes, I. Levit y J. Winget, "Implicit unconditionally stable element-by-element algorithms for Heat Conduction Analysis", *J. Engng. Mech. Div. ASCE*, (a aparecer).
 9. T.J.R. Hughes, I. Levit y J. Winget, T. Tezduyar, "New Alternating Direction Procedures in Finite Element Analysis Based Upon EBE Approximate Factorizations", *Comp. Meth. Nonlinear Sol. and Struct. Mech.*, pp. 75-109, AMD, Vol. **54**, ASME, New York, (1983).
 10. T.J.R. Hughes, A. Raefsky, A. Muller, J. Winget e I. Levit. "A Progress Report on EBE solution procedures in Solid Mechanics", *Num. Meth. Nonlinear Prob.*, Vol. **2**, pp. 18-26, Pineridge Press, Swansea, U.K., (1984).
 11. D.A.H. Jacobs, "Generalization of the Conjugate Gradient Method for solving Non-symmetric and complex systems of algebraic equations", *Central Electricity Research Laboratories*, (1980).
 12. A. Jennings y G.M. Malik, "The solution of Sparse Linear Equations by the Conjugate Gradient Method", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **12**, pp. 141-158, (1978).
 13. P. Joly, "Resolutions de systemes lineaires non symetriques par des methodes de gradient conjugue", Université P. et M. Curie.
 14. D.S. Kershaw, "The incomplete Cholesky-conjugate gradient method for the iterative solution of systems of linear equations", *J. Comp. Phys.*, Vol. **V**, No. 26, (1978).
 15. R. Montenegro, "Aplicación de los métodos de elementos finitos adaptativos a problemas de convección-difusión", *Tesis Doctoral*, E.T.S.I.I. de la Universidad Politécnica de Canarias, Las Palmas, España, (1989).
 16. G. Montero, "Aplicación de esquemas elemento a elemento de resolución de sistemas de ecuaciones asociados a métodos de elementos finitos adaptativos", *Tesis Doctoral*, E.T.S.I.I. de la Universidad Politécnica de Canarias, Las Palmas, España, (1989).
 17. A. Muller y T.J.R. Hughes, "Precondicionadores elemento-por-elemento y globales. Una perspectiva", *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.*, Vol. **2**, No. 1, pp. 27-41, (1986).
 18. M. Ortiz, P.M. Pinsky y R.L. Taylor, "Unconditionally Stable Element-by-Element algorithms for dynamic problems", *Comput. Meths. Appl. Mech. Engng.*, Vol. **36**, pp. 223-239, (1983).
 19. J.M. Winget, "Element-by-Element solution procedures for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis", *Ph.D. Thesis*, California Institute of Technology, Pasadena, California, (1983).
 20. J.M. Winget y T.J.R. Hughes, "Solution algorithms for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis employing Element-by-Element iterative strategies", *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.*, (1985).
 21. Y.S. Wong, "Iterative methods for problems in numerical analysis", *D. Phil. Th.*, Oxford University.
 22. O.C. Zienkiewicz, R. Löhner, "Accelerated "Relaxation" or Direct Solution?. Future Prospects for FEM", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **21**, pp. 1-11, (1985).