



JUAN CARLOS RODRÍGUEZ MIRANDA

**ESTUDIO Y ANÁLISIS DE SISTEMAS LINEALES GENERADOS EN
PROBLEMAS DE CONTORNO CON FRONTERA DISCONTÍNUA A
PARTIR DE MÉTODOS ESPECTRALES/HP**

*Estudo e Análise de Sistemas Lineares Gerados nos Problemas
de Contorno com Fronteira Descontínua a partir de Métodos
Espectrais/hp*

Campinas
2013



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA
E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

JUAN CARLOS RODRÍGUEZ MIRANDA

ESTUDIO Y ANÁLISIS DE SISTEMAS LINEALES GENERADOS EN PROBLEMAS DE
CONTORNO CON FRONTERA DISCONTÍNUA A PARTIR DE MÉTODOS
ESPECTRALES/HP

Orientador: Prof. Dr. Petronio Pulino

*Estudo e Análise de Sistemas Lineares Gerados nos Problemas de Contorno
com Fronteira Descontínua a partir de Métodos Espectrais/hp*

Dissertação de mestrado apresentada do Instituto de
Matemática, Estatística e Computação Científica da Unicamp para
obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Disertación de maestría presentada al Instituto de
Matemática, Estadística y Computación Científica de la Unicamp, para la
obtención del título de Magister en Matemática Aplicada.

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO
DEFENDIDA PELO ALUNO JUAN CARLOS RODRÍGUEZ MIRANDA,
E ORIENTADA PELO PROE. DR. PETRONIO PULINO.

Assinatura do Orientador

CAMPINAS
2013

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Maria Fabiana Bezerra Muller - CRB 8/6162

R618e Rodríguez Miranda, Juan Carlos, 1984-
Estudio y análisis de sistemas lineales generados en problemas de contorno con frontera discontinua a partir de métodos espectrales/*hp* / Juan Carlos Rodríguez Miranda. – Campinas, SP : [s.n.], 2013.

Orientador: Petronio Pulino.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Método dos elementos finitos. 2. Diferenças finitas. 3. Análise numérica. 4. Camada limite. 5. Sistemas lineares. I. Pulino, Petronio, 1956-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Estudo e análise de sistemas lineares gerados nos problemas de contorno com fronteira descontínua a partir de métodos espectrais/*hp*

Palavras-chave em inglês:

Finite element method

Finite differences

Numerical analysis

Boundary layer

Linear systems

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Mestre em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Petronio Pulino [Orientador]

Saulo Pomponet Oliveira

Eduardo Cardoso de Abreu

Data de defesa: 01-07-2013

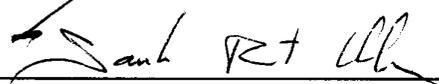
Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

Dissertação de Mestrado defendida em 01 de julho de 2013 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof.(a). Dr(a). PETRÔNIO PULINO



Prof.(a). Dr(a). SAULO POMPONET OLIVEIRA



Prof.(a). Dr(a). EDUARDO CARDOSO DE ABREU

Agradecimientos

Las oportunidades que se me han presentado en mi vida académica para adquirir, fortalecer y desarrollar ciencia han sido pocas, pero sin duda, la Universidad Estatal de Campinas (*Unicamp*) me ha brindado la posibilidad de ser parte de su familia de estudiantes durante aproximadamente tres años, en los cuales me he sentido acogido por su grandeza, optimismo, alegría y en especial, su maravillosa forma de acoger a las personas foráneas que viene un búsqueda de una mejora en su vida. Gracias a todos aquellos académicos, profesores, compañeros y amigos que componen el Instituto de Matematicas (*IMECC*), quienes durante todo este inconmensurable esfuerzo estuvieron atentos a cualquier tipo de ayuda que me pudieran proveer, especialmente al Profesor Doctor Petronio Pulino, de quien he aprendido el trabajo duro, dedicado y riguroso que la matemática exige, pero así mismo la gratificante de ver como es que a traves de ella, comprendemos una pequeña parte de la naturaleza.

Gracias aquellas instituciones de desarrollo científico y académico que con su apoyo con salas de computo, libros, revistas y periodicos han dado la posibilidad a que éste trabajo haya sido construido, y muy especialmente al Consejo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico (*CNPq*) quien nos otorgo la financiación necesaria para llevar a puerto seguro nuestro trabajo.

Finalmente, quizás le lejanía de nuestros seres queridos hace apurar nuestro esfuerzo por conseguir las metas, pero sin duda alguna, la Familia es nuestra última meta.

All the mathematical sciences are founded on relations between physical laws and laws of numbers, so that the aim of exact science is to reduce the problems of nature to the determination of quantities by operations with numbers.

James Clerk Maxwell, 1856.

Resumo

O Método dos Elementos Finitos representou nos últimos anos uma ferramenta fundamental no estudo de problemas de contorno. A evolução desde sua formulação fundamental a partir do Método de Galerkin clássico até sua versão com refinamento hp , se tornou na base dos métodos numéricos mais avançados como é o Método de Galerkin Descontínuo. O Método dos Elementos Finitos de Alta Ordem juntamente com os Métodos Espectrais usados na obtenção de soluções numéricas para problemas de contorno com fronteira descontínua, serão nosso objeto de estudo nesta Dissertação. Desde sua formulação matemática fundamental, por intermédio da escolha apropriada das funções hierárquicas que compõem os espaços de aproximação, assim como o montagem dos sistemas lineares locais e sua respectiva utilização no sistema linear global esparso, cuja solução é obtida pelo método iterativo de Gradiente Conjugado usando diversos Precondicionadores, será o caminho a seguir.

Palavras-chave: Método dos Elementos Finitos de Alta Ordem, Métodos Espectrais, Refinamento hp , Bases Hierárquicas, Malhas Adaptativas, Método de Gradiente Conjugado Precondicionado, ASSOR, SSOR, ILU, Camada Limite.

Abstract

The Finite Element Method developed in the last decades have been the most important tool in the study of Boundary Value Problems. Your evolution from its fundamental formulation using the Galerkin Method to the hp-adaptive finite element methods (hp-FEM), provided the necessary foundation for more advanced Numerical Methods like the Galerkin Discontinuous Method. The Finite Element Method of Higher Order, together with the Spectral formulation as a numerical method to solve Boundary Problems with Discontinuous Boundary, is the objective of study to this dissertation. The fundamental mathematical formulation of the finite element methods, passing through of to choose of hierarchical basis functions, also the assembly of local linear systems and it posteriorly use to construct a Sparse Linear System, whose solution is obtained for a iterative Preconditioner Gradient Method.

Keywords: Finite Element Method of Higher Order, Spectral Methods, *hp*-FEM, Hirarchical Basis Functions, Adaptative Grid, Preconditioned Gradient Method, *ASSOR*, *SSOR*, *ILU*, Boundary Layer Problem.

Lista de Figuras

2.1. Elemento Maestro Cuadrilatero κ_r	16
2.2. Funciones Vértices Modales de Jacobi	22
2.3. Funciones Aristas Modales de Jacobi	23
2.4. Funciones Internas Modales de Jacobi	24
3.1. Aplicación de la Regla Mínima de Conformidad entre cuatro elementos adyacentes con grados polinomiales diferentes $P^\alpha, P^\beta, P^\gamma$ y P^δ [57].	36
3.2. Exemplo de conformidade entre elementos geométricos κ_1 y κ_2 com grãos polinomiais P^{κ_1} y P^{κ_2} , diferentes.	36
4.1. El espacio computacional \mathcal{Q} esta compuesto por una región rectangular unitaria cuya discretización se realiza en un conjunto de n puntos a los cuales se les asigna el par (i, j)	43
4.2. Domínio $\bar{\Omega}$ dado por la ecuación (4.15) en el cual se construíra una malla algebraíca uniforme.	46
4.3. Malla Algebraica Uniforme generada sobre el dominio $\bar{\Omega}$ cuya frontera esta dada por (4.16). Número de Filas y Columnas, $M, N = 61$, respectivamente. Compuesta por 3600 elementos geométricos. $H = L = 10$	49
4.4. Problema squeezing entre líneas de una misma familia que componen una malla algebraica.	49
4.5. Problemas de suavidad en líneas que componen una malla algebraica de $\bar{\Omega}$	49

4.6. Malla Elíptica generada a partir de un sistema de ecuaciones diferenciales de Laplace, cuya configuración inicial es presentada en 4.3. 3600 elementos geométricos, $M = N = 61$, $H = L = 10,0$, Parámetro SOR $\omega = 1,75$. Número de Nodos $n = 3721$ 53

4.7. A diferencia de la malla algebraica inicial, el problema *squeezing* no se presenta en la malla elíptica. 53

4.8. La suavidad es una de las características fundamentales de las mallas elípticas. 53

4.9. Patrones de adaptatividad generada en una malla algebraica compuesta por $M = N = 20$, producidos a partir de la ecuación (4.26) siguiendo el esquema 4.1, (Fuente [32]). 58

4.10. Malla Algebraica adaptativa construida con ayuda de la función $f_{\beta}(x; x_0)$, quien fue aplicada sobre el eje Y . Parámetro $\beta = 1,75$. Línea de convergencia x_0 . Número de elementos geométricos 3600, $L = H = 10,0$ 59

4.11. Problema de falta de **suavidad** entre elementos geométricos que componen la malla adaptativa algebraica. 59

4.12. Adaptación de la malla algebraica, alrededor de la línea uno. 59

4.13. Malla elíptica adaptativa, la cual ha sido generada como solución del sistema (4.28) con las condiciones de frontera (4.16). Se ha tomado como familia **clustering** las diez primeras líneas en la dirección Y . En éste caso la malla algebraica inicial, fue la expuesta en la figura 4.10. 62

4.14. Problema **squeezing** ausente en mallas elípticas. 62

4.15. Adaptabilidad en las primeras diez líneas de Y 62

5.1. Discretización de un Dominio $\bar{\Omega}$ 65

5.2. Diagrama de Conectividad de la discretización del dominio $\bar{\Omega}$, quien muestra el proceso de enumeración de los grados de libertad quien depende de los grados polinomiales locales, P^k 69

5.3. Procedimiento de Ensamble de la Matriz Global de Masa/Rigidez a partir de las matrices locales de Masa/Rigidez, por medio de los operadores de conectividad $\mathcal{O}_{\{v,\Gamma,I\}}^\kappa$ con $\kappa \in \mathcal{T}_{h,p}$ (Fuente [37]). 74

5.4. Patron de Esparsidad para una Matriz de Rigidez/Masa de un problema de contorno, descrito en la ecuación (7.1), al cual ha dado lugar 2139 grados de libertad con un grado polinomial máximo 5 y 49336 entradas diferentes de cero. 77

5.5. Elemento κ . Tratamiento Condiciones de Frontera 79

5.6. Diagrama de Flujo del Método de Elementos Finitos de Orden Superior 92

6.1. Método de Paso Descendente, matriz 2×2 97

7.1. Resultado Analítico problema de contorno (7.1)-(7.2) segun la ecuación (7.3). . . . 110

7.2. Resultados Obtenidos en la solución del problema de contorno (7.1)-(7.2) al elegir las funciones ψ , **Legendre y Lobatto**, según la Tabla 2.1. Grados de Libertad \mathcal{D}_f dados por (3.27),son: 3390 y 3534, respectivamente. 113

7.3. Resultados Obtenidos en la solución del problema de contorno (7.1)-(7.2) al elegir las funciones ψ , **Chebyshev y Jacobi**, según la Tabla 2.1. Grados de Libertad \mathcal{D}_f dados por (3.27),son: 6281 y 3146, respectivamente. 114

7.4. Comportamiento Número de Condición $\mathcal{N}(\hat{\mathcal{A}})$ como función del Número de Grados de Libertad Total, Grado Maximo Polinomial y Número de Iteraciones MGC. Problema (7.1)-(7.2). 117

7.5. Solución numérica obtenida del problema de contorno (7.7)-(7.8) usando el algoritmo 5.9. Solución final obtenida despues de tres (3) pasos de refinamiento polinomial, sobre una malla $\mathcal{T}_{h,p}$ compuesta de 1521 elementos geométricos. Número de grados de libertad finales es 11191. Grado máximo polinomial es igual a 3. 119

7.6. Estudio del termino $\frac{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}|_2}{|\mathbf{x}_k|_2}$ como función del número de iteraciones al elegir diferentes Precondicionadores en la solución del problema expuesto en la ecuación (7.7)-(7.8), en el paso final de refinamiento-**p**. Parámetros $\omega_{SSOR} = 0,725$ y $\omega_{ASSOR} = 0,5$ 123

7.7. Estudio del termino $|\mathbf{b} - \mathcal{A}\mathbf{x}_k|_2$ como función del número de iteraciones del método de Gradiente Conjugado Precondicionado, al elegir diferentes Precondicionadores en la solución del problema expuesto en la ecuación (7.7)-(7.8), en el paso final de refinamiento-**p**. Parámetros $\omega_{SSOR} = 0,725$ y $\omega_{ASSOR} = 0,5$ 124

7.8. Vista lateral y solución analítica del problema (7.10)-(7.11) *Boundary Layer* con un decrecimiento abrupto de la solución cerca a la frontera $x = 1, y = [0,1]$, usando la ecuación (7.12). 126

7.9. Resultados obtenidos para el problema (7.10), con una malla uniforme sobre el dominio $\bar{\Omega} = [0,1] \times [0,1]$ compuesta de 3481 elementos geométricos. Constantes $\epsilon = 10^{-3}$ y $\lambda = 1,0$. Número de Grados de Libertad 28005. 128

7.10. Error $|u - u_a|_2$ obtenido en cada elemento geométrico del problema de contorno (7.10). 129

7.11. Vista superior de la distribución de errores sobre cada elemento geométrico dispuesto para el problema *Boundary Layer*. 129

7.12. Distribución Polinomial obtenida despues de cinco (5) pasos de refinamiento-**p**. Problema de contorno (7.10). 130

7.13. Vista superior distribución polinomial problema *Boundary Layer*. 130

Lista de Tablas

2.1. Polinómios Ortogonales [1],[16]	20
7.1. Resultados numéricos obtenidos del problema (7.7)-(7.8) usando <i>MEFOS</i> considerando diferentes preconditionadores en el Método de Gradiente Conjugado Precondicionado.	120
7.2. Resultados obtenidos para el problema (7.10) en el proceso de refinamiento tipo p , al usar como preconditionador ASSOR cuyo parámetro $\omega_{ASSOR} = 1,25$	126
B.1. Pesos y Puntos de Integración Gauss-Lobatto-Legendre $Q = 5$	142

Lista de Algoritmos

4.1. Algoritmo de construcción de una malla algebraica uniforme de un dominio $\bar{\Omega}$ (ecuaciones (4.15) y (4.16)).	47
4.2. Algoritmo de construcción de una malla algebraica adaptativa en un dominio $\bar{\Omega}$ (ecuaciones (4.15) y (4.16)).	56
5.1. Ensamble Matriz Global \mathcal{A}	75
5.2. Ensamble Vector Global $\tilde{\mathbf{b}}$	78
5.3. Ensamble Sistema (\mathcal{A}, b)	87
5.4. Inclusión Condiciones de Frontera	88
6.1. Algoritmo Método de Gradiente [65].	99
6.2. Algoritmo Método de Gradiente Conjugado Precondicionado [39],[49].	102
6.3. Algoritmo Precondicionador ILU [4].	105

Índice general

Lista de Figuras	XVIII
Lista de Tablas	XIX
Lista de Algoritmos	XXI
1. Introducción	1
1.1. Método de Elementos Finitos	4
1.2. Problema Modelo y Formulación Variacional	8
1.3. Aproximación de la Forma Débil y Discretización	10
2. Bases Jerárquicas	13
2.1. Introducción	13
2.2. Funciones Jerárquicas	15
2.3. Polinómios Ortogonales ψ	19
3. Método de Elementos Finitos de Orden Superior	25
3.1. Introducción	25
3.2. Matrices de Rigidez y Masa Locales	27
3.2.1. Matriz de Rigidez Local \mathcal{R}^k	28
3.2.2. Matriz de Masa Local \mathcal{M}^k	31

3.3. Vector de Carga Local \tilde{b}_γ^k	32
3.4. Reglas de Conformidad	34
4. Construcción de Mallas Elípticas Adaptativas	37
4.1. Introducción	37
4.2. Mallas Estructuradas	38
4.3. Sistemas Elípticos	39
4.4. Discretización del Sistema Ecuaciones Elípticas	42
4.5. Mallas Algebraicas	45
4.6. Método de Solución, Gauss-Seidel y SOR	50
4.7. Criterio de Parada	52
4.8. Funciones de Control y Adaptabilidad	54
4.8.1. Adaptabilidad Mallas Algebraicas	55
4.8.2. Mallas Elípticas Adaptativas	60
5. Aspectos Computacionales	63
5.1. Introducción	63
5.2. Discretización del Dominio $\bar{\Omega}$	64
5.3. Enumeración Global Grados de Libertad	66
5.4. Operadores de Conectividad \mathcal{O}^k	70
5.5. Ensamble Matriz Masa/Rigidez Global	72
5.6. Ensamble Vector de Carga Global	78
5.7. Inclusión Condiciones de Frontera	78
5.7.1. Interpolación Basada en una Proyección 1D	80
5.8. Condensación Estática	82
5.9. Algoritmo e Implementación	84

6. Métodos Iterativos - Solución de Sistemas Lineales	93
6.1. Introducción	93
6.2. Método de Paso Descendente	94
6.3. Método de Gradiente Conjugado	97
6.4. Método de Gradiente Conjugado Precondicionado	100
6.5. Precondicionadores	103
6.5.1. Precondicionador Jacobi.	103
6.5.2. Precondicionador SSOR.	104
6.5.3. Precondicionador ASSOR	104
6.5.4. Precondicionador ILU.	105
7. Resultados Numéricos Problemas de Contorno con Frontera Discontinua	107
7.1. Introducción	107
7.2. Polinómios Ortogonales	108
7.3. Elección de Precondicionadores	118
7.4. Capa Límite - <i>Boundary Layer</i>	125
8. Consideraciones Finales	131
8.1. Acerca del MEF-OS	131
8.2. Acerca de Mallas Adaptativas	133
8.3. Perspectivas Futuras	134
A. Polinómios Ortogonales	137
A.1. Familia Polinómios de Jacobi J	137
B. Puntos y Pesos de Integración	139
C. Estimativas de Error en el Método de Elementos Finitos	143
C.0.1. Estimativas de error <i>a priori</i> en MEF	144

Índice general

XXVI

Bibliografía

147

Capítulo 1

Introducción

La idea de construir una solución de una ecuación diferencial a partir de una secuencia de aproximaciones locales, surgió cerca de 1943 en el trabajo publicado por Courant [21] en el usaba el método de Rayleigh-Ritz en la solución de un problema de torsión, usando múltiples dominios interconectados. Éste primer paso fue complementado en 1953 cuando Levy hizo uso de la formulación variacional presentada por Agry del método de Courant, para construir un procedimiento automático conocido como Ensamble Global, el cual permito hacer un estudio estructural de varios componentes de una aeronave dando las bases de lo que despues seria llamado el Método de Elementos Finitos (**FEM**).

La mayoría de los trabajos iniciales, usaban como funciones de aproximación, funciones lineales por partes definidas en un dominio muy cercano al dominio original en el cual se encontraba definido ya fuera un problema variacional o un problema de valor de contorno. En principio, la idea de hallar una solución aproximada usando funciones lineales, otorgaba un gran avance en la solución de problemas que en principio no permitian obtener una solución analítica, especialmente aquellos que se encuentran definidos en dos o tres dimensiones. La metodología propuesta por Courant, la cual usaba múltiples dominios al cual se le hacia corresponder un conjunto de

funciones linealmente independientes no fue la única idea que surgió en la búsqueda de soluciones de problemas de contorno. En una forma independiente al trabajo de Courant, [45] en su tesis doctoral usó las series de Fourier como funciones de aproximación definidas en un ensamble de subdominios rectangulares para dar solución a un problema estructural. En éste sentido, Oden fundó lo que hoy en días son llamados **Métodos Espectrales/hp**.

Los Métodos Espectrales al igual que el Método de los Elementos Finitos, hacen parte de un conjunto de métodos numéricos que dan solución a problemas de contorno/inicial, al usar una discretización espacial del dominio en la cual se encuentra definida la ecuación diferencial y cuyo componente característico se encuentra en la elección de un espacio de funciones en donde residirá la solución final. Éstas funciones de aproximación, son las que garantizan que las condiciones de contorno sean satisfechas al igual que las condiciones de continuidad o conformidad a las cuales el problema se encuentra restringido. La elección de las funciones, al igual que la dimensión del espacio que compone, se basa en la minimización de un residuo producto de la diferencia entre una serie finita definida a partir de dichas funciones y la solución exacta del problema: métodos de pesos residuales.

La elección de las funciones de aproximación es uno de los factores más relevantes al distinguir las versiones iniciales de los elementos finitos así como de los métodos espectrales, de las versiones contemporáneas. Las funciones base que generan las funciones de aproximación en el así llamado método espectral clásico, son funciones definidas en un único dominio que en el caso unidimensional, producto de la solución de un problema de autofunciones de Sturm-Liouville; en el caso bidimensional y tridimensional se usan estas mismas funciones pero se hace uso de un producto tensorial entre dos o tres espacios unidimensionales, según corresponda.

Gottlieb y Orszag en su monografía publicada en 1977 [27], formalizaron la teoría y proveyeron

un conjunto de primeras aplicaciones de los métodos espectrales, especialmente en problemas de advección-difusión y en modelos de flujos incompresibles. En ella, los métodos espectrales son estudiados al elegir por funciones de aproximación senosoidales, como hiciera [45] y en su formulación mas moderna al usar polinómios de Legendre y Chebyshev.

En un trabajo desarrollado a finales de 1981, Ivo Babuška y Barna Szabó [6], establecieron y desarrollaron la versión p del FEM. Su principal objetivo era la justificación matemática de una idea en la cual, el comportamiento asintótico que presenta la solución aproximada al aumentar el grado p de un conjunto de funciones polinomiales definidas por partes (**p-versión**), se comporta con un orden de aproximación h^{p+1} , donde h representa el diámetro de los elementos geométricos que componen la discretización del dominio; diferenciando de la versión original del MEF, donde el comportamiento asintótico se obtenía al disminuir h que caracterizan la malla (**h-versión**). Las propiedades de la p -versión así como su estudio de convergencia, son presentadas con gran detalle en éste trabajo y toma cuenta del gran andamiaje matemático detrás del MEF, así como de su consistencia en diversos problemas, especialmente su aplicación en problemas que presenta discontinuidades en su dominio o en sus condiciones de frontera, las cuales deben ser reflejadas en la solución aproximada final.

Como funciones polinomiales, Babuška y Szabó, plantearon el uso de las funciones integradas de Legendre, como una familia ortogonal de funciones con respecto al producto interno de la energía, que al igual a los métodos espectrales, generaban una matriz diagonal, la cual se caracteriza por su buena condicionalidad. Así mismo, una de las propiedades que ésta familia de funciones tiene y que representa un gran ventaja en la p -versión del MEF, es su jerarquía: las funciones base correspondientes a una aproximación polinomial de grado p constituye un subconjunto de la correspondiente aproximación polinomial de grado $p + 1$. De este modo, la matriz de rigidez/masa generada a partir de las funciones de grado menores o iguales a p , se encuentran integradas a la

matriz de rigidez/masa construida usando las funciones asociadas al grado $p + 1$.

Como trabajos posteriores, Ivo Babuška propuso ciertas condiciones necesarias en la elección de las funciones de aproximación asociadas a cada elemento geométrico, de tal forma que el número de condición de la matriz de rigidez local, fuera de menor grado posible, para garantizar que al momento de ser ensamblada una matriz global, de tal forma que el número de iteraciones necesarias para obtener una solución al sistema de ecuaciones lineales por medio del método de gradientes conjugados, sea mínimo.

La elección de las funciones de aproximación, tanto en los métodos espectrales, así como en la versión p del MEF, constituye un factor fundamental en la reducción tanto de los errores aleatorios presentes en la solución del sistema lineal final, así como de la minimización del error de la solución aproximada del problema original.

1.1. Método de Elementos Finitos

El Método de Elementos Finitos (MEF) es una versión especial del Método de Galerkin, quien proporciona una solución aproximada a problemas diferenciales, específicamente a aquellos problemas de valor de contorno con o sin una dependencia temporal. Así, dado un problema diferencial caracterizado por un operador diferencial \mathcal{L} , definido en un dominio $\bar{\Omega} \in \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) y \mathcal{G} un conjunto de funciones que definen las condiciones de contorno que debe satisfacer la solución de dicho problema, el MEF está caracterizado por tres aspectos:

El primer aspecto y a decir verdad el más representativo, es la aproximación del dominio $\bar{\Omega}$ por medio de una *triangularización* (τ_h) o *cuadrilaterización*¹ (q_h), i.e., el conjunto $\bar{\Omega}$ es subdividido en un conjunto finito de elementos κ los cuales deben satisfacer las siguientes condiciones:

¹ h representa un parámetro característico de la discretización, puede tomarse la longitud mínima de un intervalo, cuando la dimensión $d = 1$, una área o volumen mínimo si $d = 2$ o 3 , respectivamente.

1. $\bigcup_{\kappa \in \mathcal{T}_h} \kappa \cong \bar{\Omega}$ con $\mathcal{T}_h = \{\tau_h, q_h\}$.
2. Para cada elemento $\kappa \in \mathcal{T}_h$, el interior de κ definido por $\hat{\kappa}$ es no vacío.
3. Sean κ_1 y κ_2 dos elementos pertenecientes a \mathcal{T}_h , $\hat{\kappa}_1 \cap \hat{\kappa}_2 = \emptyset$.
4. Para cada $\kappa \in \mathcal{T}_h$, la frontera $\partial\kappa$ es *Lipschitz-continua*.

Una vez definidas las características de los elementos κ que componen la discretización \mathcal{T}_h del dominio $\bar{\Omega}$, se da lugar al segundo aspecto fundamental del MEF y es la definición de un espacio de funciones polinomiales \mathcal{V}_h finito dimensionalmente, cuyo dominio es \mathcal{T}_h y definido como:

$$\mathcal{V}_h := \bigcup_{\kappa \in \mathcal{T}_h} \mathcal{V}^\kappa, \quad \mathcal{V}^\kappa = \{\hat{\phi}^\kappa; \hat{\phi}^\kappa \in \mathcal{P}_{p^\kappa}(\bar{\kappa})\}, \quad (1.1)$$

donde $\dim(\mathcal{V}^\kappa) = \mathcal{N}^\kappa$. Sin especificar condiciones necesarias o suficientes sobre el espacio \mathcal{V}_h y los subespacios \mathcal{V}^κ , no existe una razón para dar por subespacio \mathcal{V}_h de un espacio de Hilbert $\mathcal{H}^1(\bar{\Omega})$. Sin embargo, podemos dar paso a uno de los teoremas fundamentales en la teoría del método de elementos finitos, que nos proporciona las condiciones suficientes para estas inclusiones.

Teorema 1.1.1 *Suponiendo que $\mathcal{V}^\kappa \subset \mathcal{H}^1(\kappa)$ es válida para todo $\kappa \in \mathcal{T}_h$ y si $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{G}^0(\bar{\Omega})$, entonces las siguientes inclusiones son válidas*

$$\mathcal{V}_h \subset \mathcal{H}^1(\bar{\Omega}), \quad (1.2)$$

$$\mathcal{V}_{0h} = \{\hat{\phi} \in \mathcal{V}_h, \hat{\phi} = 0 \text{ sobre } \Gamma = \partial\Omega\} \subset \mathcal{H}_0^1(\bar{\Omega}). \quad (1.3)$$

En el teorema 1.1.1, \mathcal{H}^1 e \mathcal{H}_0^1 representa los espacios de Hilbert usuales. Asumiendo que el Teorema 1.1.1 es aplicado, bajo una construcción adecuada del espacio \mathcal{V}_h , encontraremos que la solución a un problema de valor de contorno con condiciones de Dirichlet homogéneas puede

ser construido a partir de un espacio de funciones polinomiales \mathcal{V}_h . Así mismo, un problema diferencial con condiciones de frontera de Neumann homogéneas o no, posee una solución aproximada generada a partir del espacio $\mathcal{V}_{oh} \subset \mathcal{H}_0^1(\bar{\Omega})$, de la misma forma, un problema diferencial con condiciones de frontera de Neumann homogéneas o no homogéneas tiene una solución generada a partir del subespacio $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{H}^1(\bar{\Omega})$, [20].

Según el teorema 1.1.1, es posible construir una solución aproximada de un problema diferencial a partir de los espacios \mathcal{V}_h y \mathcal{V}_{oh} , sin restricciones sobre las funciones $\hat{\phi}^\kappa \in \mathcal{V}^\kappa$, exceptuando las restricciones en las fronteras impuestas sobre las funciones definidas en la frontera, que componen el espacio \mathcal{V}_{oh} . Por ésto, podemos considerar que el subespacio \mathcal{V}^κ quien es finito dimensionalmente, puede ser generado a partir de una base canónica de funciones $\beta^\kappa = \{ \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{\mathcal{N}^\kappa} \}$. De éste modo, una función $f : \kappa \rightarrow \mathfrak{R}$ tiene una representación según la base β_κ descrita como:

$$\Pi^\kappa(f) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}^\kappa} f_i^\kappa \theta_i \quad , \quad (1.4)$$

donde $f_i^\kappa \in \mathfrak{R}$, $i = 1, \dots, \mathcal{N}^\kappa$. La unicidad de los coeficientes f_i^κ , puede ser garantizada al definir un conjunto de operadores $\Sigma^\kappa = \{L_i\}_1^{\mathcal{N}^\kappa}$ con $L_i : \mathcal{P}_{p^\kappa} \rightarrow \mathfrak{R}$ que satisfacen la siguiente propiedad :

Definición 1.1.1 (Propiedad- δ). Sea Σ^κ un conjunto de operadores lineales y \mathcal{V}^κ un conjunto de funciones de dimensión \mathcal{N}^κ . Decimos que una base $\beta_\kappa = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{\mathcal{N}^\kappa}\}$ de un espacio \mathcal{V}^κ cumple la propiedad- δ , si

$$L_i(\theta_j) = \delta_{ij} \quad \text{para todos } 1 \leq i, j \leq \mathcal{N}^\kappa ,$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker usual.

De esta forma decimos que una proyección lineal es única (tercera propiedad) si,

Definición 1.1.2 (Unisolvencia). Dada un subespacio de funciones polinomiales \mathcal{V}^κ y una

función $f \in \mathcal{V}^\kappa$, la proyección

$$\Pi^\kappa(f) = [L_1(f), L_2(f), \dots, L_{\mathcal{N}^\kappa}(f)]^T \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}^\kappa} \quad (1.5)$$

es única, para un conjunto Σ^κ de operadores linealmente independientes L_i quienes cumplan la propiedad- δ , sobre la base β^κ .

Por tanto, volviendo a la ecuación (1.4), tenemos la correspondencia $L_i(f) = f_i^\kappa$, $i = 1, \dots, \mathcal{N}^\kappa$.

Con estas características en la mano podemos construir una definición global de **Elemento Finito** [57],

Definición 1.1.3 (Elemento Finito). Un elemento finito es una triada $K = (\kappa, \mathcal{V}^\kappa, \Sigma^\kappa)$, donde

1. $\kappa \in \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$, representa un elemento geométrico perteneciente a un discretización \mathcal{T}_h quien cumple las condiciones (1).
2. \mathcal{V}^κ , es un espacio de funciones polinomiales de orden P^κ , definido sobre el elemento geométrico κ .
3. $\Sigma^\kappa = \{L_1, L_2, \dots, L_{\mathcal{N}^\kappa}\}$ es un conjunto de funcionales lineales quienes cumplen la propiedad- δ

$$L_i : \mathcal{V}^\kappa \rightarrow \mathbb{R}, \quad i = 1, 2, \dots, \mathcal{N}^\kappa \quad (1.6)$$

donde \mathcal{N}^κ son llamados los grados de libertad asociados al elemento κ .

Un estudio a profundidad de las definiciones, propiedades y especialmente la formulación matemática que se encuentra detras del método de elementos finitos, es desarrollada en gran medida en [15; 20; 52].

Hasta el momento hemos concentrado nuestro estudio en la definición de lo que se conoce como **elemento finito**, algunas de sus características fundamentales y la forma en la cual es obtenido a través de la discretización espacial \mathcal{T}_h de un dominio $\bar{\Omega}$, la definición de un espacio

de funciones \mathcal{V}^κ y conjunto de operadores lineales Σ^κ . El uso de los elementos finitos como base para construir una solución aproximada de una **Problema de Valor de Contorno** (PVC) es lo que concentrara nuestros esfuerzos en los parrafos siguientes, especialmente la estrategia que se sigue para transformar un PVC en un **Problema Valor Discreto** (PVD), usando los diferentes teoremas vectoriales, asi como la solución de éste por medio de la construcción adecuada de un espacio de funciones \mathcal{V}_h asi como es posible garantizar la unicidad de la solución obtenida en problemas elípticos al hacer uso del Lemma de Lax-Milgram.

1.2. Problema Modelo y Formulación Variacional

Para dar una muestra de cuales son los pasos que el Método de Elementos Finitos da inicio desde un problema diferencial, vamos a considerar el siguiente problema modelo:

(PVC). Sea un problema de valor de contorno definido en un dominio $\bar{\Omega}$, dado por

$$\mathcal{L}(u) := -\alpha \Delta u(x,y) + \lambda u(x,y) = f(x,y) \quad , \quad (x,y) \in \Omega, \quad (1.7)$$

$$u(x,y) = g(x,y) \quad , \quad (x,y) \in \Gamma = \partial\bar{\Omega}, \quad (1.8)$$

donde $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$, $\alpha, \lambda \in \mathbb{R}^+$, $f(x,y), g(x,y) \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega})$ y Γ Lipschitz-continua.

Sea una funcion $v \in \mathcal{V}$, donde $\mathcal{V} = \{v \ ; \ v : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}\}$ representa un espacio de funciones. Al hacer el producto entre la ecuación (1.7) e integrando sobre el dominio $\bar{\Omega}$, obtenemos

$$\int_{\bar{\Omega}} v(-\alpha \Delta u + \lambda u) \partial\bar{\Omega} = \int_{\bar{\Omega}} v f \partial\bar{\Omega} \quad . \quad (1.9)$$

Aplicando el Teorema de Gauss y las condiciones de frontera (1.8), definimos los operadores

$$a(v, u) := \alpha \int_{\bar{\Omega}} (\nabla v \cdot \nabla u) \partial \bar{\Omega} + \lambda \int_{\bar{\Omega}} vu \partial \bar{\Omega} \quad , \quad (1.10)$$

$$b_f(v) := \int_{\bar{\Omega}} vf \partial \bar{\Omega} + \alpha \int_{\Gamma} v \partial_n g \partial \Gamma \quad . \quad (1.11)$$

Si definimos formalmente \mathcal{V} como :

$$\mathcal{V} = \{ v \in L^2(\bar{\Omega}) \ ; \ a(v, v) < \infty \ y \ v = 0 \ \text{en} \ \Gamma \} \quad , \quad (1.12)$$

Podemos definir un Problema Variacional Equivalente (**PVE**) al PVC :

(PVE). La solución equivalente al problema (1.7)-(1.8) puede ser expresado como

$$u_e = \tilde{u}_H + \tilde{u}_D \quad (1.13)$$

siendo $\tilde{u}_H \in \mathcal{V}$ tal que $a(\tilde{u}_H, v) = b_f(v) \quad \forall v \in \mathcal{V}$ y \tilde{u}_D , una función elegida de tal forma que las condiciones de frontera de Dirichlet no homogéneas (1.8) son satisfechas.

El PVE es llamada la formulación débil de un problema de contorno porque la función v puede variar arbitrariamente y las restricciones de continuidad de la posible solución del problema original, han sido disminuidas. Sin embargo, no tenemos herramientas suficientes para garantizar que la solución equivalente u_e existe y es única, mas sin embargo, bajo ciertas propiedades de los operadores $a(\cdot, \cdot)$, $b_f(\cdot)$ así como del espacio \mathcal{V} , es posible garantizar existencia y unicidad de u_e al hacer uso del siguiente teorema:

Teorema 1.2.1 Existencia y Unicidad - Solución PVE. Supongamos que las siguientes con-

diciones son satisfechas :

1. Si $(\mathcal{H}, (\cdot, \cdot))$ es un espacio de Hilbert.
2. \mathcal{V} un subespacio cerrado de \mathcal{H} .
3. Siendo $a(\cdot, \cdot)$ un operador **acotado, simétrico y coercivo**² en \mathcal{V} ,

entonces el problema equivalente 1.13 tiene una única solución [15].

Aunque el teorema 1.2.1 nos proporciona la existencia y unicidad de la solución a nuestro problema equivalente 1.13, en terminos generales la existencia y unicidad de la solución al problema equivalente construido a partir de un problema de contorno, ya sea simétrico o no, estará dada por el Teorema de Lax-Milgram.

Teorema 1.2.2 Lax-Milgram. Dado un espacio de Hilbert $(\mathcal{V}, (\cdot, \cdot))$, un operador continuo, coercivo y bilineal $a(\cdot, \cdot)$ así como un funcional lineal continuo $b(\cdot)$, existe un único $u \in \mathcal{V}$ tal que

$$a(u, v) = b(v) \quad \forall v \in \mathcal{V} \quad .$$

La obtención, análisis y aplicación del Teorema de Lax-Milgram así como las propiedades de coercividad, continuidad y bilinealidad del operador $a(\cdot, \cdot)$ y características del espacio $\mathcal{V} \subset L^2(\Omega)$ quien es de por si un espacio de Hilbert, son estudiadas a profundidad en [15].

1.3. Aproximación de la Forma Débil y Discretización

Una vez se ha planteado un problema equivalente al problema de valor de contorno inicial, el cual se ha denotado por PVE, se formula una solución aproximada de éste problema usando un espacio de elementos finitos. Para ésto, se sigue un conjunto de pasos que es estandar en la teoría de MEF, la cual es resumida como:

²La coercividad del operador $a(\cdot, \cdot)$ depende de los valores de λ presentes en el operador diferencial 1.7, en nuestro caso los valores de λ seran tomados positivos para cumplir la condición de positividad.

Paso 1. Es necesario la discretización del dominio $\bar{\Omega}$ usando un conjunto de N elementos geométricos $\kappa \in \mathcal{T}_h$ quienes cumplen las condiciones (1). En éste punto se defini un elemento geométrico de referencia κ_r al cual se encuentra asociado un mapeo biyectivo $\xi^\kappa : \kappa \rightarrow \kappa_r$ para cada elemento $\kappa \in \mathcal{T}_h$.

Paso 2. Al definir el mapeo biyectivo ξ^κ para cada $\kappa \in \mathcal{T}_h$, el espacio de funciones \mathcal{V} es aproximado por un subespacio

$$\mathcal{V}_{h,p} = \bigcup_{k=1}^N \mathcal{V}^k \quad \text{con} \quad \mathcal{V}^k = \mathcal{V}^r \circ \xi^\kappa, \quad (1.14)$$

siendo $\mathcal{V}^r = \{\phi \in \mathcal{P}_p(\kappa_r)\}$.

Paso 3. Una vez definido el espacio de funciones $\mathcal{V}_{h,p}$ se plantea un Problema Variacional Discreto (**PVD**),

(**PVD**). Dado un problema variacional en la forma (1.13), una solución aproximada u_a de u_e puede ser definida como:

$$u_a = u_H + u_D \quad (1.15)$$

donde u_H pertenece al espacio $\mathcal{V}_{h,p}$ cumpliendo

$$a(u_H, v_{h,p}) = b_f(v_{h,p}) \quad (1.16)$$

para todo $v_{h,p} \in \mathcal{V}_{h,p} \subset \mathcal{V}$. La función u_D es una función polinomial por partes la cual corresponde a una aproximación de la función \tilde{u}_D en (1.13).

La solución de éste problema discreto es la mejor aproximación al problema equivalente [1.13](#) en el espacio $\mathcal{V}_{h,p}$, y está representado por el lemma de Céa quien esta contemplado en el libro de [\[34\]](#).

Paso 4. Usando los pasos 1 y 2, expresamos la función u_H como una combinación de las funciones base $\hat{\phi}_i \in \mathcal{V}_{h,p}$ con $i = 1, \dots, M$, siendo $M = \dim(\mathcal{V}_{h,p})$, en la forma

$$u_a = u_D + \sum_{i=1}^M x_i \hat{\phi}_i \quad (1.17)$$

quien al ser reemplazada en [\(1.16\)](#) y teniendo en cuenta que $v_{h,p} \in \mathcal{V}_{h,p}$, es transformada en un problema algebraico

$$\sum_{i=1}^M a(\hat{\phi}_i, \hat{\phi}_j) x_i = b_f(\hat{\phi}_j) - a(u_D, \hat{\phi}_j) \quad , \quad j = 1, \dots, M \quad , \quad (1.18)$$

quien puede ser expresado en forma matricial $\mathcal{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, con $\mathcal{A} = \{a(\hat{\phi}_i, \hat{\phi}_j)\} \in \mathbb{R}^{M \times M}$, $\mathbf{x} = \{x_i\} \in \mathbb{R}^M$ y $\mathbf{b} = \{b_f(\hat{\phi}_i) - a(u_D, \hat{\phi}_i)\} \in \mathbb{R}^M$.

Paso 5. Resolver el sistema [\(1.18\)](#) para las variables desconocidas \mathbf{x} de $\tilde{u}_{h,p}$ usando un esquema numérico adecuado, dependiendo de las propiedades de la matriz \mathcal{A} .

Capítulo 2

Bases Jerárquicas

2.1. Introducción

La convergencia y precisión de un Método de Elementos Finitos depende de las propiedades de la aproximación del conjunto de funciones base \hat{v} que se encuentran definidas sobre un elemento de referencia κ_r . El subespacio \mathcal{V}^r al igual que el operador bijectivo ξ^κ son los responsables de la construcción de un espacio de $\mathcal{V}_{h,p}$, bajo el cual se construye la aproximación de la solución del problema de contorno. La convergencia y la precisión del **MEF**, depende entonces de las propiedades de aproximación del subespacio \mathcal{V}^r , [15]. Por otra parte, la efectividad computacional del método, depende de la efectividad del algoritmo dispuesto para la resolución del sistema algebraico final, así como de la reducción de los errores aleatorios presentes en éste proceso, lo cual está directamente relacionado con la elección de las funciones base.

De esta forma, el balance entre precisión, convergencia y efectividad computacional, se encuentran ligadas a una adecuada elección de las funciones base del subespacio \mathcal{V}^r . El análisis computacional así como varios aspectos internos relacionadas con la elección de las funciones base de la versión-p del **MEF**, fue presentada por [8]: en éste artículo, se considera como parámetro de

elección el número de condición $\mathcal{N}(\mathcal{A})$ de la matriz de masa/rigidez \mathcal{A} . Babuška construye diversos espacios de funciones basado en: funciones base clásicas de elementos jerárquicos usando polinómios de Lobatto [57], funciones polinomiales jerárquicas construidas a partir de monómios [5], al igual que el uso de funciones trigonométricas e hiperbólicas, entre otras.

En la versión-p del MEF, las funciones base pueden ser agrupadas en dos grandes grupos: *funciones nodales* y *funciones jerárquicas* o también llamadas modales. Las funciones nodales, se encuentran definidas en función de un número $(P+1)^d$ de puntos χ_P distribuidos en el interior del elemento maestro, los cuales pueden estar equidistantes o en puntos especificados de antemano, llamados nodos. Un ejemplo de éste tipo de funciones, es un conjunto de polinómios de grado P , $\mathbf{L}_P = \{\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \dots, \mathbf{h}_{P+1}\}$ donde $\mathbf{h}_j(x)$ son denominados polinómios de Lagrange, quienes poseen la propiedad notable de estar correlacionados con un conjunto de puntos $\chi_P \in \mathbb{R}^d$ tal que, $\mathbf{h}_i(x_j) = \delta_{i,j}$ si $x_i \in \chi_P$ y donde $\delta_{i,j}$ representa la delta de Kronecker [16].

Ésta propiedad de los polinómios de Lagrange toma una mayor importancia, cuando los puntos nodales χ_P son elegidos de tal forma que coincidan con los puntos provistos por un método de integración numérica, es ahí donde los polinómios de Lagrange toman su mayor potencial en el MEF, dado que implica el no cálculo del valor exacto del polinomio en dicho punto, reduciendo considerablemente el costo computacional de su implementación. Sin embargo esta reducción del costo, es contrarrestada por el no cumplimiento de continuidad entre elementos de grado polinomial P distinto, lo cual impide su uso en versiones adaptativas del método de Elementos Finitos. Los elementos finitos lineales son un buen ejemplo de expansión nodal donde los puntos nodales corresponden a los vértices del elemento maestro.

Las funciones modales no se encuentran ligadas a un conjunto de puntos nodales χ_P como lo hace su contraparte nodal, y presenta algunas ventajas que van a ser estudiadas a profundidad a

¹P: Grado polinomial asociado

continuación.

2.2. Funciones Jerárquicas

La idea de manipular de forma independiente el grado polinomial asociado a cada uno de los elementos geométricos pertenecientes a la malla \mathcal{T}_h en el MEF, así como las condiciones necesarias para obtener una solución adecuada a los estamentos de conformidad [57], fue presentada y desarrollada en gran medida en el artículo publicado [46]. En él, se postulaba las condiciones necesarias para mantener el estamento matemático del MEF en una nueva versión.

1. La continuidad entre dos elementos que comparten un lado, debe ser mantenida exactamente sin importar el orden polinomial de los elementos.
2. Las funciones base correspondientes a una aproximación polinomial de orden P , constituyen un subconjunto de las funciones correspondientes a la aproximación polinomial de orden $(P + 1)$. Como consecuencia de esto, la matriz de rigidez/masa de un elemento de orden P es una submatriz de la matriz de rigidez/masa del mismo elemento pero con orden polinomial $> P$.

La segunda característica definida por Peano [46], es la definición formal correspondiente a un espacio de funciones jerárquicas. El hecho que un espacio polinomial P sea un subespacio de uno cuyo orden polinomial $> P$, permite una reducción considerable en el número de calculos necesarios al aumentar el grado polinomial en una unidad.

Para dar un estudio mas profundo de la construcción y propiedades de las bases jerárquicas, definimos el elemento maestro como:

$$\kappa_r = \{(\epsilon, \eta) \mid -1 \leq \epsilon \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1\} \quad (2.1)$$

quien se encuentra esquematizado en la figura 2.1.

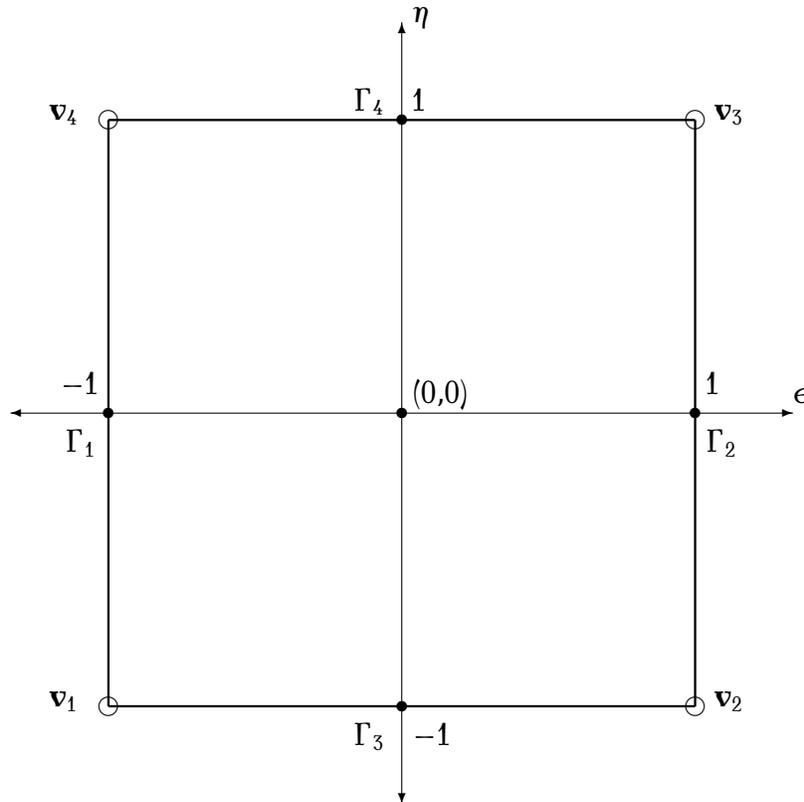


Figura 2.1: Elemento Maestro Cuadrilatero κ_r

Una vez definido el elemento maestro κ_r y sus convenciones, las funciones jerárquicas se dividen en: *Funciones Vértice*, *Funciones Arista* y *Funciones Internas*.

Definición 2.2.1 (Espacio de Funciones Vértice Φ_v) Las Funciones Vértice están asociadas a cada un de los vértices v_i del elemento κ_r , las cuales son usualmente bilineales:

$$\phi_1^v(\epsilon, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \epsilon)(1 - \eta) \quad , \quad (2.2)$$

$$\phi_2^v(\epsilon, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \epsilon)(1 - \eta) \quad , \quad (2.3)$$

$$\phi_3^v(\epsilon, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \epsilon)(1 + \eta) \quad , \quad (2.4)$$

$$\phi_4^v(\epsilon, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \epsilon)(1 + \eta) \quad . \quad (2.5)$$

De ésta manera el espacio de funciones vértice esta dado por

$$\Phi_v(\kappa_r) = \{\phi_1^v, \phi_2^v, \phi_3^v, \phi_4^v\} \quad . \quad (2.6)$$

Con esta construcción, el espacio de funciones vértice tiene una dimensión $\mathcal{N}_v = 4$.

Definición 2.2.2 (Espacio Funciones Arista Φ_r^P) Las Funciones Aristas son definidas sobre cada uno de los lados Γ_i con $i = 1, 2, 3$ y 4 que componen el elemento κ_r .

$$\phi_i^{\Gamma_1}(\epsilon, \eta) = \frac{1}{2}(1 - \epsilon)\psi_i(\eta) \quad , \quad i = 1, \dots, P_1 \quad , \quad (2.7)$$

$$\phi_j^{\Gamma_2}(\epsilon, \eta) = \frac{1}{2}(1 + \epsilon)\psi_j(\eta) \quad , \quad j = 1, \dots, P_2 \quad , \quad (2.8)$$

$$\phi_k^{\Gamma_3}(\epsilon, \eta) = \frac{1}{2}(1 - \eta)\psi_k(\epsilon) \quad , \quad k = 1, \dots, P_3 \quad , \quad (2.9)$$

$$\phi_l^{\Gamma_4}(\epsilon, \eta) = \frac{1}{2}(1 + \eta)\psi_l(\epsilon) \quad , \quad l = 1, \dots, P_4 \quad , \quad (2.10)$$

donde $\psi_i(\xi)$, con $i = 1, \dots, P_l$ representa una función continua definida en el intervalo $[-1, 1]$, quien sera estudiada en profundidad en secciones próximas. Los valores $P_l \leq P - 1$, con $l = 1, 2, 3, 4$ son determinados por la Regla Mínima, quien garantiza la continuidad de las funciones base entre elementos que poseen una arista en común. Asi, el espacio de funciones arista toma la forma

$$\Phi_{\Gamma}^P(\kappa_r) = \{ \phi_i^{\Gamma_1}, \phi_j^{\Gamma_2}, \phi_k^{\Gamma_3}, \phi_l^{\Gamma_4} \} \quad , \quad (2.11)$$

cuya dimensión es

$$\mathcal{N}_{\Gamma}^P = \sum_{i=1}^4 P_i \quad . \quad (2.12)$$

Definición 2.2.3 (Espacio de Funciones Internas Φ_{Γ}^P) Las Funciones Internas, se caracterizan por ser nulas tanto en las aristas Γ_i como en los vértices \mathbf{v}_i , $i = 1,2,3,4$, justamente descritas por la forma

$$\phi_k^{\Gamma}(\epsilon, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \epsilon^2)(1 - \eta^2)\psi_i(\epsilon)\psi_j(\eta) \quad , \quad \text{con } 0 \leq i + j \leq P - 2 \quad \text{y } k = 1, \dots, \mathcal{N}_{\Gamma}^P. \quad (2.13)$$

De esta forma, el número de funciones internas posibles en un elemento con grado polinomial asociado P es:

$$\mathcal{N}_{\Gamma}^P = (P - 1)^2 \quad . \quad (2.14)$$

Por lo tanto, el espacio de funciones que agrupa a las funciones internas es denotado por Φ_{Γ}^P .

Usando la construcción de los espacios de funciones vértice, arista e internas, definimos el espacio de funciones base asociados al elemento maestro κ_r de grado polinomial P , como :

Definición 2.2.4 (Espacio de Funciones Base \mathcal{V}^P) Dado un elemento geométrico de referencia definido en la forma (2.1), un subespacio de funciones base de grado polinomial P se define como :

$$\mathcal{V}^r := \Phi_v \cup \Phi_{\Gamma}^P \cup \Phi_{\Gamma}^P \quad , \quad (2.15)$$

desarrolladas en las secciones 2.2.1, 2.2.2 y 2.2.3. Así, el número de **Grados de Libertad** \mathcal{N}_P asociado al elemento maestro κ_r con grado polinomial P , es:

$$\mathcal{N}^P = 4 + (P - 1)^2 + \sum_{i=1}^4 P_i \quad , \quad (2.16)$$

por lo tanto el espacio de funciones \mathcal{V}^r esta compuesto por un conjunto de funciones $\{\phi_k\}$ tal que $\phi_k \in \{\Phi_v, \Phi_{\Gamma}^P, \Phi_{\Gamma}^P\}$ con $k = 1, \dots, \mathcal{N}^P$.

En algunos textos como [37], la construcción de las funciones base de aproximación, se hace apartir de la definición de un espacio de funciones S el cual es definido por

$$S_P(\epsilon) = \left\{ \frac{1}{2}(1 - \epsilon), \frac{1}{2}(1 + \epsilon), (1 - \epsilon^2)\psi_1(\epsilon), \dots, (1 - \epsilon^2)\psi_{P-1} \right\} \quad \text{con } \epsilon \in [-1, 1] \quad .$$

De éste modo el espacio de funciones \mathcal{V}^r es generado como un producto tensorial \otimes , de forma que

$$\mathcal{V}^r = S_p(\epsilon) \otimes S_q(\eta) \quad , \quad 1 \leq p + q \leq P - 1 \quad .$$

2.3. Polinómios Ortogonales ψ

La elección de las funciones ψ_k , corresponde un punto fundamental de nuestro trabajo, especialmente su comportamiento en estudio de problemas de contorno, con discontinuidades en la frontera. Las funciones ψ_k hacen parte de una familia de polinómios que se caracterizan por ser ortogonales en un espacio de Hilbert $\mathcal{H}_\omega(I)$, donde I es el intervalo $[-1, 1]$ y ω es denominada función de peso o de ponderamiento. En la versión *hp* del Método de Elementos Finitos presentada por [57], se usa los polinómios de Legendre y Lobatto (tambien conocidos como *Int-*

Legendre), como elección de las funciones ψ_k , principalmente por su buen comportamiento en orden polinomial 10 o superior, así como su precisión numérica en la evaluación numérica de las integrales.

Es característico de los **Métodos Espectrales** hacer uso de familias de polinómios ortogonales. La familia de polinómios de Chebyshev de primer grado ha sido usada en la solución de problemas de contorno con condiciones de frontera periódicas, donde la selección adecuada de los nodos que componen la malla, permite hacer uso de las propiedades de ortogonalidad y su respectiva evaluación en la construcción de la matriz de rigidez/masa [61]. Sin embargo, en este trabajo vamos hacer uso de los polinómios de Chebyshev de segundo grado, especialmente por estar definidos en el intervalo $[-1,1]$ y por tener una función de peso ω , definida como se muestra en la tabla 2.1: las polinómios de Chebyshev de primer orden, presenta una función de peso que presenta discontinuidades en los extremos del intervalo $[-1,1]$, lo cual da lugar a problemas de arredondamiento durante los cálculos efectuados en la construcción de la matriz de rigidez/masa.

Nombre	Parámetro	$\psi_n(\epsilon)$	$\omega(\epsilon)$
Legendre	-	$\mathbf{P}_n(\epsilon)$	1.0
Lobatto	-	$\mathbf{L}_n(\epsilon)$	1.0
Chebyshev 2°	-	$\mathbf{U}_n(\epsilon)$	$(1 - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}}$
Ultraesféricos	λ	$\mathbf{C}_n^{(\lambda)}(\epsilon)$	$(1 - \epsilon^2)^{\lambda - \frac{1}{2}}$
Jacobi	α, β	$\mathbf{J}_n^{(\alpha, \beta)}(\epsilon)$	$(1 - \epsilon)^\alpha (1 + \epsilon)^\beta$

Cuadro 2.1: Polinómios Ortogonales [1],[16]

Aunque los polinómios Jacobi abarcan los polinómios de Legendre como un caso particular, su uso en la construcción de bases jerárquicas no ha sido del todo puesta en práctica en el Método de Galerkin clásico. Sin embargo a tomado un lugar importante en una nueva metodología numérica denominada *Método de Galerkin Discontinuo* [30], dado que estos remueven pequeñas

oscilaciones presentes en la solución, cerca a las discontinuidades que son característicos en los problemas en los cuales ésta nueva metodología esta siendo usada [37]. Por esta razón y como posible uso en trabajos posteriores, los polinómios de Jacobi han sido tenidos en cuenta en éste estudio.

Como una alternativa a las anteriores familias y como principal característica el estar definida en el intervalo $[-1,1]$, los polinómios de Gegenbauer o asi llamados polinómios Ultraesféricos van a ser tenidos en cuenta en éste estudio de comportamiento de funciones jerárquicas en problemas de contorno con discontinuidades.

Un estudio de las propiedades de ortogonalidad, relaciones de recurrencia asi como su relaciones de diferenciación, de las anteriores familias de polinómios ortogonales, estan presentes en el libro [1], pero para dar lugar a un buen uso de la notación, la tabla 2.1 presenta algunas de éstas.

Para dar una muestra de las características que presentan tanto las funciones vertices, de arista e internas que componen el espacio \mathcal{V}^r , en los figuras 2.2, 2.3 y 2.4 se presentan las funciones base ϕ de grado menor de 4 siguiendo la convención acordada en el esquema 2.1, construidas a partir de las funciones polinomiales de *Jacobi* (ver tabla 2.1) con $\alpha = 1,0$ y $\beta = 1,0$.

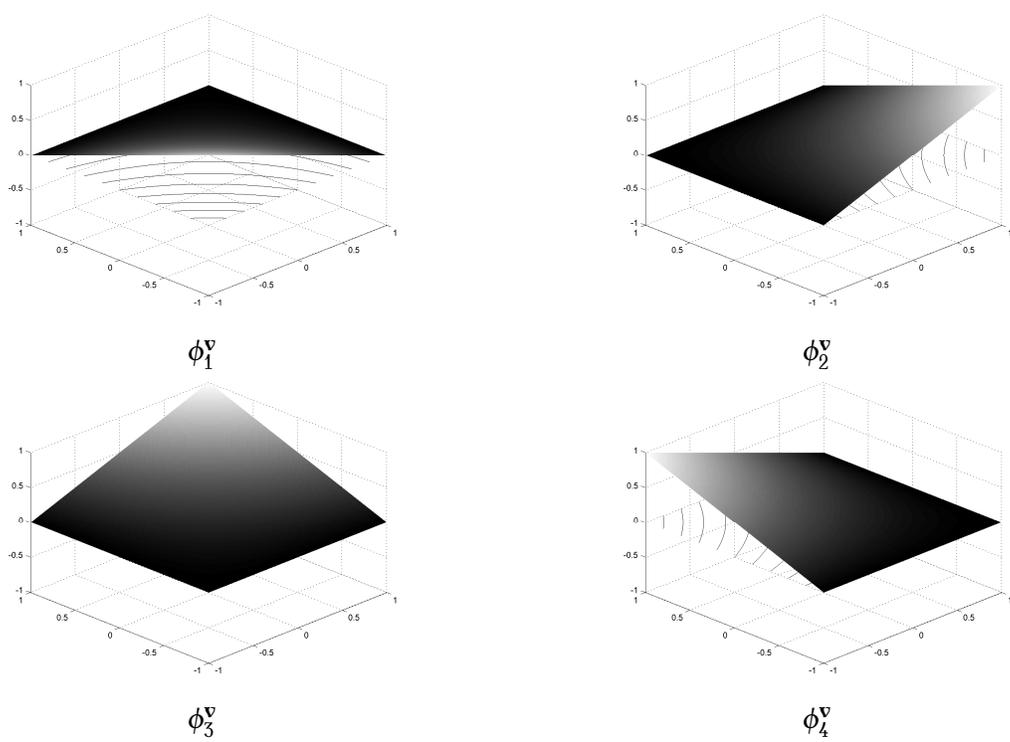


Figura 2.2: *Funciones Vértices Modales de Jacobi*

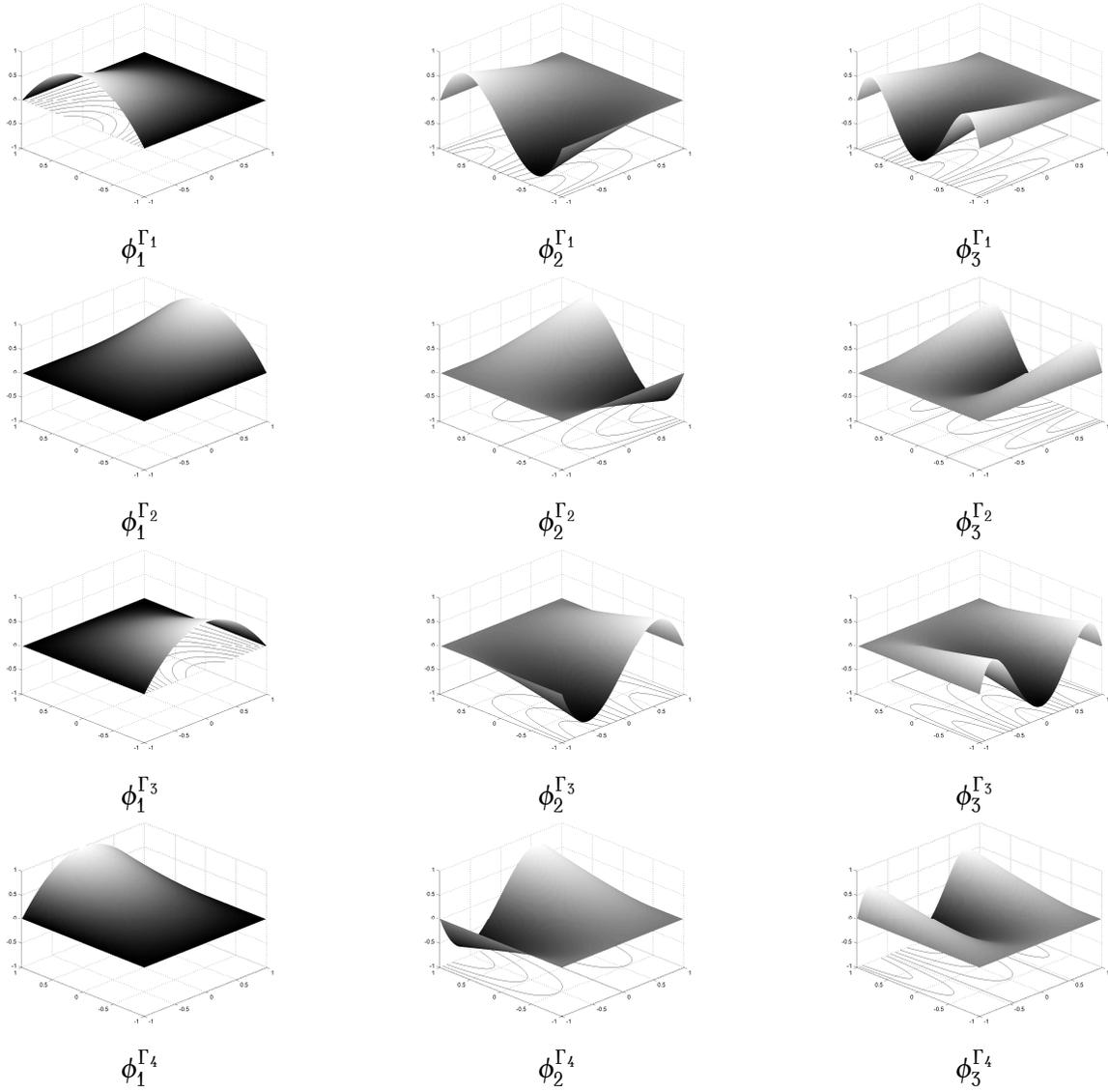


Figura 2.3: *Funciones Aristas Modales de Jacobi*

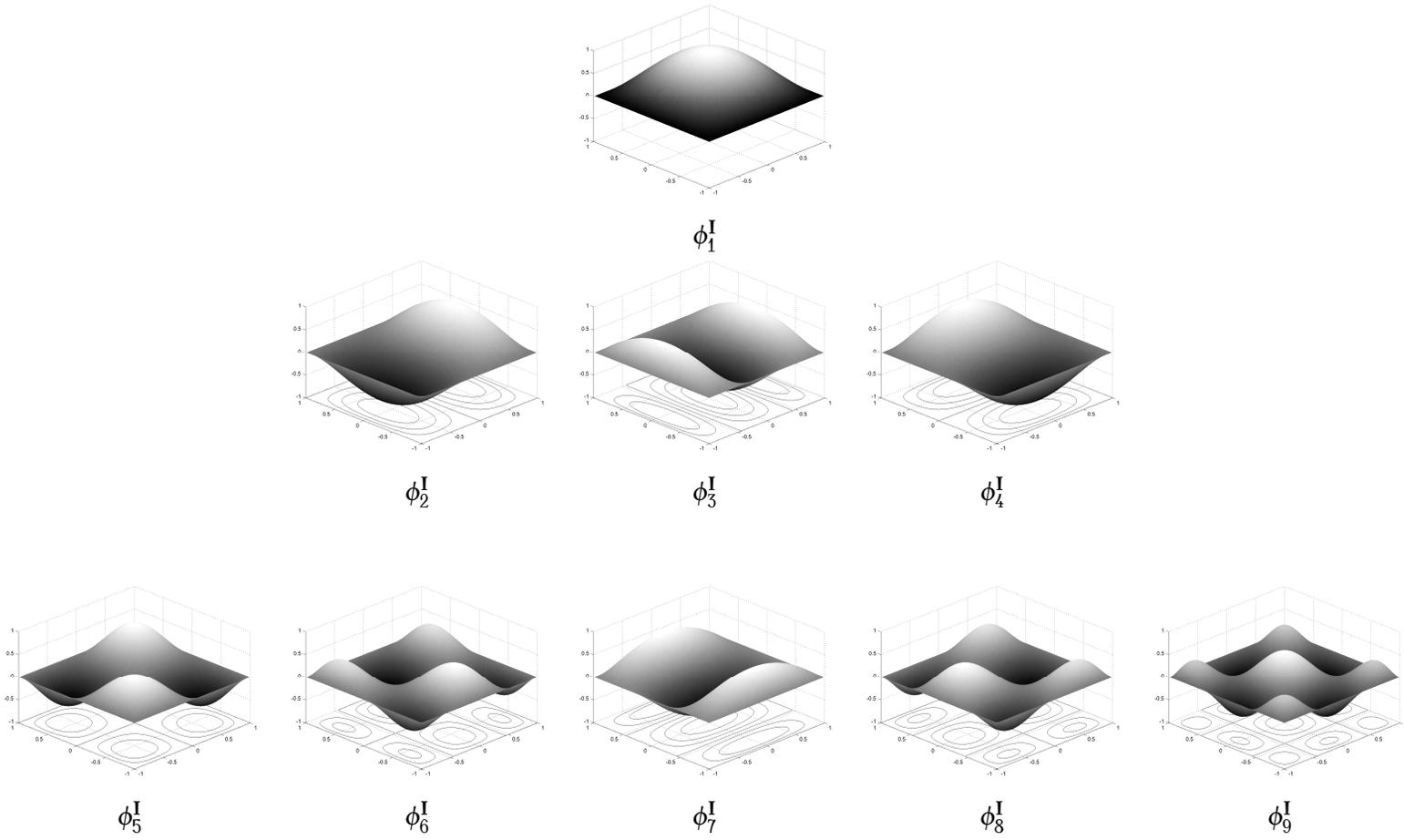


Figura 2.4: *Funciones Internas Modales de Jacobi*

Capítulo 3

Método de Elementos Finitos de Orden Superior

3.1. Introducción

En el capítulo 1, se formuló la base matemática y las propiedades de las funciones base que componen el Método de Elementos Finitos desde un punto de vista general. En éste capítulo vamos a dar lugar a una característica que hasta el momento no ha sido profundizada y corresponde a su localidad. Los operadores $a(\cdot, \cdot)$ y $b_f(\cdot)$ construyen un sistema lineal a partir de las funciones base definidas en el espacio $\mathcal{V}_{h,p}$. Sin embargo, su evaluación no es efectuada en todas las funciones que pertenecen a éste espacio, simultaneamente, debido al costo computacional que éste representa. La definición de las funciones base asociadas a cada elemento geométrico, permite atacar en una forma localizada el accionar de los operadores $a(\cdot, \cdot)$ y $b_f(\cdot)$, de forma que nos permite construir submatrices de rigidez/masa así como vectores de carga enlazados a cada uno de los elementos geométricos.

Pero no solamente la localidad de estas matrices nos permite construir de forma eficiente un algoritmo que de una solución aproximada a un problema de contorno, es por eso que se recurre

a una proyección de las funciones base ϕ en el dominio de referencia κ_r por medio de un conjunto de polinomios de Lagrange \mathbf{h}_i a los cuales se les asocia un conjunto de puntos nodales pertenecientes al dominio de referencia. La elección de dichos puntos nodales, así como el uso de los polinomios de Lagrange para representar las funciones base ϕ es característica de los métodos espectrales, de ahí que en la literatura, ésta metodología toma el nombre de **Spectral\HP Element Finite Method** [37]. Una vez se ha definido la nueva forma de las funciones base, el cálculo numérico de las integrales pasa a ser nuestro objetivo: la evaluación numérica de integrales definidas o indefinidas, clásicamente se realiza por medio de la Cuadratura de Gauss, en la cual se selecciona un conjunto adecuado de puntos sobre el dominio de integración junto con un número real ω asignado a cada punto, permite obtener de una forma aproximada el valor de dichas integrales [22].

Al hacer coincidir los puntos nodales de los polinomios de Lagrange con los puntos de cuadratura [16], gracias a las propiedades de los polinomios L_l , es posible reducir considerablemente el número de operaciones necesarias en la evaluación de las componentes de las matrices locales de masa \mathcal{M}^k , rigidiz \mathcal{R}^k así como del vector de carga $\tilde{\mathbf{b}}_f^k$, permitiéndonos obtener un algoritmo eficiente que es uno de las mayores obstáculos en solución de problemas de contorno por medio del análisis numérico.

Una vez se han obtenido de una forma eficiente las matrices y vector locales, el ensamble en matrices y vector globales deben hacerse teniendo en cuenta la continuidad que debe poseer la solución aproximada del problema de contorno tanto en las aristas como en los vértices de los elementos. De ahí, que se hace indispensable la formulación de un conjunto de **Reglas de Conformidad** que garanticen esto.

3.2. Matrices de Rigidez y Masa Locales

La solución al problema discreto formulado en la ecuación (1.15), plantea el uso de los operadores $a(\cdot, \cdot) : \mathcal{V}_{h,p} \times \mathcal{V}_{h,p} \rightarrow \mathfrak{R}$ y $b_f(\cdot) : \mathcal{V}_{h,p} \rightarrow \mathfrak{R}$ en la solución del problema variacional discreto. Al estar trabajando en el entorno matemático del Método de Elementos Finitos, el operador $a(\cdot, \cdot)$ aplicado en el espacio $\mathcal{V}_{h,p}$ y al éste estar definido como la unión de un conjunto de subespacios $\mathcal{V}^\kappa = \mathcal{V}^r \circ \xi^\kappa$ con $k = 1, \dots, N$ (ver ecuación (1.14)), el operador $a(\cdot, \cdot)$ aplicado a una par de funciones $\tilde{\phi}_i^\kappa, \tilde{\phi}_j^\kappa \in \mathcal{V}_{h,p}$ asociadas a un mismo elemento κ , es:

$$a(\tilde{\phi}_i^\kappa, \tilde{\phi}_j^\kappa) = \alpha \int_{\Omega} (\nabla \tilde{\phi}_i^\kappa)^T (\nabla \tilde{\phi}_j^\kappa) \partial \bar{\Omega} + \lambda \int_{\Omega} \tilde{\phi}_i^\kappa \tilde{\phi}_j^\kappa \partial \bar{\Omega} \quad . \quad (3.1)$$

Recordando que las funciones $\tilde{\phi}_i^\kappa \in \mathcal{V}^\kappa$ toman valores diferentes de cero, en el elemento geométrico κ , la integral en todo el dominio $\bar{\Omega}$ es reducida a dicho elemento, de tal forma que

$$a(\tilde{\phi}_i^\kappa, \tilde{\phi}_j^\kappa) = \alpha \int_{\kappa} (\nabla \tilde{\phi}_i^\kappa)^T (\nabla \tilde{\phi}_j^\kappa) \partial \kappa + \lambda \int_{\kappa} \tilde{\phi}_i^\kappa \tilde{\phi}_j^\kappa \partial \kappa \quad . \quad (3.2)$$

Usando la regla de la cadena y teniendo en cuenta el operador biyectivo ξ^κ , la ecuación (3.2) es reducida a:

$$a(\tilde{\phi}_i^\kappa, \tilde{\phi}_j^\kappa) = \alpha \int_{\kappa_r} \mathcal{J}^\kappa [\mathbf{D} \nabla \phi_i]^T [\mathbf{D} \nabla \phi_j] \partial \kappa_r + \lambda \int_{\kappa_r} \mathcal{J}^\kappa \phi_i \phi_j \partial \kappa_r \quad (3.3)$$

donde

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \epsilon}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial y} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

y $\mathcal{J}^\kappa(\epsilon, \eta) = \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(\epsilon,\eta)} \right|$ representa el *Jacobiano* de operador ξ^κ .

El caso en donde las funciones $\tilde{\phi}_i^\kappa$ y $\tilde{\phi}_j^\beta$ pertenecen a subespacios \mathcal{V}^κ y \mathcal{V}^β diferentes con $\partial \kappa \cap \partial \beta = \emptyset$, el valor del operador $a(\tilde{\phi}_i^\kappa, \tilde{\phi}_j^\beta) = 0$, para $i = 1, \dots, N^\kappa$ y $j = 1, \dots, N^\beta$.

Si es evaluado el operador $a(\cdot, \cdot)$ en funciones $\tilde{\phi}_i^\kappa$ y $\tilde{\phi}_j^\beta$, el valor asignado al operador sera calculado

usando la ecuación (3.3), si $\partial\kappa \cap \partial\beta \neq \emptyset$, para aquellas funciones i, j pertenecientes $\mathcal{V}^\kappa \cap \mathcal{V}^\beta$.

Bajo el anterior análisis, para cada elemento $\kappa \in \mathcal{T}_h$ y sus primeros ocho vecinos mas cercanos que comparten tanto los vértices como sus aristas, el cálculo del operador a aplicado sobre el subespacio \mathcal{V}^κ se encuentra descrito en la ecuación (3.3). Para hacer un análisis de ésta nueva representación local del operador bilineal $a(\cdot, \cdot)$, hacemos un estudio de cada uno de los terminos que lo componen: el primer termino en la ecuación (3.3) al ser evaluado en las \mathcal{N}^κ funciones que componen el subespacio \mathcal{V}^κ , da lugar a la matriz local de rigidez, llamada asi principalmente por su presencia en el análisis numérico de estructuras usando el **Método de Elementos Finitos** [68]. La matriz de rigidez local, se caracteriza por usar las derivadas de las funciones de la base local, en el caso unidimensional, y del grandiente de las funciones base, cuando el sistema se encuentra en dos dimensiones, el cual surge a partir del análisis matemático de las integrales de superficie sobre el dominio $\bar{\Omega}$, el cual se expuso en el Capítulo 1.

3.2.1. Matriz de Rigidez Local \mathcal{R}^κ

La **Matriz de Rigidez** en función de las funciones base pertenecientes a \mathcal{V}^κ se define como:

$$\mathcal{R}^\kappa = [r_{i,j}]_1^{\mathcal{N}^\kappa} \quad , \quad r_{i,j} = \int_{\kappa_r} \mathcal{G}^\kappa (\nabla \phi_i)^T (\mathbf{D}^T \mathbf{D}) (\nabla \phi_j) \partial\kappa_r \quad . \quad (3.5)$$

La evaluación numérica de la *Matriz de Rigidez* representa un reto desde el punto de vista de numérico, principalmente por la evaluación del operador diferencial ∇ . Por ésto, es necesario recurrir a una representación matricial de éste operador de forma tal, que al ser evaluada en los puntos de integración los cuales son dispuestos por un método de cuadratura, el costo computacional sea mínimo. Si asumimos que la función polinomial $\phi_i(\epsilon, \eta)$ de orden P^κ , tiene una expresión exacta in terminos de los polinomios de Lagrange $\mathbf{h}_i(\epsilon, \eta)$ a través de un conjunto de Q^2 puntos nodales $\chi_{P^\kappa} = \{(\epsilon_i, \eta_i)\} \in \kappa_r$ ($1 \leq i \leq Q^2$) tal que:

$$\phi_j(\epsilon, \eta) = \sum_{i=1}^{Q^2} \phi_j(\epsilon_i, \eta_i) \mathbf{h}_i(\epsilon, \eta) \quad , \quad (3.6)$$

donde $Q \geq P^k + 1$ ¹. Usando la representación tensorial de las funciones de Lagrange

$$\mathbf{h}_i(\epsilon, \eta) = \mathbf{h}_k(\epsilon) \mathbf{h}_l(\eta) \quad \text{con} \quad 1 \leq k + l \leq 2Q \quad , \quad i = 1, \dots, Q^2 \quad , \quad (3.7)$$

ϕ_j puede ser escrita como

$$\phi_j(\epsilon, \eta) = \sum_{k,l=1}^Q \phi_j(\epsilon_k, \eta_l) \mathbf{h}_k(\epsilon) \mathbf{h}_l(\eta) \quad . \quad (3.8)$$

Aplicando el operador ∇ a la definición (3.8) y usando la notación vectorial \vec{i}, \vec{j} como vectores unitarios,

$$\nabla \phi_j(\epsilon, \eta) = \left(\sum_{k,l=1}^Q \phi_j(\epsilon_k, \eta_l) \frac{d\mathbf{h}_k(\epsilon)}{d\epsilon} \mathbf{h}_l(\eta) \right) \vec{i} + \left(\sum_{k,l=1}^Q \phi_j(\epsilon_k, \eta_l) \mathbf{h}_k(\epsilon) \frac{d\mathbf{h}_l(\eta)}{d\eta} \right) \vec{j} \quad . \quad (3.9)$$

Una vez hemos obtenido la representación vectorial del operador ∇ en función de los polinómios de Lagrange \mathbf{h}_k , necesarios en la expansión de las funciones base ϕ , nos disponemos a definir los puntos nodales pertinentes, χ_{P^k} . La elección de los nodos se hace teniendo en cuenta el método numérico de integración que sera implementado en la evaluación de los respectivos terminos, es decir los puntos nodales se harán coincidir con los puntos de evaluación en un método de integración numérica. Para un estudio mas profundo acerca de la obtención de los puntos de integración χ_{P^k} así como sus respectivos pesos ω , en el Apéndice B se desarrolla la formulación necesaria para dicho campo.

En nuestro caso escogeremos éstos puntos nodales, usando el **Método de Cuadratura de Gauss-Lobatto-Legendre**, cuyos puntos nodales y pesos en el intervalo $[-1,1]$, se encuentran expuestos en las ecuaciones (B.10) y (B.11) respectivamente.

¹La elección adecuada de el número de puntos nodales Q , depende del grado polinomial y la precisión que se este buscando al evaluar la integración por medio de un método numérico.

La operación de evaluar las funciones nodales h_k en los puntos de integración, nos permite garantizar que $\mathbf{h}_m(\epsilon_n) = \delta_{mn}$ siendo δ la delta de Kronecker. De esta forma el operador ∇ evaluado en los puntos $(\epsilon_p, \eta_p) \in \chi_{p^k}$ nos da:

$$\nabla \phi_j(\epsilon_p, \eta_p) = \left(\sum_{k,l=1}^Q \phi_j(\epsilon_k, \eta_l) \frac{d\mathbf{h}_k(\epsilon)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon_p} \delta_{lp} \right) \vec{i} + \left(\sum_{k,l=1}^Q \phi_j(\epsilon_k, \eta_l) \delta_{kp} \frac{d\mathbf{h}_l(\eta)}{d\eta} \Big|_{\eta_p} \right) \vec{j} , \quad (3.10)$$

con lo cual

$$\nabla \phi_j(\epsilon_p, \eta_p) = \left(\sum_{k=1}^Q \phi_j(\epsilon_k, \eta_p) \frac{d\mathbf{h}_k(\epsilon)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon_p} \right) \vec{i} + \left(\sum_{l=1}^Q \phi_j(\epsilon_p, \eta_l) \frac{d\mathbf{h}_k(\eta)}{d\eta} \Big|_{\eta_p} \right) \vec{j} , \quad (3.11)$$

ahora usando la notación [37] la expresión de la primera derivada de los polinómios de Lagrange $\mathbf{h}_k(\epsilon)$ en función de los puntos nodales calculados a partir de la Cuadratura de Gauss, es :

$$\mathbf{h}_k(\epsilon_l) = \begin{cases} -Q(Q-1)/4 & \text{si } k=l=1 , \\ +Q(Q-1)/4 & \text{si } k=l=Q , \\ 0 & \text{si } k=l, \quad 1 < k < Q \\ \frac{\mathbf{P}_{Q-1}(\epsilon_k)}{\mathbf{P}_{Q-1}(\epsilon_l)(\epsilon_k - \epsilon_l)} & \text{en otro caso ,} \end{cases} \quad (3.12)$$

siendo $\mathbf{P}_k(\epsilon)$ un polinómio de Legendre de grado k .

Si denotamos por $\bar{\chi}$ como la matriz que agrupa los Q^2 puntos nodales, de forma tal que $\bar{\chi} = [(\epsilon_i, \eta_j)]$, en notación matricial el gradiente de una función base local ϕ_j evaluada en los puntos nodales $\bar{\chi}$, es :

$$(\nabla \phi_j)(\bar{\chi}) = \mathbf{C}^T \left(\mathbf{V}_j \vec{i} + \mathbf{V}_j^T \vec{j} \right) , \quad (3.13)$$

donde $\mathbf{C}, \mathbf{V}_j \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$ definidas como :

$$\mathbf{C} = [c_{k,l}] , \quad c_{k,l} = \mathbf{h}_k(\epsilon_l) \quad (3.14)$$

$$\mathbf{V}_j = [v_{k,l}] , \quad v_{k,l} = \phi_j(\epsilon_k, \eta_l) , \quad (3.15)$$

con $k, l = 1, \dots, Q$. Una vez obtenida la representación matricial del operador ∇ aplicada a una función base local ϕ y evaluado en los puntos nodales $\bar{\chi}$, procedemos a substituir esto en el integrado de la ecuación (3.5), de forma tal que

$$\mathbf{I}^{i,j} = \left[(\nabla \phi_i)^T \mathbf{D}^T \mathbf{D} (\nabla \phi_j) \right] (\bar{\chi}) = \left[\mathbf{C}^T \left(\mathbf{v}_i \vec{i} + \mathbf{v}_i^T \vec{j} \right) \right]^T \mathbf{D}^T \mathbf{D} \left[\mathbf{C}^T \left(\mathbf{v}_j \vec{i} + \mathbf{v}_j^T \vec{j} \right) \right] . \quad (3.16)$$

La evaluación del integrando en los nodos de integración debe ser complementada al hacer el producto termino a termino con la matriz de pesos \mathbf{W} generada a partir de la ecuación (B.11), con lo cual

$$\mathbf{W} = [\omega_{i,j}] \quad \text{con} \quad \omega_{i,j} = \omega_i \omega_j, \quad i, j = 1, \dots, Q . \quad (3.17)$$

Finalmente la **Matriz Rigidez** $\mathcal{R}^\kappa \in \mathfrak{R}^{\mathcal{N}^\kappa \times \mathcal{N}^\kappa}$ cuyas componentes hemos denotado por r_{ij} , está dado por :

$$r_{i,j} = \sum_{k,l=1}^Q \mathcal{G}_{k,l}^\kappa \mathbf{I}_{k,l}^{i,j} \omega_{k,l} , \quad (3.18)$$

donde $\mathcal{G}_{k,l}^\kappa = \mathcal{G}^\kappa(\epsilon_k, \eta_l)$.

3.2.2. Matriz de Masa Local \mathcal{M}^κ

El proceso de construcción de la **Matriz de Rigidez** que se dio lugar en la sección anterior, nos proporciona las bases en la metodología de calcular las componentes de la **Matriz de Masa**, quien es definida como

$$\mathcal{M}^\kappa = [m_{i,j}]_1^{\mathcal{N}^\kappa} , \quad m_{i,j} = \int_{\kappa_r} \mathcal{G}^\kappa \phi_i \phi_j \partial \kappa_r . \quad (3.19)$$

Usando la representación de las funciones base ϕ en función de los polinómios de Lagrange $\mathbf{h}_i(\epsilon)$ dada en la ecuación (3.8) así como la propiedad $\mathbf{h}_i(\epsilon_j) = \delta_{ij}$, tenemos

$$\mathbf{V}_i(\bar{\chi}) = [\phi_i(\epsilon_k, \eta_l)] \quad \text{con } k, l = 1, \dots, Q. \quad (3.20)$$

Así las componentes $m_{i,j}$ de la **Matriz de Masa** $\mathcal{N}^\kappa \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$ en su forma numérica están dadas por:

$$m_{i,j} = \sum_{k,l=1}^Q \mathcal{J}_{k,l}^\kappa \phi_i(\epsilon_k, \eta_l) \phi_j(\epsilon_k, \eta_l) \omega_{k,l}. \quad (3.21)$$

De esta forma el operador $a(\cdot, \cdot)$ aplicado a un conjunto de funciones $\mathcal{V}^\kappa \subset \mathcal{V}_{h,p}$ restringido aquellas funciones definidas en un elemento κ , toma una forma matricial

$$a(\mathcal{V}^\kappa, \mathcal{V}^\kappa) \cong \alpha \mathcal{R}^\kappa + \lambda \mathcal{M}^\kappa. \quad (3.22)$$

En la presencia de un termino disipativo ∇u en el operador \mathcal{L} descrito en la ecuación (1.7), el operador $a(\cdot, \cdot)$ sufre una modificación de tal forma que al ser aplicado en el espacio \mathcal{V}^κ , puede ser representado como :

$$a(\mathcal{V}^\kappa, \mathcal{V}^\kappa) \cong \alpha \mathcal{R}^\kappa + \epsilon \mathcal{D}^\kappa + \lambda \mathcal{M}^\kappa, \quad ,$$

donde \mathcal{D}^κ es llamada **Matriz de Disipación** y ϵ , factor de amortiguamiento [55].

3.3. Vector de Carga Local \tilde{b}_f^κ

En las secciones precedentes se hizo un estudio del operador bilineal $a(\cdot, \cdot)$ así como su uso en la construcción de las matrices de rigidez y masa locales. Siguiendo con esta línea, continuamos con el operador lineal $b_f(\cdot)$ definido en la ecuación (1.11) el cual está compuesto de dos términos: en el primero se encuentra planteado el producto interno entre una función de carga $f(x,y)$ y cada una de las funciones base pertenecientes al espacio $\mathcal{V}_{h,p}$, seguido a esto en un segundo término se

encuentran presentes las condiciones de fronteras impuestas en el problema de valor de contorno. En ésta sección desarrollaremos un estudio del primer término donde se encuentra involucrado la función de carga f y en secciones posteriores daremos un tratamiento especial al término que involucra las condiciones de frontera del problema.

Consideremos el operador $\tilde{b}_f : \mathcal{V}_{h,p} \rightarrow \mathfrak{R}$ definido como

$$\tilde{b}_f(\tilde{\phi}_i^\kappa) = \int_{\Omega} f(x,y) \tilde{\phi}_i^\kappa(x,y) \partial\bar{\Omega} \quad , \quad (3.23)$$

siendo $\tilde{\phi}_i^\kappa \in \mathcal{V}^\kappa$. Teniendo en cuenta que la función $\mathcal{V}^\kappa \subset \mathcal{V}_{h,p}$ el operador se transforma en:

$$\tilde{b}_f(\tilde{\phi}_i^\kappa) = \int_{\kappa} f(x,y) \tilde{\phi}_i^\kappa(x,y) \partial\kappa \quad , \quad (3.24)$$

quien al aplicar el operador ξ^κ

$$\tilde{b}_f(\tilde{\phi}_i^\kappa) = \int_{\kappa_r} \mathcal{G}^\kappa f(x(\epsilon,\eta),y(\epsilon,\eta)) \phi_i(\epsilon,\eta) \partial\kappa_r \quad . \quad (3.25)$$

De igual forma que se uso el Método de Cuadratura de Gauss en el cálculo de las componentes de las matrices de Rigidez y Masa, evaluamos el integrando de la ecuación (3.25) en los Q^2 -puntos de cuadratura $(\epsilon_k, \eta_l) \in \kappa_r$ con $1 < l + k < 2Q$, y así :

$$\tilde{b}_f(\tilde{\phi}_i^\kappa) = \sum_{k,l=1}^Q \mathcal{G}_{k,l}^\kappa \mathcal{F}_{k,l} \phi_i(\epsilon_k, \eta_l) \omega_{k,l} \quad , \quad (3.26)$$

donde $\mathcal{F}_{kl} = (f \circ \xi^{-\kappa})(\epsilon_k, \eta_l)$. Una vez obtenido esta expresión y al aplicar el operador $\tilde{b}(\cdot)$ al subespacio de funciones $\mathcal{V}^\kappa \subset \mathcal{V}_{h,p}$ obtenemos el vector de carga $\tilde{b}^\kappa \in \mathfrak{R}^{N^\kappa}$ cuyas componentes son descritas por la ecuación (3.26).

3.4. Reglas de Conformidad

La solución aproximada de un problema de contorno bien comportado obtenida a través del Método de Galerkin clásico, debe ser \mathcal{C}^0 continua en todo el dominio de aproximación. Para ésto, el método de elementos finitos clásico usa como estrategia la superposición de las matrices locales en el ensamble de la matriz global de tal forma que los funciones lineales asociadas al mismo nudo pero definidas en elementos diferentes coincidan en un mismo valor, manteniendo la continuidad de la aproximación. En la versión- p del Método de Elementos Finitos, la continuidad no solamente debe ser preservada en los nodos que componen la malla, sino además, en las aristas de los elementos. La superposición de matrices locales también es usada en éste caso, mas sin embargo, el número de grados de libertad que son superpuestos deben ser coincidentes para elementos que poseen una arista en común y difieren en sus ordenes polinomiales.

Gracias a la naturaleza jerárquica de las bases polinómicas que han sido construidas a partir de funciones ortogonales, se puede afirmar que el conjunto de funciones base $\phi_j^{\Gamma_j}$ con $j = 1, \dots, P^\kappa$, conforman una base jerárquica restringida a dicha arista.

Una vez aclarada ésto, definimos los requerimientos de conformidad de un espacio de elementos finitos $\mathcal{K}_{h,p}$ [57], expuestos en el Lema 3.4.1.

Lema 3.4.1 *Considerese un dominio $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^2$ cubierto por una malla de elementos finitos $\mathcal{K}_{h,p}$, se dice \mathcal{H}^1 -conforme si y solamente si:*

1. $\mathcal{V}^\kappa \subset \mathcal{H}^1(\kappa)$ para cada elemento $\kappa \in \mathcal{T}_h$,
2. para cada arista en comun $\Gamma_{1,2} = \bar{\kappa}_1 \cap \bar{\kappa}_2$, con $\kappa_1, \kappa_2 \in \mathcal{T}_h$ la traza de $\tilde{\phi}^{\kappa_1}$ y $\tilde{\phi}^{\kappa_2}$ sobre $\Gamma_{1,2}$ debe ser la misma.

El espacio \mathcal{H}^1 impone los mas severos requerimientos de conformidad, es decir la solución aproximada debe ser continua globalmente. Ésto restringe los valores de la aproximación tanto en

los vértices como los lados de los elementos, no tanto así, las funciones que se anulan totalmente en las fronteras no se encuentran restringidas. En el caso de un refinamiento anisotrópico, en una aproximación \mathcal{H}^1 -conforme, el orden polinomial asignada a cada arista Γ_i de la malla física es igual al mínimo de los ordenes polinomiales asociados a los elementos geométricos que comparten dicha arista (ver Figuras 3.1 y 3.2).

Comentario.

Dado a la restricciones de continuidad en la frontera de los elementos, la **Regla Mínima** relaciona los grados polinomiales asignados a las aristas de cada uno de éstos, eliminando así su *independencia*. El grado polinomial asignado a cada uno de los elementos geométricos no generará en su totalidad el número de funciones base correspondientes, dado a la dependencia con sus cuatro vecinos mas cercanos. Los grados de libertad \mathcal{D}_f , entonces deben ser obtenidos para cada uno de los elementos geométricos y no existe una expresión explícita de éste número entero. Si el grado polinomial es fijado exactamente igual para todos los N elementos geométricos, el número de grados de libertad podría ser expresado como:

$$\mathcal{D}_f = \sum_{\kappa=1}^N \mathcal{N}^{P^\kappa} \quad (3.27)$$

donde \mathcal{N}^{P^κ} ese encuentra dada por la ecuación (2.16).

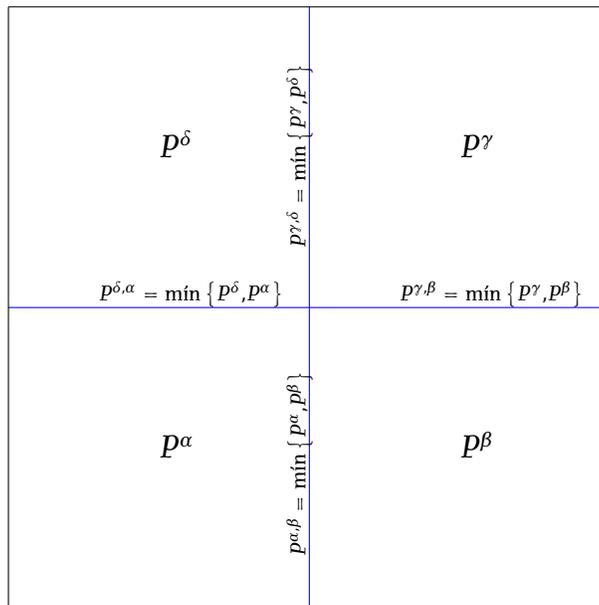
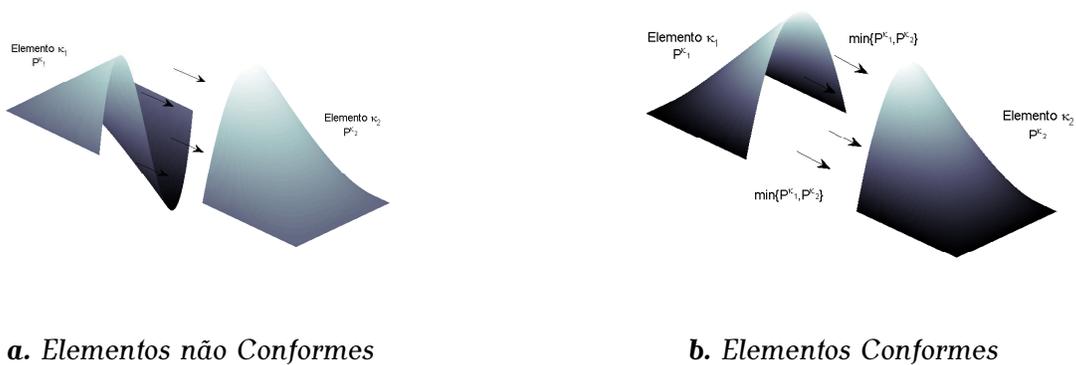


Figura 3.1: Aplicación de la **Regla Mínima de Conformidad** entre cuatro elementos adyacentes con grados polinomiales diferentes P^α , P^β , P^γ y P^δ [57].



a. Elementos não Conformes

b. Elementos Conformes

Figura 3.2: Exemplo de conformidade entre elementos geométricos κ_1 y κ_2 com grãos polinomiais P^{κ_1} y P^{κ_2} , diferentes.

Capítulo 4

Construcción de Mallas Elípticas Adaptativas

4.1. Introducción

La solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales como la expuesta en la ecuación (1.7) requiere la discretización del campo de trabajo $\bar{\Omega}$ en una colección de elementos geométricos, quienes agrupados forman un conjunto \mathcal{T}_h [59]. La discretización del dominio debe hacerse en una forma ordenada, tal que la identificación de los puntos que componen cada célula o elemento pueda hacerse de forma eficiente y garantizar que las condiciones de frontera (1.8) del problema de contorno, sean representadas de forma adecuada.

Existen diferentes metodologías para cumplir estas condiciones de la discretización \mathcal{T}_h del dominio $\bar{\Omega}$, sin embargo, en nuestro caso vamos a organizar los volúmenes elementales κ de tal forma que estos se encuentren alineados con las fronteras $\Gamma = \partial\bar{\Omega}$ del dominio $\bar{\Omega}$ y así, dar lugar a un sistema de coordenadas cartesianas rectangulares dispuesto sobre el dominio completo [32]. Aunque en la actualidad, la discretización \mathcal{T}_h del dominio físico, es usada en la solución de problemas de contorno por medio MEF, ésta está caracterizada por no plantear una forma estructurada

que en muchas ocasiones es importante si el problema físico incluye campos vectoriales, como lo son campos electromagnéticos, campos de flujo, etc.

En la versión hp del MEF, el refinamiento en la malla (refinamiento h) se hace en un paso posterior y dependiente al refinamiento en el grado polinomial [57], quien se realiza en aquellos lugares donde la solución aproximada presenta un error mayor a una tolerancia inicial, con lo cual, el criterio de parada del procedimiento depende de la continuidad y suavidad de la solución obtenida, en ausencia total de control por parte del usuario.

En el caso de sistemas con topologías complejas como las presentadas en problemas de flujo de gases [31], es primordial controlar de una forma diferencial la adaptabilidad de la malla, independientemente del refinamiento polinomial. Uno de los métodos que permiten éste control de la malla en ciertas regiones del dominio, son los métodos adaptativos usando sistemas de ecuaciones diferenciales. Sin embargo, éstos métodos de construcción de mallas adaptativas estructuradas presentan un costo computacional superior a sus contrapartes sin estructura, dado que deben ser generadas a partir de la solución de un problema de contorno [32].

En las secciones siguientes vamos a establecer una teoría somera de la construcción de mallas estructuradas adaptativas a partir de sistemas de ecuaciones diferenciales elípticas y daremos algunos ejemplos de su implementación en sistemas con geometrías comunmente usadas en el estudio de Dinámica de Fluidos Computacional.

4.2. Mallas Estructuradas

Generar numéricamente una malla será entendido como, organizar un conjunto de puntos obtenidos gracias la intersección entre familias de líneas que componen un sistema de coordenadas curvilíneo conforme a la frontera del dominio $\bar{\Omega}$. El uso de la intersección de las líneas que componen un sistema de coordenadas provee una estructura organizacional que sera proyectado en una malla rectangular fija, dispuesta en un sistema cartesiano clásico [60]. La generación de

una malla, en un dominio rectangular con un espaciamento entre líneas h uniforme, es un caso simple de discretización de un dominio físico, desafortunadamente, la mayoría de los dominios $\bar{\Omega}$ presentes en los problemas interesantes, no son rectangulares.

Con lo cual, al momento de construir una malla estructurada es deseable que ésta cumpla ciertas características [62].

1. **Regularidad.** Es necesario garantizar que las líneas que componen una misma *familia*, quienes dan forma a la malla final, no se crucen entre ellas y que sean lo mas cercanas a ser ortogonales.
2. **Suavidad.** Pequeñas diferencias en la forma y el tamaño de elementos adyacentes.
3. **Adaptatibilidad.** Se busca que en regiones de interes, la malla tenga la capacidad de mejorar la cantidad de líneas en tales espacios con la finalidad de tener una mayor cantidad información del fenómeno físico o de la geometría del problema.
4. **Alineamiento.** Es importante que la malla adopte y simplifique el análisis de los sistemas de estudio.

Estas características propias de las mallas estructuradas, pueden ser satisfechas de diversas formas. Una primera oportunidad de cumplir estas propiedades puede verse representada en la construcción de mallas algebraicas, en especial al usar el método de **Interpolación Transfinita (ITF)** [59]. La mayor ventaja de éste esquema es la velocidad con la cual la malla puede ser generada, una ecuación algebraica es usada para relacionar los puntos de la malla del dominio computacional \mathcal{Q} con sus pares presentes en la malla física $\bar{\Omega}$ [32].

4.3. Sistemas Elípticos

Las técnicas que hacen uso de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales estan basadas teóricamente en determinar un operador \mathfrak{E} encargado de transformar un espacio computacional \mathcal{Q}

en el físico [40]. La elección del tipo de ecuación (elípticas, parabólicas o hiperbólicas) requiere un cuidadoso estudio de las propiedades de la geometría del problema.

La formulación de un método elíptico para generar una malla estructurada, hace uso de un sistema elíptico de ecuaciones diferenciales definidas en un dominio \mathcal{Q} , quien junto con una condición de contorno $\partial\bar{\Omega}$, dan como resultado una transformación de coordenadas

$$\Xi : \mathcal{Q} \rightarrow \bar{\Omega} \quad (4.1)$$

donde $\mathcal{Q} = [0,1] \times [0,1] \subset \mathbb{R}^2$ y $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^2$. Para cada punto $(\eta, \epsilon) \in \mathcal{Q}$, llamado dominio computacional, se hace corresponder un único punto $(x, y) \in \bar{\Omega}$. Obtener ésta transformación de coordenadas, se hace construyendo una solución numérica a un problema de contorno de un sistema elíptico de ecuaciones, definido sobre el dominio \mathcal{Q} y cuyas condiciones de frontera estan dadas por la frontera Γ del dominio $\bar{\Omega}$ [40].

Una de las principales propiedades de usar sistemas elípticos de ecuaciones diferenciales, es la suavidad inherente de sus soluciones, cuya consecuencia directa es así mismo una suavidad en los segmentos de línea que componen las coordenadas curvilineas que se definen en el interior del dominio $\bar{\Omega}$. Sin embargo esta ventaja de suavidad, se ve influenciada por el costo computacional que representa calcular la solución numérica del sistema, dado que el sistema de ecuaciones puede llegar a presentar terminos no lineales, lo cual genera que su solución deba construirse nodo por nodo de forma iterativa [32].

La forma mas simple de construir una malla elíptica, es plantear el problema usando un sistema desacoplado de ecuaciones de **Laplace**, definidas en el dominio físico $\bar{\Omega}$.

$$\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial y^2} = 0 \quad , \quad \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = 0 \quad . \quad (4.2)$$

y su representación en el dominio computacional \mathcal{Q}

$$\Delta x = 0 \quad , \quad \Delta y = 0, \quad (4.3)$$

siendo Δ el operador diferencial

$$\Delta = (\eta_x^2 + \eta_y^2) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + 2(\eta_x \epsilon_x + \eta_y \epsilon_y) \frac{\partial^2}{\partial \eta \partial \epsilon} + (\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2) \frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2} \quad (4.4)$$

donde los terminos η_x , η_y , ϵ_x y ϵ_y ¹ son denominados como las **métricas** de la transformación Ξ [35]. Las métricas dan muestra de la relación entre las longitudes de arco en el espacio computacional y las longitudes de arco en el espacio físico. La expresión de las métricas debe ser definido totalmente en el espacio computacional \mathcal{Q} , por ésto y considerando las variables independientes de la transformación Ξ , las métricas pueden ser expresadas en terminos de η y ϵ

$$\eta_x = \mathcal{J}_\Xi y_\eta, \quad \eta_y = -\mathcal{J}_\Xi x_\epsilon, \quad \epsilon_x = -\mathcal{J}_\Xi y_\epsilon, \quad \epsilon_y = \mathcal{J}_\Xi x_\eta, \quad (4.5)$$

$$\mathcal{J}_\Xi = \frac{1}{y_\eta x_\epsilon - y_\epsilon x_\eta} \quad . \quad (4.6)$$

La función \mathcal{J}_Ξ representa el **Jacobiano** de la transformación Ξ y en general da una percepción de la relación entre un elemento de área $\partial a_{\mathcal{Q}}$ dado en espacio \mathcal{Q} y uno $\partial a_{\bar{\mathcal{Q}}}$ existente en el espacio físico. La forma exacta en la cual las expresiones (4.5) y (4.6) son obtenidas así como un estudio de su comportamiento en diversas geometrías puede ser visto en [32].

Una vez definido el operador diferencial Δ es indispensable identificar las condiciones que las funciones $x(\eta, \epsilon)$ y $y(\eta, \epsilon)$ deben satisfacer en la frontera $\partial \mathcal{Q}$. Ésto es lo que dara forma a las líneas que compondran la malla final con lo cual, los valores de éstas funciones en la frontera $\partial \bar{\mathcal{Q}}$ seran consideradas como las condiciones de frontera del problema de contorno. És decir, nuestro

¹Donde $f_g = \frac{\partial f}{\partial g}$.

problema está compuesto de: un sistema de ecuaciones diferenciales cuasi-lineales² dado por las ecuaciones (4.3),(4.4),(4.5),(4.6) y unas condiciones de frontera establecidas por $\Gamma = \partial\bar{\Omega}$.

4.4. Discretización del Sistema Ecuaciones Elípticas

Dado que nuestro problema involucra un sistema cuasi-lineal, es indispensable implementar un método numérico que nos permita hacer frente a éste desafío. Nuestro operador Ξ será evaluado en un conjunto de puntos $\vec{\xi} = \{(\eta, \epsilon) \in \mathcal{Q}\}$ que poseen una correspondencia única en el espacio $\bar{\Omega}$, con esto en mente la distribución de puntos debe ser elegida de tal forma que nos facilite el cálculo de nuestra solución, y que mejor que una distribución uniforme de n puntos.

La distribución uniforme de puntos da paso a la discretización del problema, quien sera seguida por la formulación de las ecuaciones de diferencias (**Differences Equations**) y posteriormente por el método de sobrerelajación o tambien conocido como **SOR** [39].

Dado a que elegimos una distribución de puntos uniformes en \mathcal{Q} tal como se muestra en la gráfica 4.1, a cada uno se le asigna un par (i, j) con $i = 0, \dots, N$ y $j = 0, \dots, M$, siendo M y N enteros positivos. Al tomar uno de estos valores i o j constantes, el subconjunto que se genera forma un segmento de línea recta en el espacio \mathcal{Q} y cuya correspondencia en el espacio $\bar{\Omega}$ es un segmento de línea que se encuentra totalmente incluida en dicho espacio.

Basado en la figura 4.1, la posición de cada punto puede ser escrita como, (η_i, ϵ_j) , siendo

$$\eta_i = \frac{i}{N} \quad , \quad \epsilon_j = \frac{j}{M} \quad . \quad (4.7)$$

Una vez el sistema ha sido discretizado, el siguiente paso es expresar el sistema de ecuaciones en función de los valores de las funciones $x(\eta, \epsilon)$ y $y(\eta, \epsilon)$ en los puntos $\vec{\xi}$. Considerando la

²Una ecuación diferencial parcial **cuasi-lineal**, es aquella que puede ser representada como :

$$a(x, y, u, u_x, u_y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x, y, u, u_x, u_y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c(x, y, u, u_x, u_y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = d(x, y, u, u_x, u_y)$$

[47].

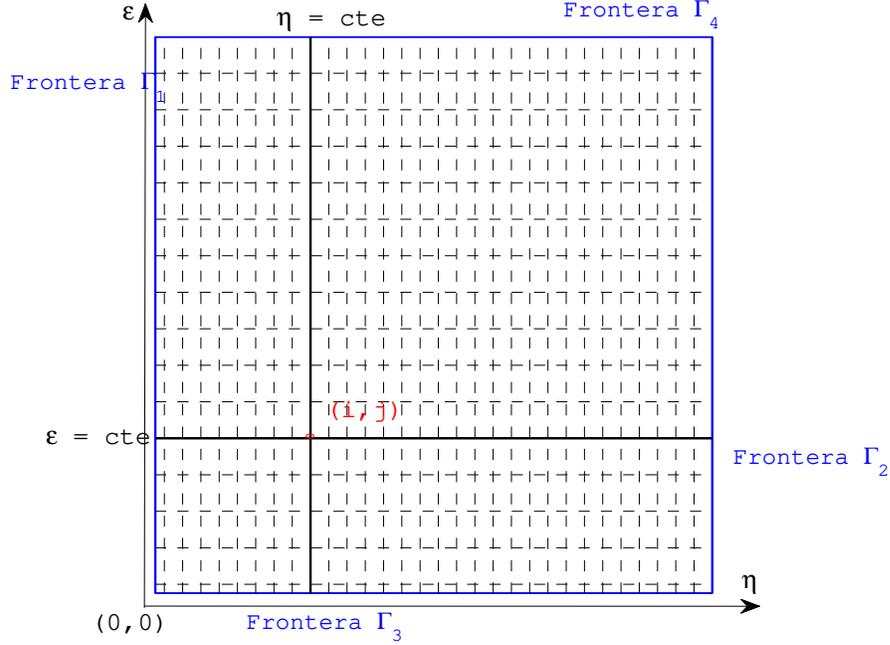


Figura 4.1: El espacio computacional \mathcal{Q} está compuesto por una región rectangular unitaria cuya discretización se realiza en un conjunto de n puntos a los cuales se les asigna el par (i,j) .

expansión en serie de Taylor de la función x (la formulación de y puede ser obtenida en una forma equivalente), la expresión de su primera derivada parcial puede ser aproximada en el punto (i,j) ,

$$x_{\eta}(\eta_i, \epsilon_j) = \left. \frac{\partial x}{\partial \eta} \right|_{i,j} \approx \frac{x(\eta_{i+1}, \epsilon_j) - x(\eta_i, \epsilon_j)}{\eta_{i+1} - \eta_i} = \frac{x_{i+1,j} - x_{i,j}}{h_{\eta}} \quad (4.8)$$

y su segunda derivada parcial usando diferencias centradas

$$x_{\eta\eta}(\eta_i, \epsilon_j) = \left. \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} \right|_{i,j} \approx \frac{x(\eta_{i+1}, \epsilon_j) - 2x(\eta_i, \epsilon_j) + x(\eta_{i-1}, \epsilon_j)}{(\eta_{i+1} - \eta_i)^2} = \frac{x_{i+1,j} - 2x_{i,j} + x_{i-1,j}}{h_{\eta}^2} \quad (4.9)$$

cuando tenemos una malla uniforme cuya longitud característica en la coordenada η es h_{η} , constante.

Basados en éstas expresiones de las derivadas parciales, es posible determinar una aproximación para las ecuaciones (4.5), (4.6) y en especial la ecuación (4.4) quien define el operador Δ . Así, la

expresión para el valor de la función $x(\cdot, \cdot)$ en el punto (i, j) por medio de las ecuaciones (4.8) y (4.9),

$$x_{i,j} = \left[\frac{a_{i,j}}{h_\eta^2} A_{i,j}(x) - \frac{b_{i,j}}{2h_\eta h_\epsilon} B_{i,j}(x) + \frac{c_{i,j}}{h_\epsilon^2} C_{i,j}(x) \right] / 2 \left[\frac{a_{i,j}}{h_\eta^2} + \frac{b_{i,j}}{h_\epsilon^2} \right] \quad (4.10)$$

$$a_{i,j} := a(\eta_i, \epsilon_j) = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \right] \Big|_{i,j}, \quad c_{i,j} := c(\eta_i, \epsilon_j) = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \epsilon} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \epsilon} \right)^2 \right] \Big|_{i,j}, \quad (4.11)$$

$$b_{i,j} := b(\eta_i, \epsilon_j) = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \epsilon} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \epsilon} \right) \Big|_{i,j}, \quad (4.12)$$

y las variables

$$A_{i,j}(x) := (x_{i+1,j} + x_{i-1,j}), \quad B_{i,j}(x) := (x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j-1} + x_{i-1,j-1} - x_{i-1,j+1}), \quad C_{i,j}(x) := (x_{i,j+1} + x_{i,j-1}). \quad (4.13)$$

Siguiendo éste mismo procedimiento y usando la notación de [32], podemos dar lugar a la ordenada $y_{i,j}$ de un punto (i, j) que compone la malla, usando la siguiente ecuación:

$$y_{i,j} = \left[\frac{a_{i,j}}{h_\eta^2} A_{i,j}(y) - \frac{b_{i,j}}{2h_\eta h_\epsilon} B_{i,j}(y) + \frac{c_{i,j}}{h_\epsilon^2} C_{i,j}(y) \right] / 2 \left[\frac{a_{i,j}}{h_\eta^2} + \frac{b_{i,j}}{h_\epsilon^2} \right]. \quad (4.14)$$

La expresión de un nuevo punto $x_{i,j}$ presente en la ecuación (4.10), así como de su ordenada $y_{i,j}$ (ecuación (4.14)), hace indispensable tener con antecedencia los valores de $x_{i,j}$ e $y_{i,j}$, especialmente al momento de ser evaluados los coeficientes $a_{i,j}$, $b_{i,j}$ y $c_{i,j}$. Por ésta razón, un conjunto de puntos (x, y) que se encuentren distribuidos uniformemente en el dominio $\bar{\Omega}$ y que cumplan “parcialmente” las condiciones 4.2, dan lugar a la construcción de mallas algebraicas, de tal forma que se tenga un valor inicial de donde partir hacia la solución final, la cual será una malla elíptica.

4.5. Mallas Algebraicas

El uso de mallas algebraicas no solamente se hace presente en el estudio de mallas elípticas, de hecho, en muchas ocasiones es posible construir mallas algebraicas de tal calidad, que se hace innecesario dar paso a las mallas generadas a partir de sistemas de ecuaciones diferenciales. Existen diversas metodologías que son usadas hoy en día para darles forma, pero especialmente la *Interpolación Transfinita* ha tenido una gran acogida en el ámbito académico, gracias a su adaptabilidad a diversas geometrías y en gran parte por su bajo costo computacional [31]. Sin embargo en la siguiente sección no profundizaremos mas en éste tipo de interpolación, pero un estudio mas adecuado y detallado de ésta metodología clásica de construcción de mallas algebraicas es posible encontrarla en [40].

Como su mismo nombre lo indica, las mallas algebraicas hacen uso de funciones algebraicas simples que permiten obtener una distribución adecuada de puntos dentro del dominio $\bar{\Omega}$. Un ejemplo de como puede ser construida una malla algebraica compuesta de un número M de columnas y N filas es presentada a continuación:

Consideremos un dominio simplemente conexo dado por,

$$\bar{\Omega} = \left\{ (x,y) \mid \partial\bar{\Omega} = \Gamma \right\} \quad (4.15)$$

siendo

$$\Gamma = \begin{cases} \Gamma_1 = \{y \in [0,H] \ , \ x = \sin(\pi \frac{y}{L})\} \ , \\ \Gamma_2 = \{y \in [0,H] \ , \ x = L + \cos(\pi \frac{y}{L})\} \ , \\ \Gamma_3 = \{x \in [0,L] \ , \ y = \frac{H}{2} \exp[-(x - \frac{L}{2})^2]\} \ , \\ \Gamma_4 = \{x \in [0,L] \ , \ y = H + \sin(2\pi \frac{x}{L})\} \ . \end{cases} \quad (4.16)$$

donde $L, H \in \mathbb{R}^+$. $\bar{\Omega}$ se encuentra expuesto en la figura 4.2.

La figura 4.3 muestra una malla algebraica uniforme generada por medio del algoritmo 4.1, el cual

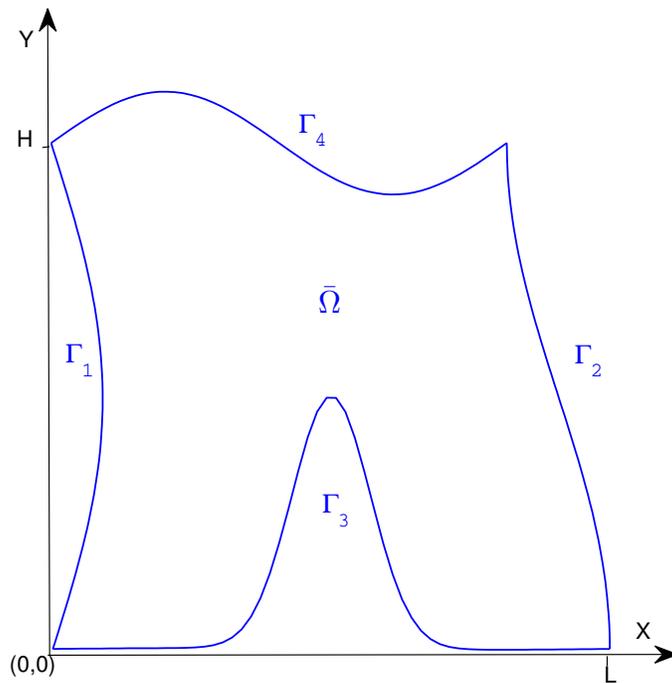


Figura 4.2: Dominio $\bar{\Omega}$ dado por la ecuación (4.15) en el cual se construya una malla algebraica uniforme.

esta compuesto por tres mil seiscientos (3600) elementos geométricos, con $H = 10,0$ y $L = 10,0$. A pesar de ser una metodología que no implica un costo computacional elevado, ésta ventaja se ve opacada por algunos problemas de suavidad que se presentan en la malla final. Las figuras 4.4 y 4.5, dan muestra de los errores mas comunes que se presentan en la construcción de mallas algebraicas, especialmente la falta de suavidad (cambios abruptos entre puntos consecutivos) y falta de regularidad entre células adyacentes (**squeezing**).

La geometría dada por la frontera (4.16), fue diseñada de tal forma que las problemas de las mallas algebraicas construidas a partir del algoritmo 4.1 se hicieran presentes, sin embargo éste tipo de inconvenientes son solventados al momento de restringir el *ángulo* presente entre dos líneas que no pertenezcan a una misma familia. Asi mismo, es posible forzar en las cercanías a la frontera $\partial\bar{\Omega}$ la ortogonalidad entre líneas. Éstas restricciones, son las ideas principales que

Algoritmo 4.1: Algoritmo de construcción de una malla algebraica uniforme de un dominio $\bar{\Omega}$ (ecuaciones (4.15) y (4.16)).

Input: Frontera $\partial\bar{\Omega} = \{\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4\}$, Altura H , Longitud L , Número de Filas M , Número de Columnas N .

```

1 for  $i \leftarrow 0$  to  $N$  do
2    $y_i = i/N$ 
3    $H_i = \Gamma_2(y_i) - \Gamma_1(y_i)$ 
4   for  $j \leftarrow 0$  to  $M$  do
5      $x_j = j/M$ 
6      $L_j = \Gamma_4(x_j) - \Gamma_3(x_j)$ 
7      $\mathcal{X}(i,j) = \Gamma_1(y_i) + x_j \times H_i$ 
8      $\mathcal{Y}(i,j) = \Gamma_3(x_j) + y_i \times L_j$ 
9 return  $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ .
```

componen la *Interpolación Transfinita* la cual involucra el uso de tensores invariantes cuyo objetivo es disminuir el fenómeno conocido como **squeezing**, [40][59].

Una vez se tiene una malla inicial de la cual se obtienen los valores de los coeficientes $a_{i,j}$, $b_{i,j}$ y $c_{i,j}$, dados en las ecuaciones (4.11) y (4.12), es posible determinar un nuevo punto $(x_{i,j}, y_{i,j})$ usando las ecuaciones (4.10) y (4.14). Ésta distribución inicial, permite una convergencia mas consistente, que una distribución aleatoria de los puntos que componen la malla, por ésto, una adecuada elección de una malla inicial permitira concluir en una malla elíptica conforme a los requisitos requeridos por éste tipo de distribuciones.

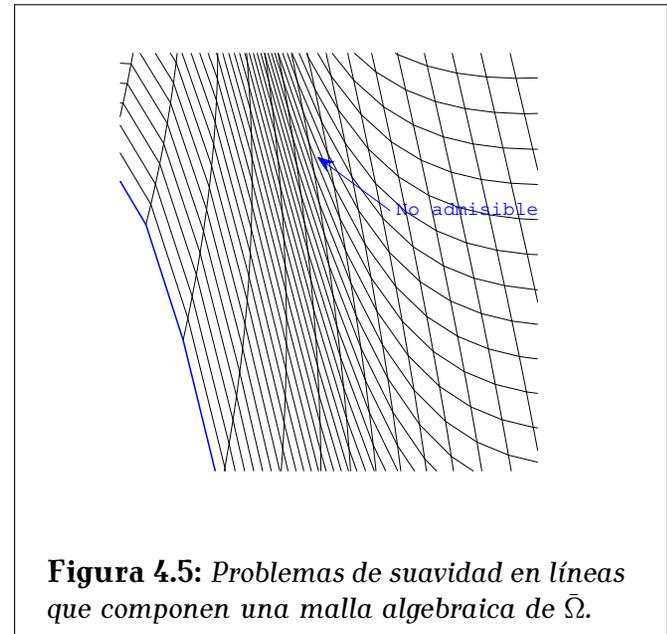
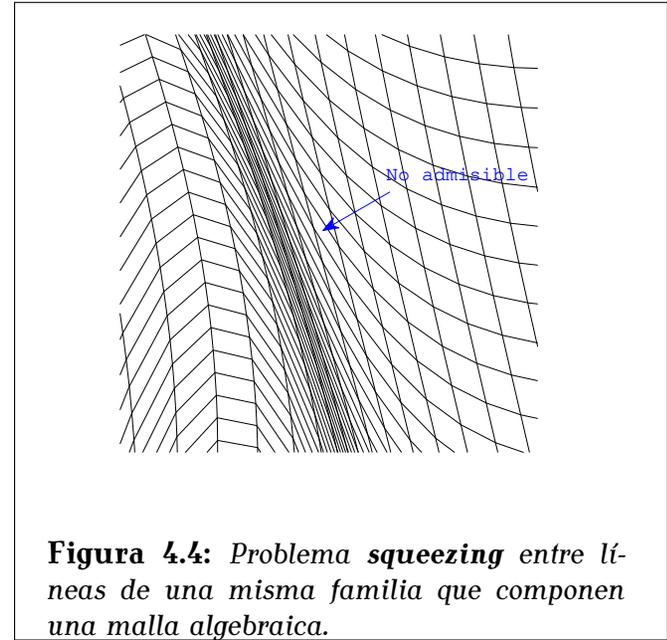
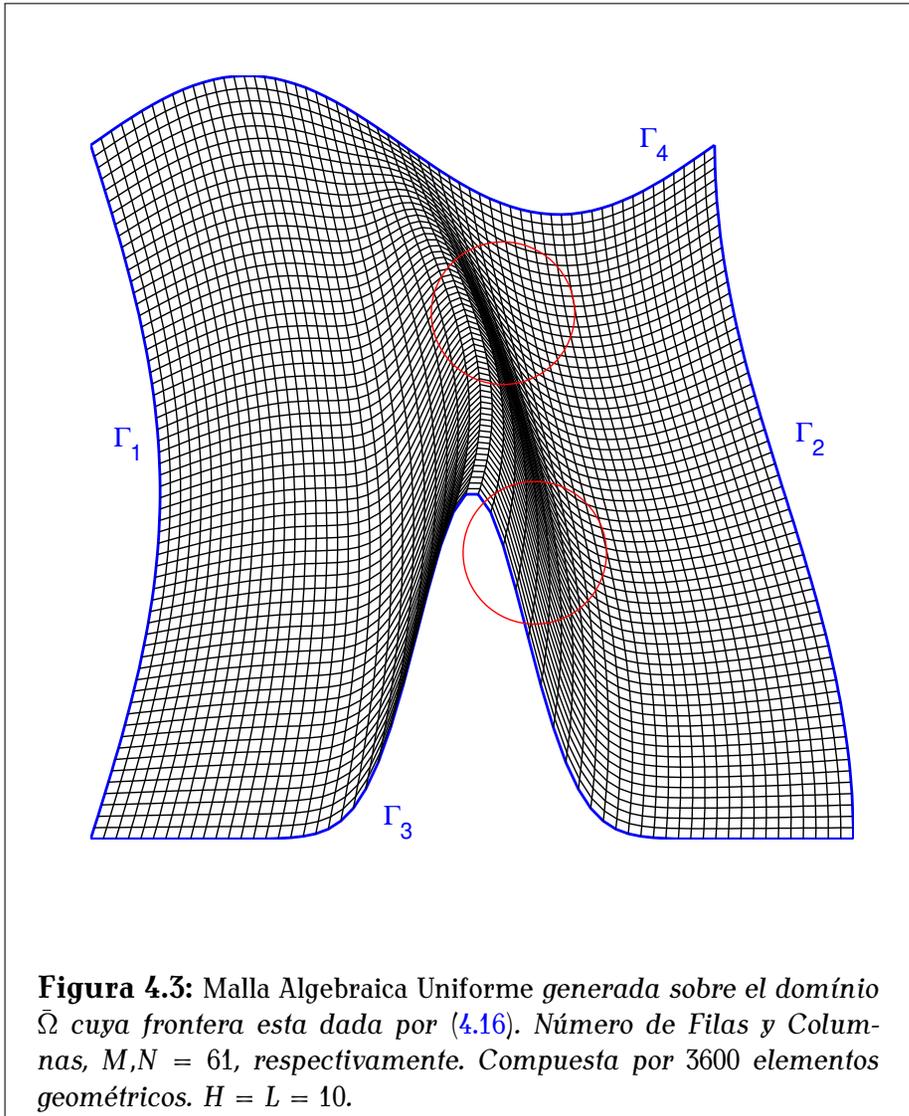
La elección de una malla inicial es fundamental en la construcción de la malla elíptica, pero del mismo modo lo es la forma en que es calculado el nuevo punto $(x_{i,j}, y_{i,j})$ partiendo de las ecuaciones (4.10) y (4.14), es decir la elección del método de solución. En principio éstas dos ecuaciones podrian dar paso a dos sistema lineales de la forma $Ax = b$, donde A es un matriz altamente esparsa, cuyas entradas estan dispuestas en siete diagonales principales y cuyo vector b es nulo³. Infelizmente, la solución de cada sistema lineal es dependiente de la solución del otro,

³El vector b es nulo considerando el hecho que estamos dando solución a un problema de contorno que involucra una ecuación de Laplace. Si el problema estuviera descrito usando una ecuación elíptica no homogenea, como Poisson, el vector b seria diferente del vector cero.

con lo cual, para obtener una solución adecuada del conjunto

$$\Omega = \{(x_{i,j}, y_{i,j}) | i = 0, \dots, M, \quad j = 0, \dots, N\} \quad (4.17)$$

es necesario elegir un método iterativo que nos permita calcular (de forma casi simultánea para x y y) uno por uno de éstos puntos en forma secuencial y siguiendo una dirección específica. Éste es el objetivo del método de Gauss-Seidel de punto sucesivo. Junto con ésta estrategia es posible adicionar un parámetro de control α , característico de métodos con sobrerelajamiento, como lo es **SOR**, cuyo objetivo es permitir una mejor estabilidad en el cálculo y control en el tamaño de los pasos que se recorren al converger en la malla elíptica final.



4.6. Método de Solución, Gauss-Seidel y SOR

La solución del problema de contorno dado por las ecuaciones elípticas (4.3) definidas en Ω y cuyas condiciones de frontera están dadas por $\partial\bar{\Omega}$, en su forma discreta se encuentra planteada por las ecuaciones (4.10) y (4.14). Observando cuidadosamente las ecuaciones discretas, es posible identificar la dependencia del punto $x_{i,j}$ usando un **stencil** de nueve puntos, los cuales corresponden a sus vecinos más cercanos para obtener su nuevo valor [39], sin considerar por supuesto la dependencia de un conjunto previo de puntos de la forma (4.17) que permita el cálculo de los coeficientes (4.11) y (4.12).

En principio como estamos por calcular un **nuevo** valor de $x_{i,j}$ gracias a que disponemos de una versión inicial aportada por la malla algebraica, podemos reformular la ecuación (4.10)

$$x_{i,j}^1 = \left[\frac{a_{i,j}^0}{h_\eta^2} A_{i,j}^0(x) - \frac{b_{i,j}^0}{2h_\eta h_\epsilon} B_{i,j}^0(x) + \frac{c_{i,j}^0}{h_\epsilon^2} C_{i,j}^0(x) \right] / 2 \left[\frac{a_{i,j}^0}{h_\eta^2} + \frac{b_{i,j}^0}{h_\epsilon^2} \right] \quad (4.18)$$

donde el superíndice 0 denota el cálculo efectuado sobre los puntos obtenidos de la malla algebraica. Del mismo modo la ecuación discreta definida para la ordenada $y_{i,j}$ puede ser reformulada tomando como ejemplo la ecuación (4.18). Ésta formulación discreta, puede ser extrapolada en iteraciones posteriores de tal forma que los nuevos puntos $k + 1$ sean obtenidos de sus predecesores k . La metodología de usar los puntos ya calculados como base para obtener los nuevos es conocida como **Método de Jacobi** y ha sido estudiada ampliamente en la solución de problemas elípticos, sin embargo puede llegar a presentar soluciones *fisicamente* no posibles especialmente en problemas hiperbólicos [32].

Una versión mejorada del método de Jacobi el cual hace uso de aquellos puntos $x_{i,j}$ ya calculados en una iteración $k + 1$, es la base del método de Gauss-Seidel. Al expandir los términos dados por $A_{i,j}(x)$, $B_{i,j}(x)$ y $C_{i,j}(x)$, aplicando un poco de álgebra obtenemos la siguiente representación de $x_{i,j}$ en la $(k + 1)$ -ésima iteración:

$$\mathbf{x}_{i,j}^{k+1} = \tilde{\mathbf{a}}_{i,j}(\mathbf{x}_{i+1,j}^k + \mathbf{x}_{i-1,j}^{k+1}) - \tilde{\mathbf{b}}_{i,j}(\mathbf{x}_{i+1,j+1}^k - \mathbf{x}_{i+1,j-1}^{k+1} + \mathbf{x}_{i-1,j-1}^{k+1} - \mathbf{x}_{i-1,j+1}^k) + \tilde{\mathbf{c}}_{i,j}(\mathbf{x}_{i,j+1}^k + \mathbf{x}_{i,j-1}^{k+1}) \quad (4.19)$$

donde

$$\tilde{\mathbf{a}}_{i,j} = d_{i,j} \frac{a_{i,j}}{h_\eta^2}, \quad \tilde{\mathbf{b}}_{i,j} = d_{i,j} \frac{b_{i,j}}{2h_\eta h_\epsilon}, \quad (4.20)$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_{i,j} = d_{i,j} \frac{c_{i,j}}{h_\eta^2}, \quad d_{i,j} = \frac{1}{2 \left[\frac{a_{i,j}}{h_\eta^2} + \frac{b_{i,j}}{h_\epsilon^2} \right]}, \quad (4.21)$$

la cual en forma matricial presenta la forma

$$\mathcal{M}\mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{N}\mathbf{x}^k. \quad (4.22)$$

Así $\mathcal{M}, \mathcal{N} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ son matrices esparsas donde n corresponde al número de nodos que componen la malla, y cuyas entradas son dictadas por las ecuaciones (4.20) y (4.21). El vector $\mathbf{x}^k \in \mathbb{R}^n$ almacena los valores $x_{i,j}$ obtenidos en la k -ésima iteración. Es importante recordar que nos encontramos trabajando un **problema de contorno**, por lo tanto aquellos $x_{i,j}$ que se encuentran sobre la frontera, deben adoptar los valores especificados por ésta sin importar en que iteración se encuentren en el proceso de solución, lo cual permitirá que el sistema (4.22) posea una única solución.

El requerimiento formal para que el método de Gauss-Seidel converja está dado por la matriz \mathcal{M} .

Si ésta matriz es diagonalmente dominante, es decir siendo $\mathcal{M} = \{m_{i,j}\}_{i,j=1}^n$,

$$|m_{ii}| \geq \sum_{j \neq i}^n |m_{ij}|, \quad \text{para } i = 1, \dots, n \quad (4.23)$$

entonces el método se dice **Incondicionalmente Estable** [32], [39].

Aunque el método de Gauss-Seidel es incondicionalmente estable, no necesariamente implica que

su convergencia sea rápida. Ésto puede ser solventado al sugerir dos etapas en el cálculo de un nuevo $x_{i,j}$: en la primera fase se define un punto x^{GS} quien es obtenido por la ecuación (4.19), seguido a éste se define un nuevo valor de $x_{i,j}^{k+1}$ por la ecuación

$$x_{i,j}^{k+1} = x_{i,j}^k + \omega(x^{GS} - x_{i,j}^k) \quad (4.24)$$

siendo ω un parámetro escalar. Cuando $\omega = 1$ el método es exactamente igual al método de Gauss-Seidel, en el caso en que $\omega > 1$, éste converge con mayor velocidad que el propio método original y es llamado como **Sobre Relajación Sucesiva** o **SOR** por sus siglas en inglés [39]. Aunque en las anteriores ecuaciones se planteo únicamente los cálculos para obtener la abscisa x de la malla elíptica, para obtener la ordenada y se puede proceder de forma equivalente.

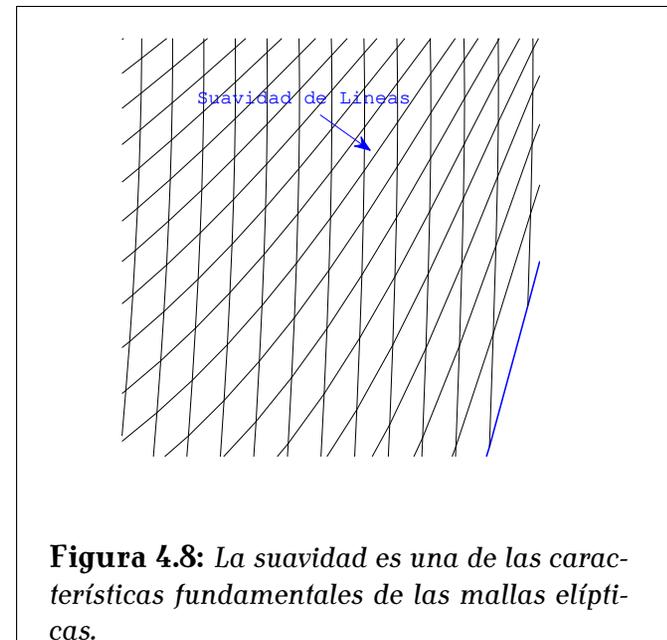
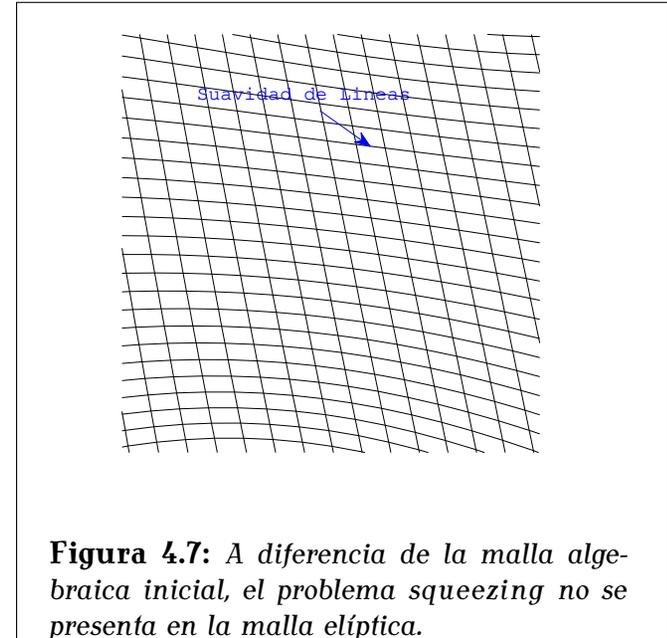
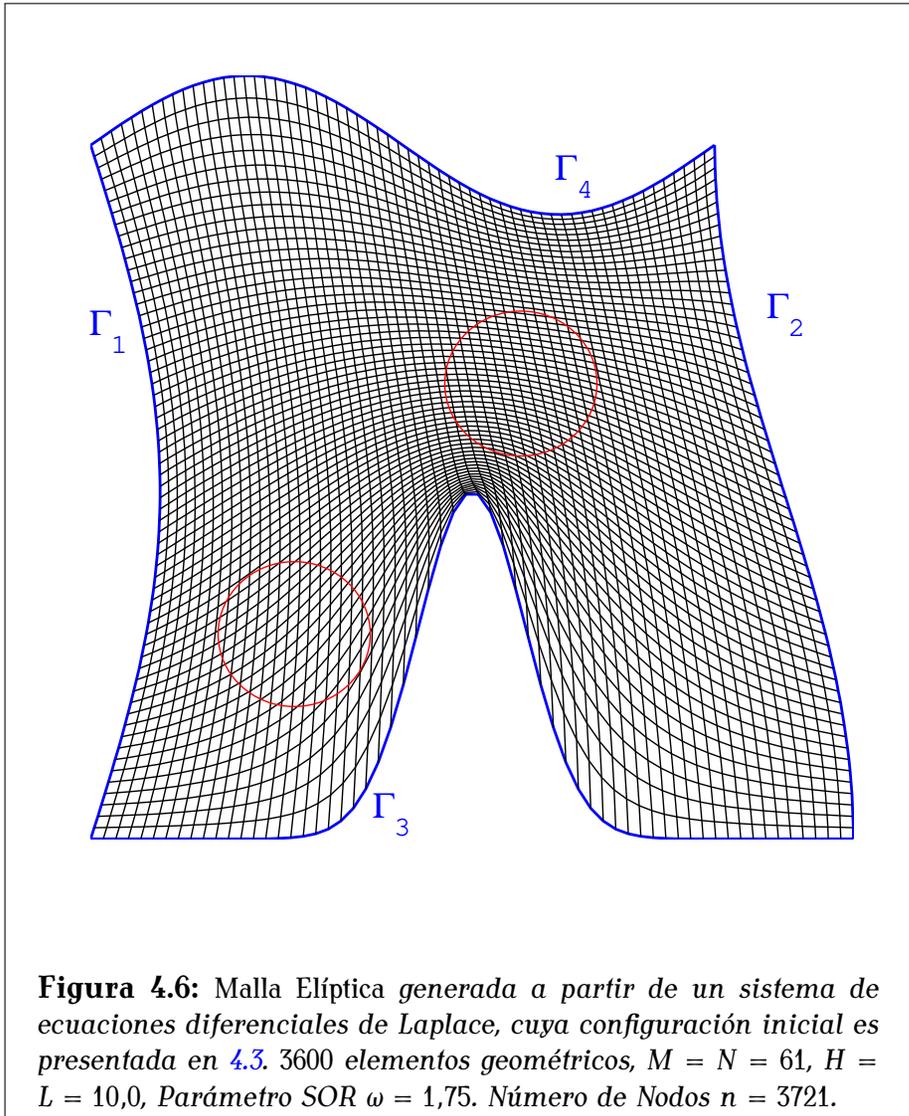
Una vez se ha establecido el entorno matemático, la configuración inicial y especialmente el método de solución empleado en la construcción de mallas elípticas, procederemos a calcular una malla para el dominio $\bar{\Omega}$ cuya frontera esta dada por (4.16) y cuyo resultado es presentado en la figura 4.6.

4.7. Criterio de Parada

Dado que el método de Gauss-Seidel es un método iterativo, es preciso establecer un criterio de parada que nos de la posibilidad de afirmar que hemos encontrado una solución al sistema (4.22). Aunque existen diversos criterios, como la *Tolerancia Absoluta*, *Tolerancia Relativa* o al considerar la norma del residuo $r^k = \mathbf{b} - \mathcal{A}\mathbf{x}^k$ [39], hemos tomando como criterio de convergencia

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|_2 \leq \epsilon_{GS} \quad (4.25)$$

donde $\epsilon_{GS} \in \mathbb{R}^+$.



4.8. Funciones de Control y Adaptabilidad

En las secciones precedentes se formuló el procedimiento usado en la construcción de mallas elípticas y sus principales características. Se hizo uso de un sistema de ecuaciones diferenciales, compuesto por dos ecuaciones de **Laplace** como operador diferencial en un problema de contorno, cuyas condiciones de frontera eran dictadas por $\partial\bar{\Omega}$.

La solución del problema de frontera provee un conjunto de puntos distribuidos en el interior del dominio físico $\bar{\Omega}$ de tal forma que cumplen las condiciones (4.2). Ésta formulación concluyo en una distribución uniforme de los nodos en el dominio físico, sin la posibilidad de direccionar o concentrarlos en un cierta región que fuese de nuestro interes.

Dado al hecho que muchos fenómenos físicos presentan comportamientos a diversas escalas, es indispensable aislar la zona donde los hechos mas relevantes estan aconteciendo y a primera vista las mallas obtenidas a partir de un sistema elíptico homogéneo, no nos permite éste tipo de control sobre nuestro análisis. La forma de proveer un control sobre las líneas que componen la malla, puede hacerse al modificiar las ecuaciones de Laplace por un conjunto de ecuaciones de Poisson, cuyos terminos no homogéneos nos daran el poder de adaptarla a las necesidades del problema que se esta estudiando [29].

La inclusión de terminos no homogéneos en el sistema (4.3) no es la única forma en la cual se puede mantener un control sobre la disposición de las líneas que componen la malla. Las longitudes de los arcos entre dos puntos que se encuentre sobre una misma línea tambien puede ser elegída o restringida al adicionar terminos con derivadas mixtas en las ecuaciones de Poisson [59]. Así mismo la ortogonalidad entre familias de líneas (en dos o tres dimensiones), puede ser forzada al definir un operador conforme $\bar{x} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathcal{R}$, donde \mathcal{R} es un rectángulo $[0,1] \times [0,M]$ y M es llamado **modulo conforme**, quien corresponde a la razón de las longitudes de arco entre dos lados adyacentes del mismo elemento geométrico [62].

Las diversas formas en que pueden ser planteados el sistema de ecuaciones y la gran cantidad de

parámetros que se pueden llegar a ver involucrados en su definición, sin considerar por supuesto la complejidad de la geometría de estudio, convierten a la generación de mallas adaptativas en un problema que está realmente cerca de ser un arte, más que una misma ciencia. La búsqueda de los parámetros que se adecuen en la forma adecuada a sus necesidades, elevan el costo en tiempo que el usuario debe tomar para obtener el mejor resultado posible. Por otra parte, al aumentar la complejidad de los sistemas de estudio, los dominios simplemente conexos dejan de ser relevantes, dando paso a dominios múltiplemente conexos que deben ser abordados y planteados de una forma diferente.

Éstas son quizás algunas de las razones principales, del por qué las mallas estructuradas adaptativas han sufrido un revés importante con sus contrapartes sin estructura en la forma de discretizar el dominio físico. Especialmente en problemas de Dinámica de Fluidos, abordados desde un punto de vista computacional (**Computational Fluid Dynamics-CFD**) las mallas sin estructura han sido relevantes dado a su adaptabilidad natural a geometrías complejas. Sin embargo, las mallas sin estructuras no cumplen una propiedad que en muchos casos es esencial: el alineamiento de las líneas de las mallas con el campo que se está estudiando, ya sea un campo electromagnético, campo de flujo, etc. [62].

Con lo cual, la forma en que el generador de malla da la posibilidad al usuario de modificar o adaptar la malla a su sistema físico, así como su *agilidad* para proveer una malla que cumpla las características de suavidad y regularidad que son buscadas, son los criterios fundamentales que dictaminan que tan óptimo es el generador, sin importar si provee una malla estructurada o no.

4.8.1. Adaptabilidad Mallas Algebraicas

Dada la relación existente entre las mallas algebraicas y las elípticas, en ocasiones la adaptabilidad exigida en una malla elíptica es fijada en una primera fase en su malla algebraica de partida y posteriormente la suavidad y regularidad de la malla final, es provista por el sistema de ecuaciones de Poisson.

Sin salir de la idea original de una malla algebraica, la adaptatibilidad o concentración de las líneas que la componen en una región del espacio, es obtenida a partir de una ecuación algebraica. Una de las funciones que toman importancia en este tipo de adaptatibilidad es ,

$$f_{\beta}(x; x_0) = 1 + \frac{\sinh \beta[x - g_{\beta}(x_0)]}{\sinh [\beta g_{\beta}(x_0)]} \quad (4.26)$$

con

$$g_{\beta}(x_0) = \frac{1}{2\beta} \log \left\{ \frac{1 + x_0[\exp(\beta) - 1]}{1 + x_0[\exp(-\beta) - 1]} \right\} \quad (4.27)$$

donde $\beta \in (0, \infty)$ y $x_0 \in [0, 1]$ quien representa la línea alrededor de la cual se hara la acumulación de líneas [32]. De ésta forma el algoritmo 4.1 sufre una modificación pequeña que lo convierte en adaptativo.

Algoritmo 4.2: Algoritmo de construcción de una malla algebraica adaptativa en un dominio $\bar{\Omega}$ (ecuaciones (4.15) y (4.16)).

Input: Frontera $\partial\bar{\Omega} = \{\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4\}$, Altura H , Longitud L , Número de Filas M , Número de Columnas N . Parámetros de Adaptatibilidad α, β en x y y . Líneas de convergencia x_0, y_0 .

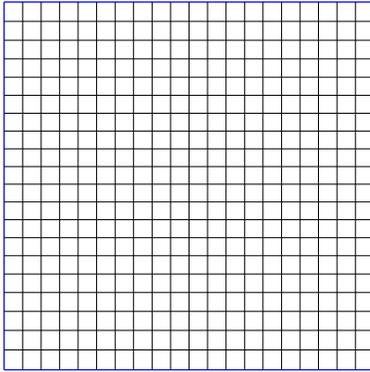
```

1 for i ← 0 to N do
2   yi = i/N
3   Hi = Γ2(yi) - Γ1(yi)
4   for j ← 0 to M do
5     xj = j/M
6     Lj = Γ4(xj) - Γ3(xj)
7     X(i, j) = Γ1(yi) + fβ(xj; x0) × Hi
8     Y(i, j) = Γ3(xj) + fα(yi; y0) × Lj
9 return X, Y.
```

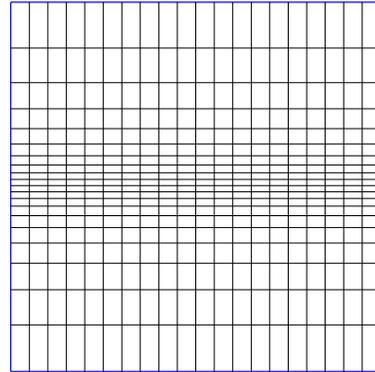
En la figura 4.9, mostramos algunos patrones de adaptatibilidad alrededor de diversas líneas específicas de la malla, con un parámetro $\beta = 6$. Existen diversas funciones que tiene un comportamiento similar a la que expone (4.26) que sirven de mucha ayuda dependiendo de la geometría que se este utilizando, en [32] se presentan diversas funciones algebraicas y sus comportamientos

en ocasiones específicas.

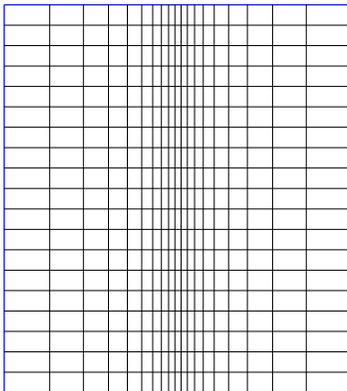
Por último en la figura [4.10](#) presentamos una malla algebraica adaptativa sobre el dominio $\bar{\Omega}$ cuya frontera fue descrita en las secciones precedentes.



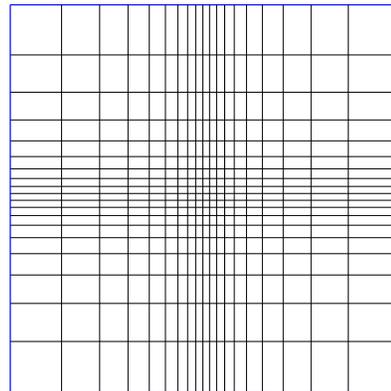
a. Malla Original $\beta = 1$



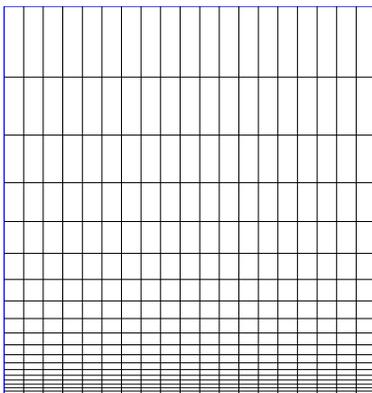
b. Adaptatividad en el eje ϵ sobre la línea 10, $\beta = 6$.



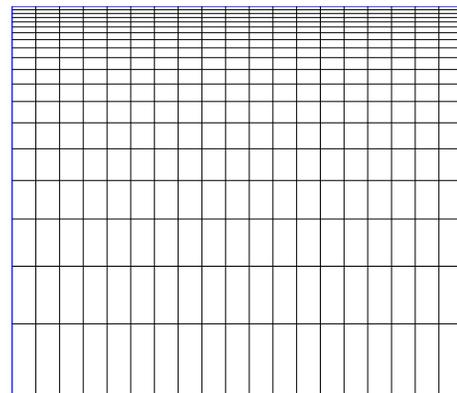
c. Adaptatividad en el eje η sobre la línea 10, $\beta = 6$.



d. Adaptatividad simultanea en los ejes η y ϵ , $\beta = 6$.

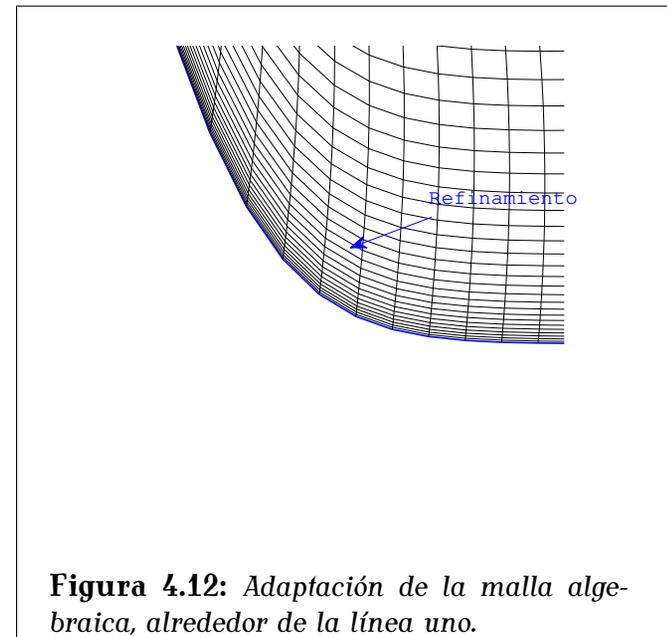
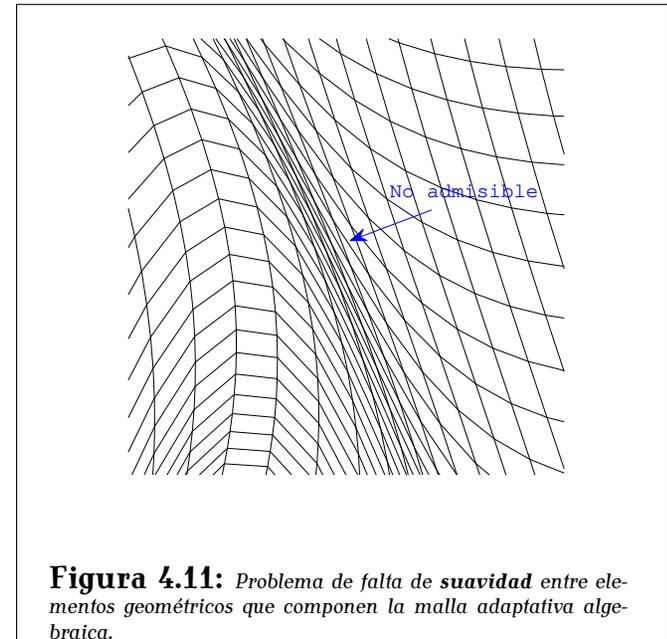
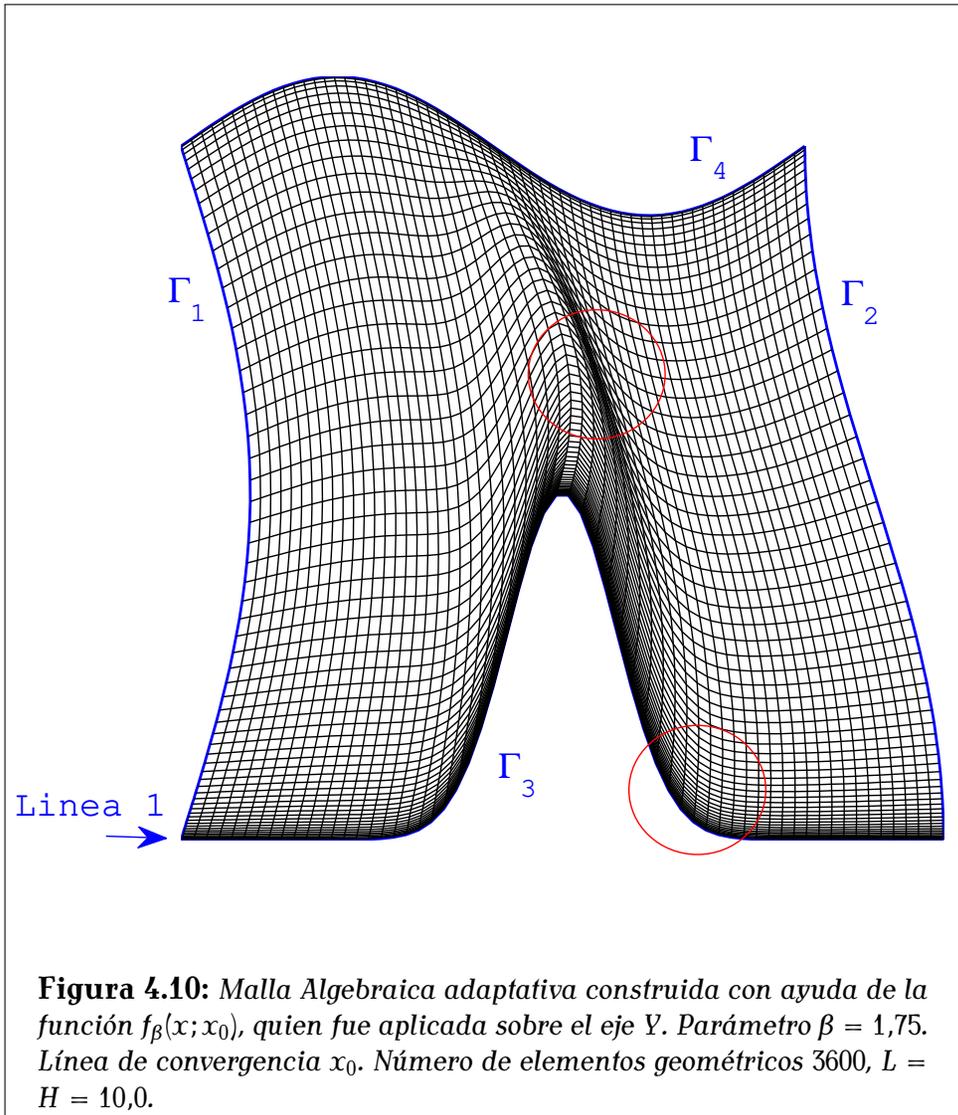


e. Adaptatividad en el eje ϵ sobre la línea 1, $\beta = 6$.



f. Adaptatividad en el eje ϵ sobre la línea 20, $\beta = 6$.

Figura 4.9: Patrones de adaptatividad generada en una malla algebraica compuesta por $M = N = 20$, producidos a partir de las ecuación (4.26) siguiendo el esquema 4.1, (Fuente [32]).



4.8.2. Mallas Elípticas Adaptativas

Una vez las mallas algebraicas nos han dado muestra de como es posible agrupar en ciertas regiones del espacio físico $\bar{\Omega}$ un conjunto de líneas, el siguiente paso es hacer lo mismo pero modificando el sistema de ecuaciones elípticas. La adición de un termino en el cual se encuentren presentes las variables (η, ϵ) en las ecuaciones (4.4), en principio daría lugar a una malla no uniforme. La elección de éstos terminos no presenta un criterio específico que seguir, y en muchas ocasiones, se hace indispensable por parte del usuario hacer uso de su experiencia e intuición [59].

Una de las expresiones que han sido de gran utilidad al momento de **clustering** un conjunto de líneas, son expuestas a continuación. El sistema (4.3) es modificado a:

$$\Delta x = -\frac{1}{g_{\bar{\Omega}}^2}(\mathbf{P}x_{\epsilon} + \mathbf{Q}x_{\eta}) \quad , \quad \Delta y = -\frac{1}{g_{\bar{\Omega}}^2}(\mathbf{P}y_{\epsilon} + \mathbf{Q}y_{\eta}) \quad (4.28)$$

donde Δ esta dado por la ecuación (4.4) y

$$\mathbf{P}(\eta, \epsilon) = -\sum_{k=1}^K a_k \frac{\eta - \eta_k}{|\eta - \eta_k|} \exp(-c_k |\eta - \eta_k|) \quad (4.29)$$

y

$$\mathbf{Q}(\eta, \epsilon) = -\sum_{l=1}^L b_l \frac{\epsilon - \epsilon_l}{|\epsilon - \epsilon_l|} \exp(-d_l |\epsilon - \epsilon_l|) \quad . \quad (4.30)$$

En las ecuaciones (4.29) y (4.30) se ha usado la notación expuesta por [60]. Los conjuntos $\{\eta_m\}_{m=1}^K$ y $\{\epsilon_l\}_{l=1}^L$ representa el conjunto de líneas que sirven de referencia para activar la convergencia en una región cercana, los parámetros a_m y b_n son los factores de amplificación de cada línea, c_m y d_n son los factores de decaimiento, quienes fuerzan a las líneas a converger dependiendo de sus factores de amplificación.

La solución a éste nuevo sistema elíptico sigue los mismos pasos que se recorrieron para el sistema homogéneo, y como única modificación es la inclusión de un vector \mathbf{b} en el sistema lineal (4.22), de tal forma que

$$\mathcal{M}\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{b}^k + \mathcal{N}\mathbf{x}^k \quad . \quad (4.31)$$

Para una mayor información del proceso de **clustering** así como control sobre las líneas que componen mallas generadas gracias a sistemas de ecuaciones diferenciales parciales es posible acceder a una gran literatura, en especial: [40; 60; 59; 35].

Como muestra del resultado que es obtenido al generar una malla elíptica adaptativa sobre un dominio simplemente conexo $\bar{\Omega}$, presentamos en la figura 4.13 un buen ejemplo de lo que puede ser conseguido con las bondades de éste método.

Comentario.

Cada uno de las mallas construidas en éste capítulo, han sido obtenidas por medio de algoritmos implementados en el lenguaje C++. Dado a la forma iterativa en que los sistemas algebraicos han sido solucionados por medio del Método de Gauss-Seidel, no es necesario almacenar las matrices \mathcal{M} y \mathcal{N} , así como el vector \mathbf{b} , con lo cual es ideal el uso de un programa compilado.

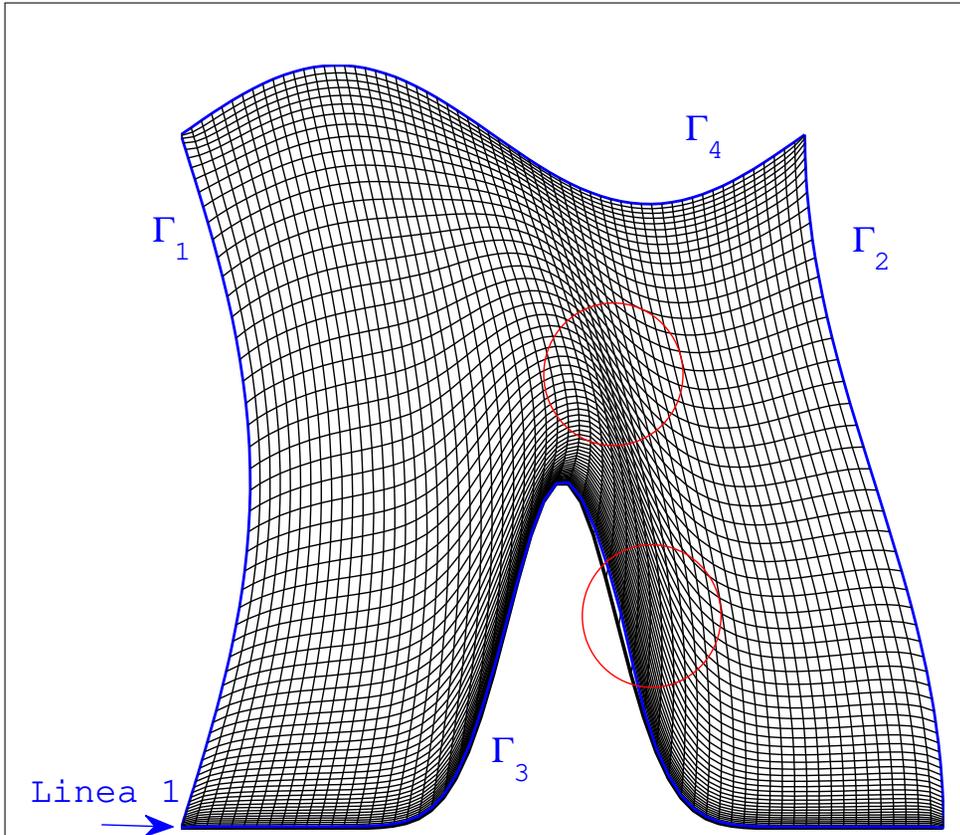


Figura 4.13: Malla elíptica adaptativa, la cual ha sido generada como solución del sistema (4.28) con las condiciones de frontera (4.16). Se ha tomado como familia **clustering** las diez primeras líneas en la dirección Y . En éste caso la maya algebraica inicial, fue la expuesta en la figura 4.10.

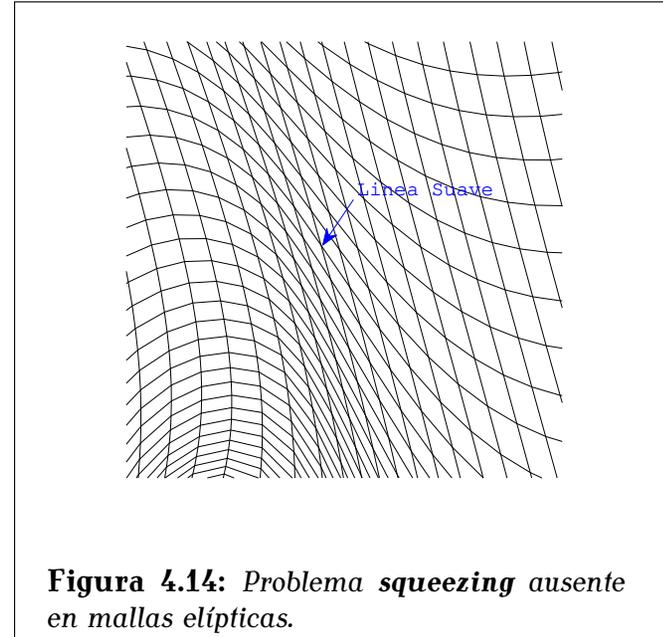


Figura 4.14: Problema **squeezing** ausente en mallas elípticas.

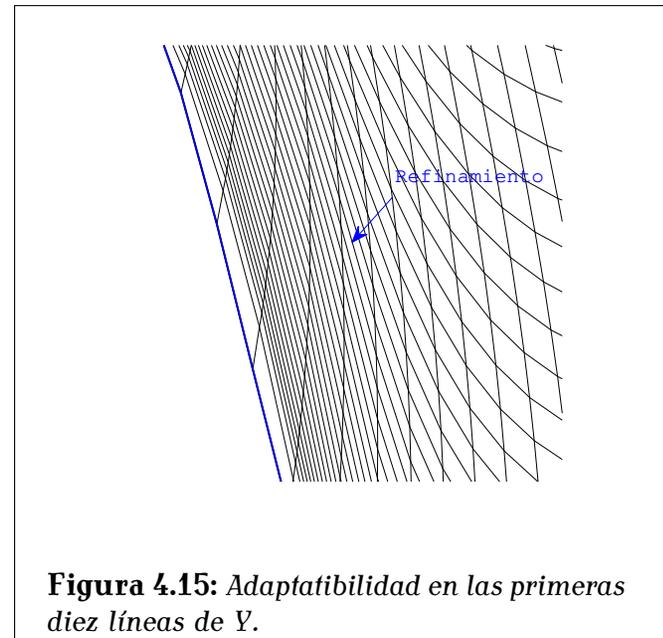


Figura 4.15: Adaptabilidad en las primeras diez líneas de Y .

Capítulo 5

Aspectos Computacionales

5.1. Introducción

Una vez el conjunto de funciones base \mathcal{V}^r son definidas en el elemento maestro κ_r y el entorno matemático del Método de Elementos Finitos de Orden Superior ha sido planteado para un orden polinomial P , el siguiente paso consiste en la implementación computacional de esta nueva versión. La versatilidad del método depende en gran medida en la forma en que la matriz que compone el sistema lineal final, es construida a partir de matrices locales cuyas componentes son calculadas usando el elemento maestro. La relación entre las funciones base locales ϕ y las funciones base globales $\tilde{\phi}$ es descrita por medio de un conjunto de operadores \mathcal{O}^{κ} definidos para cada elemento, quien contienen la enumeración global de cada grado de libertad local asociado. Para dar lugar a estos operadores, es necesario determinar el número de grados de libertad asociados a los vértices, a las aristas y el interior de los elementos geométricos, a partir de los grados polinomiales y considerar la preservación de continuidad de la solución aproximada en las aristas de aquellos elementos contiguos que poseen diferente grado polinomial P^{κ} : para ésto, se defini como primera medida la **Regla Mínima de Conformidad** [57]. Cuando la regla mínima ha sido definida, la enumeración global de los grados de libertad comienza por los vértices o

nodos que componen la malla de discretización, seguido de estos, continuan los grados asociados a cada uno de las aristas de los elementos, teniendo en cuenta la regla mínima de conformidad y por último los grados internos asociados a cada elemento geométrico.

5.2. Discretización del Dominio $\bar{\Omega}$

El primer paso que se debe seguir en la búsqueda de una solución aproximada de un problema de valor de contorno usando un método numérico específico, es definir un nuevo dominio Ω_h que sea una aproximación del dominio físico Ω , en el cual se encuentra definido originalmente el problema. En el Método de Elementos Finitos ésto se hace al definir un cierto número de elementos geométricos que en conjunto dan una cobertura al dominio original: ésta discretización puede ser hecha dependiente del tipo de geometría y problema que se este estudiando, mas sin embargo, el nuevo dominio que en general es llamado *Dominio Computacional* se encuentra compuesto por triángulos y cuadriláteros o cualquier otro elemento polimorfo en dos dimensiones^{1 2}.

En la figura 5.1 presentamos nuestro dominio Ω discretizado en un número de N de elementos geométricos, delimitados por segmentos de líneas rectas quienes se encuentran numeradas según se muestra en la figura. Ésta malla conforme, esta compuesta por elementos cuadrilateros a los cuales se les asigna 4 nodos e igual número de aristas, segun la convención de la figura 2.1 . La grilla Ω_h tiene una área característica h que en nuestro caso todos los elementos comparten.

¹En la construcción del dominio computacional es posible encontrar diferentes clases de elementos pertenecientes a una misma de discretización, a este tipo de mallas se les denomina *Híbridas*. Para un estudio mas profundo de grillas y discretización de espacios en dos y tres dimensiones [35].

²Los elementos geométricos polimórficos estan comenzando a ser implementados como parte del Método de Galerkin Discontinuo, el cual esta tomando fuerza en los últimos años como una nueva metodología en el estudio de Dinámica de Fluidos Computacional [26].

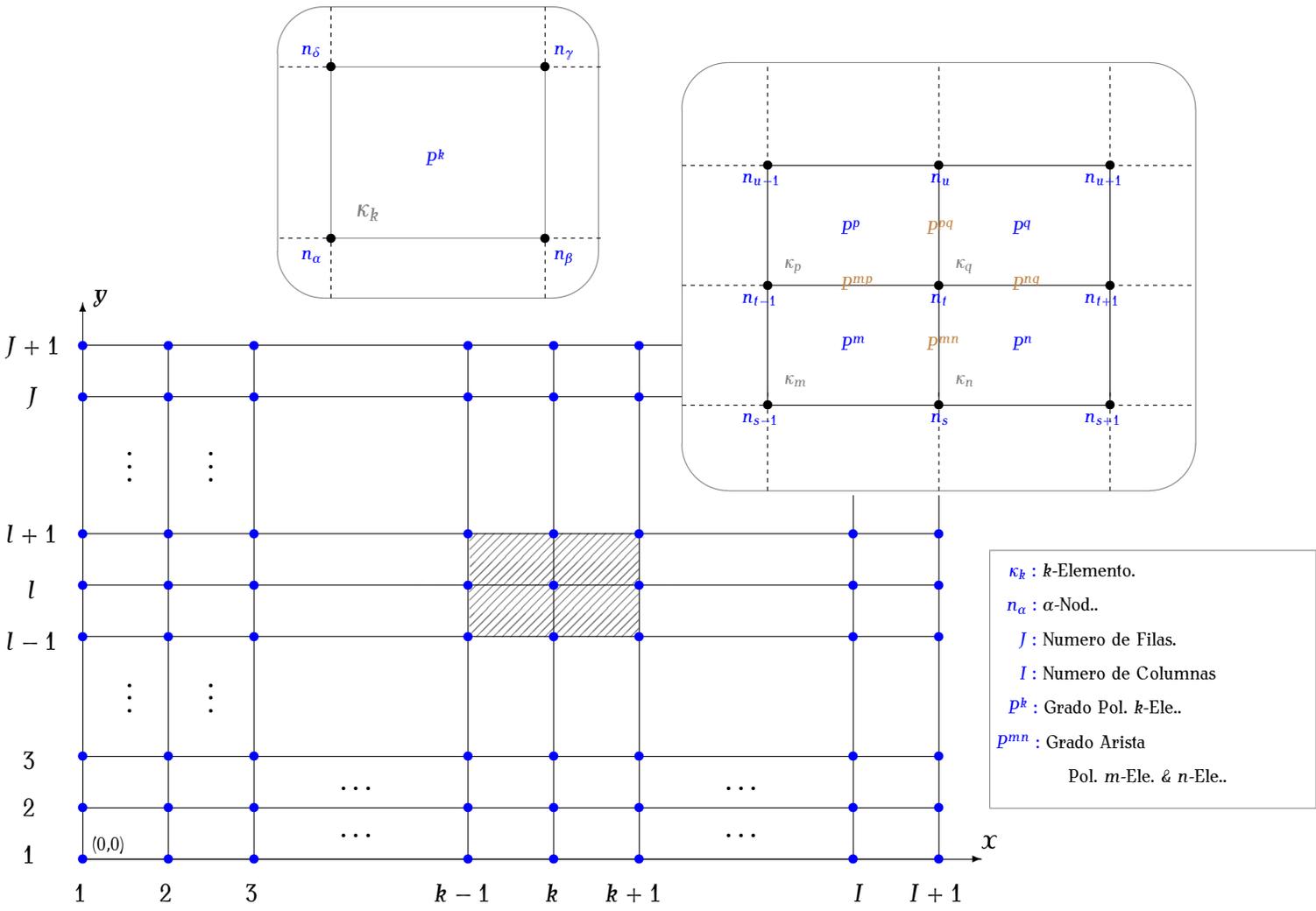


Figura 5.1: Discretización de un Dominio $\bar{\Omega}$.

Así mismo, cada uno de los elementos geométricos se le ha asignado un grado polinomial P^κ . Según las condiciones de conformidad que se presentaron en el Capítulo 3, la “independencia” en el grado polinomial de cada uno de los elementos debe ser consecuente con la continuidad de la solución en las aristas, por ésto la regla mínima hace su incursión al seleccionar el mínimo grado polinomial P_{mn} entre elementos, quien dara lugar a las funciones base definidas en dicha arista.

5.3. Enumeración Global Grados de Libertad

Una vez establecida la grilla de estudio, el siguiente paso es plantear la enumeración de los grados de libertad y su conectividad. La enumeración de cada uno de los grados, debe ser realizado en una convención que explicaremos a continuación, de tal forma que el sistema nos permita a posterioridad definir los operadores de conectividad para cada elemento que compone la malla. En éste caso vamos a seguir el diagrama 5.2, donde se presentara no solamente la enumeración de cada uno de los componentes de la malla, si no, como ésta es afectada al momento de modificar el grado polinomial que se asigna a los elementos.

Vamos a considerar una malla con $N = 4$ elementos dispuestos como se muestra en la figura 5.2, a quienes se les ha asignado un grado polinomial $P^\kappa = 3$ cuando $\kappa = 1,2,3,4$. Así, el conteo de los grados de libertad es efectuado como:

1. Consideramos en primera medida los nodos que componen la malla y las funciones base asociadas a éstos. Según las condiciones que se han impuesto, el sistema posee nueve nodos e igual número de funciones base lineales, etiquetadas con los números de color **negro**. Dado que las funciones lineales, siempre estan incluidas en las funciones base asociadas y nuestra malla no sera modificada en ningun aspécto, el número de funciones lineales permanece constante a lo largo del estudio.

2. El siguiente paso es enumerar los grados de libertad asociadas a cada arista que compone la malla. Cuando el grado polinomial es tres, según se formuló en la ecuación (2.12), el número de funciones arista es igual a dos para cada una de las cuatro aristas. Dado que por el momento se está evaluando el caso en que todos los elementos poseen el mismo grado polinomial, no es necesario aplicar la **Regla Mínima** [57], con lo cual todas las aristas tendrán el mismo número de funciones base. Una vez estimado esto, la enumeración se efectúa primeramente en las aristas Γ_1 y Γ_2 según la convención del elemento maestro 2.1, seguidas posteriormente por las aristas Γ_3 y Γ_4 , cuyos grados de libertad poseen el color **purpura** en la figura 5.2.

3. Finalmente los grados internos son los contabilizados en la enumeración global de los grados de libertad. El número de grados internos asignados a un elemento de grado polinomial $P^k = 3$ según la ecuación (2.14) es uno. Considerando que los grados internos no se ven influenciados por las reglas de conformidad en las aristas, siempre dependerán exclusivamente del grado P^k . En la figura 5.2 los grados están representados por el color **purpura**.

El procedimiento anterior nos muestra como debe ser efectuado la enumeración global de los grados de libertad, dependiendo de los grados polinomiales de cada elemento. Sin embargo la enumeración fue efectuada en un caso particular cuando los elementos poseen el mismo grado polinomial, en éste caso $P^k = 3$. Aquí, la regla mínima no fue utilizada, pero para dar una muestra de como ésta debe ser invocada una vez dos elementos adyacentes poseen grados polinomiales diferentes, modificaremos el sistema original al aumentar en un unidad el grado de dos elementos. Éste caso de transición entre un **Estado** y otro de la enumeración, representa un factor fundamental en nuestro trabajo, ya que es la base de un sistema más complejo que se estudiara en profundidad más adelante, en el cual, la independencia polinomial es explotada al desarrollar un **Método de Elementos Finitos Adaptativo de Alto Orden**.

Una vez establecido los cambios en los grados polinomiales, el diagrama en la figura 5.2 nos muestra como debe ser efectuada la nueva enumeración. Dado que las funciones en los vértices y en el interior de los elementos no están limitadas por las reglas de conformidad, el procedimiento de enumeración para estos grados no tendrá ninguna modificación. La regla mínima aplicada a las aristas con elementos cuyo grado polinomial es diferente, otorga a cada arista el número de grados de libertad correspondientes al menor de los grados, así las funciones base cuyo grado de libertad están asignados en la arista, están incluidas en el espacio de funciones asociados a cada elemento, garantizando la continuidad.

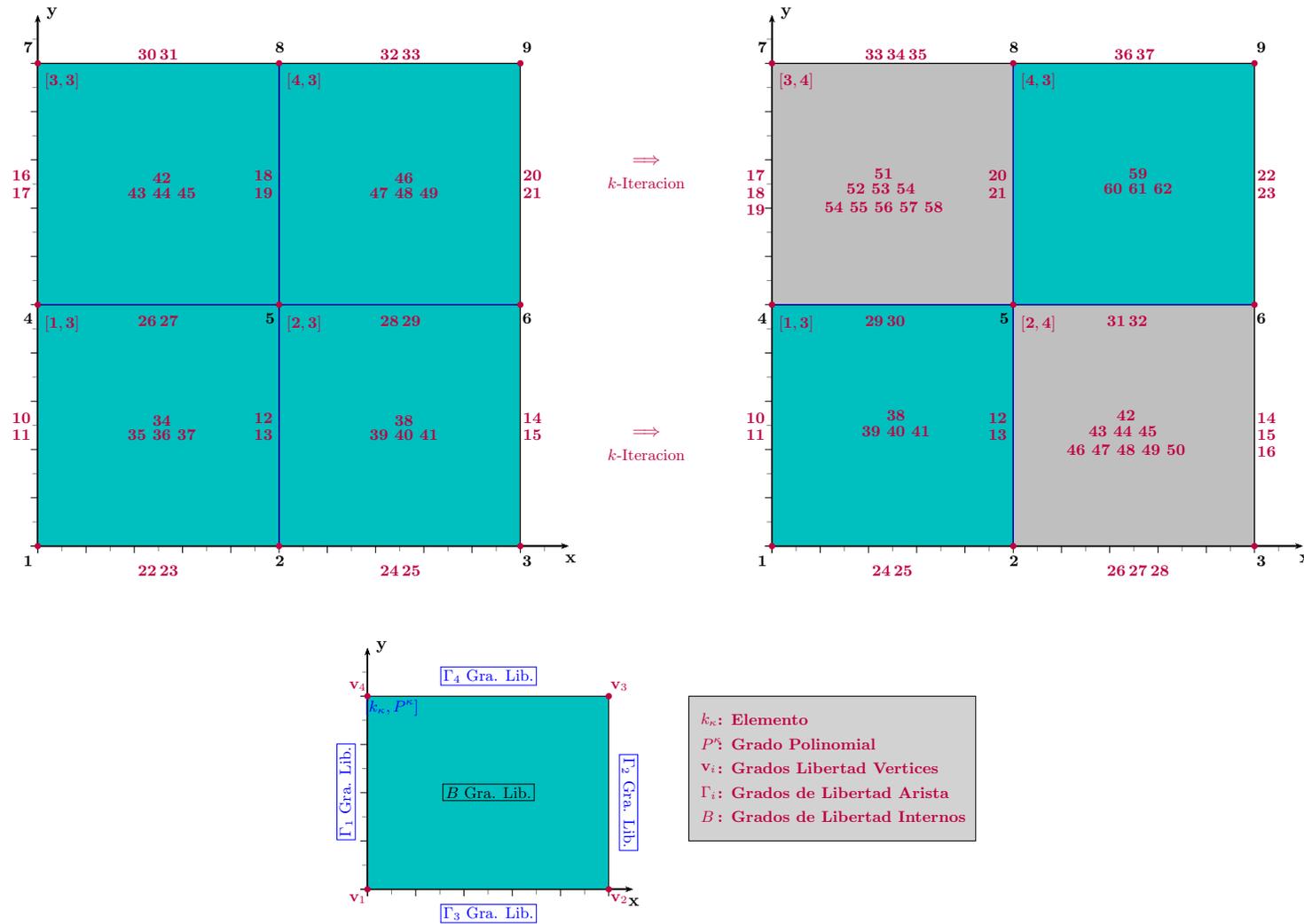


Figura 5.2: Diagrama de Conectividad de la discretización del dominio $\bar{\Omega}$, quien muestra el proceso de enumeración de los grados de libertad quien depende de los grados polinomiales locales, P^k .

La forma en que se plantea la enumeración de los grados de libertad, permite una separación por bloques de la matriz y el vector global, quien mejora la implementación de un método de solución del sistema. El método de solución, involucra la reducción de la matriz por bloques a una matriz diagonal por medio de un Método de Condesación Estática, quien posteriormente es complementado con un Método de Gradiente Conjugado Precondicionado.

5.4. Operadores de Conectividad \mathcal{O}^κ

La enumeración de los grados de libertad así como de los nodos que componen la malla, son parte fundamental en el ensamble del sistema global final. A partir de estos dos pasos, definimos tres operadores locales que contendrán la información global pertinente a cada elemento que compone la malla: **Operador Vértice** \mathcal{O}_v^κ , **Operador Arista** \mathcal{O}_f^κ y **Operador Interno** \mathcal{O}_I^κ . A continuación proporcionamos las definiciones de cada uno de los operadores y un ejemplo a partir del elemento geométrico $\kappa = 2$ de la figura 5.2.

Operador Vértice

Éste operador es el encargado de almacenar los grados globales correspondientes a los nodos de cada elemento.

$$\mathcal{O}_v^2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 6 \\ 5 \end{bmatrix} . \quad (5.1)$$

Operador Arista

El operador arista \mathcal{O}_F^κ esta compuesto por cuatro operadores menores, cuya función es dar albergue a los grados de libertad asociados a cada arista, así como el grado polinomial mínimo entre los dos elementos que lo comparten.

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\Gamma_1}^2 &= \begin{bmatrix} 12 \\ 13 \end{bmatrix} , & \mathcal{O}_{\Gamma_2}^2 &= \begin{bmatrix} 14 \\ 15 \\ 16 \end{bmatrix} , \\ \mathcal{O}_{\Gamma_3}^2 &= \begin{bmatrix} 26 \\ 27 \\ 28 \end{bmatrix} , & \mathcal{O}_{\Gamma_4}^2 &= \begin{bmatrix} 31 \\ 32 \end{bmatrix} . \end{aligned} \tag{5.2}$$

Operador Interno

Los grados de libertad correspondientes a las funciones internas asociados a un elemento κ serán almacenados en el operador interno.

$$\mathcal{O}_I^2 = \begin{bmatrix} 42 \\ 43 \\ 44 \\ 45 \\ 46 \\ 47 \\ 48 \\ 49 \\ 50 \end{bmatrix} . \tag{5.3}$$

Los operadores de conectividad son una forma económica de representar la dependencia de cada grado de libertad del sistema con respecto al conjunto de elementos geométricos. El conocer esta relación nos ayuda acceder de una manera más rápida a las componentes de la matriz global,

así como del vector de carga global, de tal forma que se ahorra en espacio de almacenamiento durante el procedimiento de ensamble.

Otra funcionalidad de estos operadores, radica en la superposición que va tomar lugar en el momento en que se estén usando las matrices locales, en la construcción de la matriz global. Por ejemplo, los grados de libertad asociados a los vértices de los elementos, reciben contribución de cuatro elementos quienes comparten dicho nudo; de igual forma para los grados de libertad que están definidos en las aristas de los elementos, son evaluados a partir de la contribución de aquellos dos elementos que comparten dicha arista. Las componentes de la matriz global asociadas a los modos internos, no recibirán contribución más que de un solo elemento al cual se encuentran asociados, de tal forma que estas componentes no presentan ninguna modificación con respecto a aquellas calculadas en las matrices locales.

Esta última funcionalidad de los operadores de conectividad se ve reflejada en el cumplimiento de las condiciones de conformidad, especialmente de la continuidad en las fronteras de los elementos, incluyendo por supuesto, los nodos.

5.5. Ensamble Matriz Masa/Rigidez Global

El hecho de construir un espacio de funciones $\mathcal{V}_{h,p}$ a partir de la unión de un conjunto de subespacios \mathcal{V}^k , la definición tanto de un operador bilineal $a(\cdot, \cdot)$ como de uno lineal $b_f(\cdot)$ sobre los subespacios \mathcal{V}^k , la construcción de las matrices locales \mathcal{M}^k y \mathcal{R}^k así como el vector de carga \tilde{b}_f^k , sin olvidar la disposición en la cual se ha dado lugar la enumeración de los grados de libertad globales y la definición de los operadores locales \mathcal{O}_v^k , \mathcal{O}_l^k y \mathcal{O}_f^k , hacen concurrence en esta sección en la cual dará lugar al ensamble de la **Matriz de Masa/Rigidez Global**.

La enumeración de los grados de libertad nos permite hacer una distinción entre **grados internos** y **grados externos**: los grados internos están compuestos por las funciones internas y los externos por sus pares vértice y arista. Así las matrices de Rigidez y Masa locales presentan una disposición

por bloques

$$\mathcal{A}^\kappa = \alpha \mathcal{R}^\kappa + \lambda \mathcal{M}^\kappa = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_e^\kappa & \mathcal{A}_{ei}^\kappa \\ (\mathcal{A}_{ei}^\kappa)^T & \mathcal{A}_i^\kappa \end{bmatrix}, \quad (5.4)$$

donde \mathcal{A}_e representa las componentes de \mathcal{A}^κ resultado de la interacción entre los modos Externos-Externos, \mathcal{A}_{ei} representa las componentes de \mathcal{A}^κ resultado del acoplamiento entre los grados Externos-Internos, y \mathcal{A}_i representa las componentes de \mathcal{A}^κ resultados de la interacción entre los modos Internos-Internos.

La forma de ensamblar la matriz global nos proporcionara una mejor precisión en los coeficientes u , obtenidos al solucionar el sistema final. Si la matriz global presenta una configuración esparsa con sus entradas distribuidas en sus diagonales principales, el número de condición y principalmente el número de iteraciones del Método de Gradiente Conjugado Precondicionado (**MGCP**), usado en la solución del sistema, será menor, mejorando la precisión de la solución final. Sin embargo, es necesario considerar en el ensamble global que las condiciones de conformidad deben ser mantenidas: el valor de grados de libertad que son compartidos en diferentes elementos adyacentes deben coincidir, manteniendo la continuidad entre elementos. Es por ésta razón que los operadores globales son fundamentales.

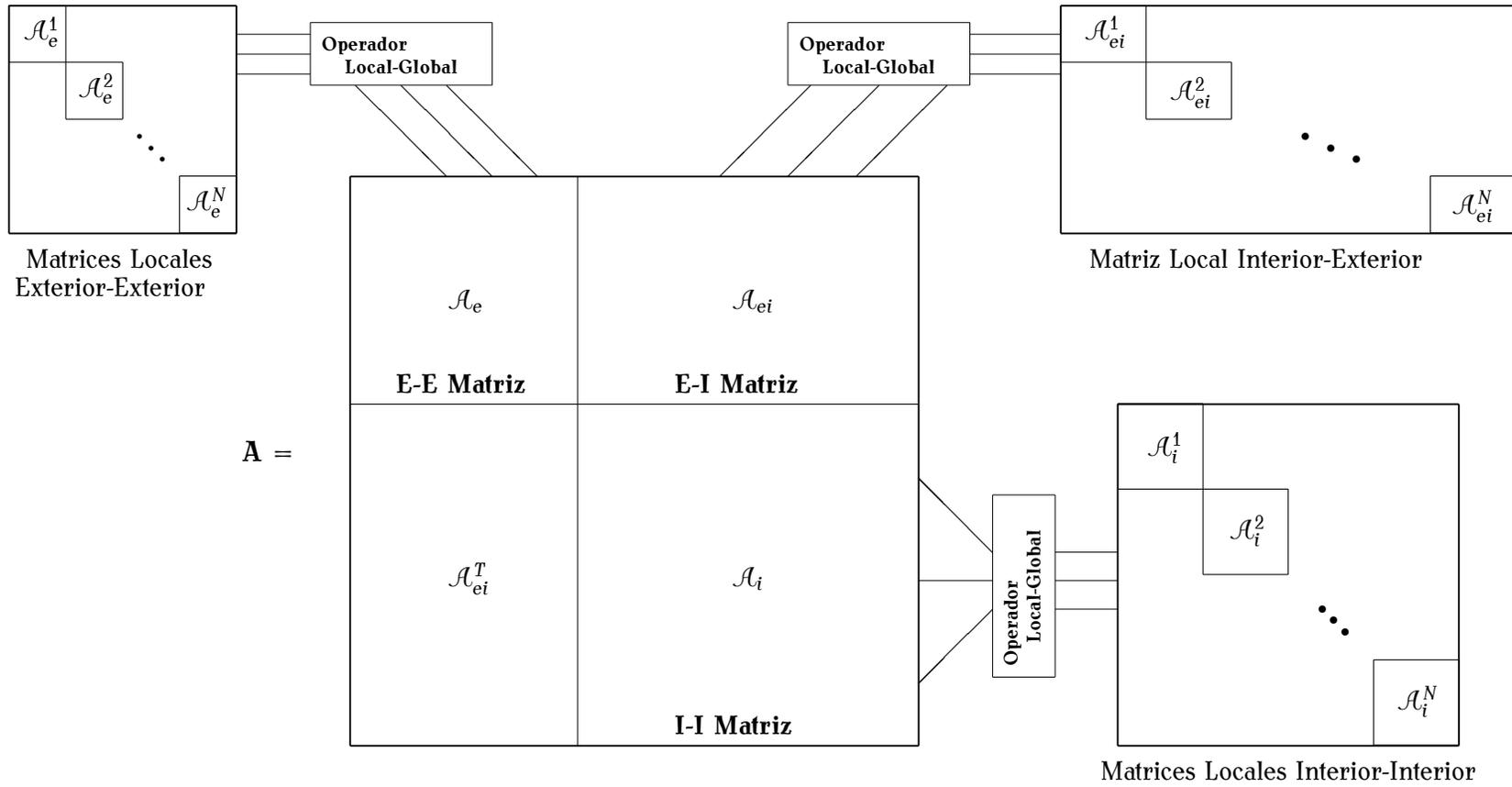


Figura 5.3: Procedimiento de Ensamble de la Matriz Global de Masa/Rigidez a partir de las matrices locales de Masa/Rigidez, por medio de los operadores de conectividad $\mathcal{O}_{\{v,\Gamma,I\}}^\kappa$ con $\kappa \in \mathcal{T}_{h,p}$ (Fuente [37]).

Al igual que las matrices locales, la matriz global va a poseer una estructura por bloques en las cuales estaran representadas las interacciones de los grados internos y externos. Como se presenta en la figura 5.5, cada una de las submatrices que componen la matriz global, sera construidas a partir de las matrices locales por medio de los operadores globales. Ésta visión es un poco pictórica para dar una muestra del concepto que involucra el ensamble de la matriz global, sin embargo, la forma en que la matriz construida se encuentra descrita en Algoritmo 5.1.

Algoritmo 5.1: Ensamble Matriz Global \mathcal{A}

Input: Conjunto $\mathcal{A}^\kappa = \{ \mathcal{A}_e^\kappa, \mathcal{A}_{ei}^\kappa, \mathcal{A}_i^\kappa \}$ de matrices locales.

Operadores de Conectividad \mathcal{O}_e^κ y \mathcal{O}_I^κ .

Output: Matrices $\{ \mathcal{A}_e, \mathcal{A}_{ei}, \mathcal{A}_i \}$

```

1
2 for  $\kappa \leftarrow 1$  to  $N$  do
3   for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
4      $k = \mathcal{O}_e^\kappa[i]$ 
5     for  $j \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
6        $l = \mathcal{O}_e^\kappa[j]$ 
7        $\mathcal{A}_e[k][l] = \mathcal{A}_e[k][l] + \mathcal{A}_e^\kappa[i][j]$ 
8
9   for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
10     $k = \mathcal{O}_e^\kappa[i]$ 
11    for  $j \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_I^\kappa)$  do
12       $l = \mathcal{O}_I^\kappa[j]$ 
13       $\mathcal{A}_{ei}[k][l] = \mathcal{A}_{ei}[k][l] + \mathcal{A}_{ei}^\kappa[i][j]$ 
14
15   for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_I^\kappa)$  do
16     $k = \mathcal{O}_I^\kappa[i]$ 
17    for  $j \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
18       $l = \mathcal{O}_e^\kappa[j]$ 
19       $\mathcal{A}_i[k][l] = \mathcal{A}_i[k][l] + \mathcal{A}_i^\kappa[i][j]$ 
20 return  $\{ \mathcal{A}_e, \mathcal{A}_{ei}, \mathcal{A}_i \}$ 

```

El Algoritmo 5.1 esta compuesto por tres secciones evaluadas para cada uno de los elementos que componen $\tau_{h,p}$: en una primera sección las componentes de la matriz \mathcal{A}_e^κ son posicionados en aquellos lugares de la matriz \mathcal{A}_e dictados por el operador externo \mathcal{O}_e^κ para cada elemento

κ . La continuidad de la solución, es exigida en el algoritmo al sumar las componentes de las matrices externas en aquellos elementos que comparten grados externos. En una segunda parte, las componentes de la matriz \mathcal{A}_{ei}^κ son posicionadas en la matriz \mathcal{A}_{ei} , gracias a las posiciones proporcionadas por los operadores \mathcal{O}_e^κ y \mathcal{O}_i^κ , debido a que ésta matriz representa la interacción entre los grados de libertad internos y externos. Finalmente en la última sección del algoritmo, las matrices \mathcal{A}_i^κ son así mismo dispuestas en los grados globales dispuestos por \mathcal{O}_i^κ , considerando que estos grados de libertad no están restringidos por la continuidad en la frontera de los elementos, esta sección realmente se comporta como una traslación de las matrices locales en las globales. De este modo la matriz global toma una representación por bloques descrita en la ecuación (5.5):

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_e & \mathcal{A}_{ei} \\ \mathcal{A}_{ei}^T & \mathcal{A}_i \end{bmatrix}, \quad (5.5)$$

quien presenta un patrón de esparsidad presentado en la figura 5.4. Este patrón ha sido obtenido al seleccionar como base jerárquica construida a partir de los polinómios ortogonales de Jacobi (ver Tabla 2.1) con un grado polinomial igual a cuatro.

No solamente la esparsidad está determinando por la forma en que es construida la matriz global. También la elección de las funciones base que dan soporte a la solución del **PVC** (ecuaciones (1.7)-(1.8)) y su posible ortogonalidad podría disminuir la cantidad de componentes de la matriz. Un caso especial de este tipo de elecciones, fueron presentadas por [46], quien presenta un estudio de diferentes bases, no únicamente polinomiales, sino también construidas a partir de un análisis de esparsidad de la matriz final, en método de elementos finitos de versión-**p**.

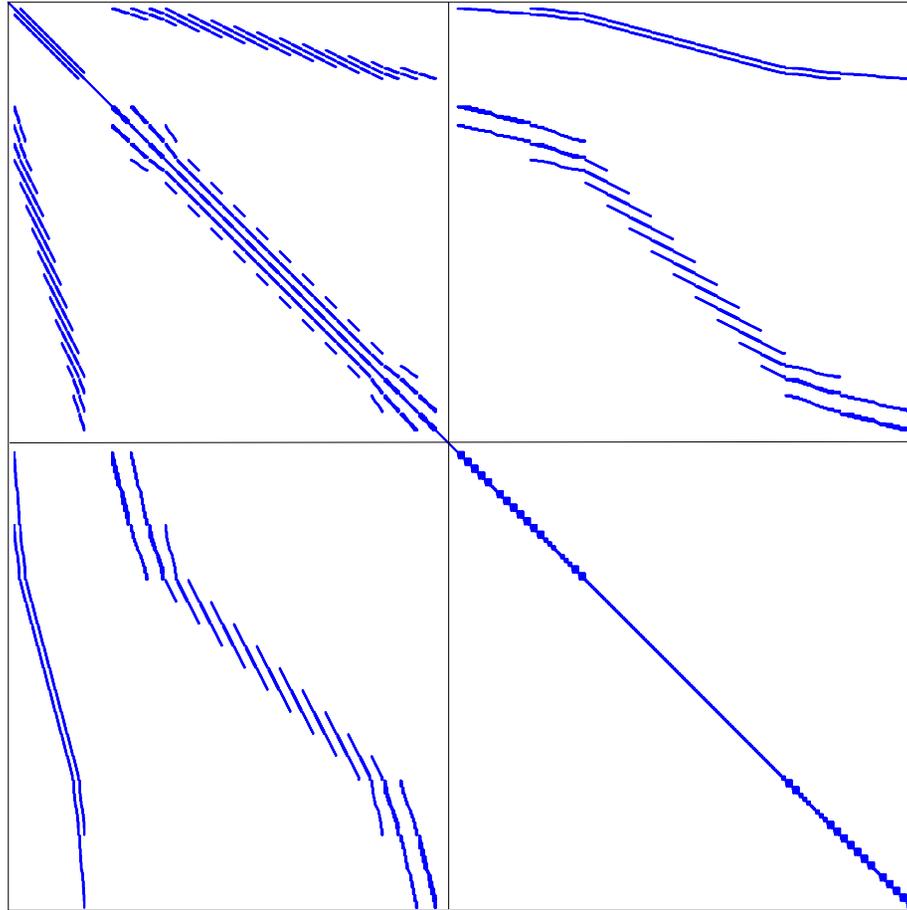


Figura 5.4: Patron de Esparsidad para una Matriz de Rigidez/Masa de un problema de contorno, descrito en la ecuación (7.1), al cual ha dado lugar 2139 grados de libertad con un grado polinomial máximo 5 y 49336 entradas diferentes de cero.

5.6. Ensamble Vector de Carga Global

Dada la naturaleza de los vectores de carga locales \tilde{b}_e^κ y \tilde{b}_i^κ , el ensamble del vector global sigue un esquema muy similar al expuesto por el presentado en la construcción de la matriz \mathcal{A} . El Algoritmo 5.2 muestra los pasos necesarios para éste ensamble.

Algoritmo 5.2: Ensamble Vector Global $\tilde{\mathbf{b}}$

Input: Conjunto de vectores locales $\tilde{\mathbf{b}}^\kappa = \{\tilde{b}_e^\kappa, \tilde{b}_i^\kappa\}$.
Operadores de Conectividad \mathcal{O}_e^κ y \mathcal{O}_i^κ .

Output: Vectores $\{\tilde{b}_e, \tilde{b}_i\}$

```

1
2 for  $\kappa \leftarrow 1$  to  $N$  do
3     for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
4          $k = \mathcal{O}_e^\kappa[i]$ 
5          $\tilde{b}_e[k] = \tilde{b}_e[k] + \tilde{b}_e^\kappa[i]$ 
6
7     for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_i^\kappa)$  do
8          $k = \mathcal{O}_i^\kappa[i]$ 
9          $\tilde{b}_i[k] = \tilde{b}_i^\kappa[i]$ 
10 return  $\{\tilde{b}_e, \tilde{b}_i\}$ 
    
```

Como era de esperarse, el vector de carga global estará compuesto por dos subvectores \tilde{b}_e y \tilde{b}_i cuyas componentes son obtenidas a partir de la ecuación (3.26). De esta forma el vector de carga global toma la forma:

$$\tilde{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \tilde{b}_e \\ \tilde{b}_i \end{bmatrix}. \quad (5.6)$$

5.7. Inclusión Condiciones de Frontera

Típicamente el estudio numérico de problemas de contorno, involucra superficies o fronteras curvas quienes deben ser aproximadas por medio de elementos, cuyas aristas en el caso bidimensional o sus lados en tres dimensiones, sean lo más próximos a dicha curvatura. Cuando

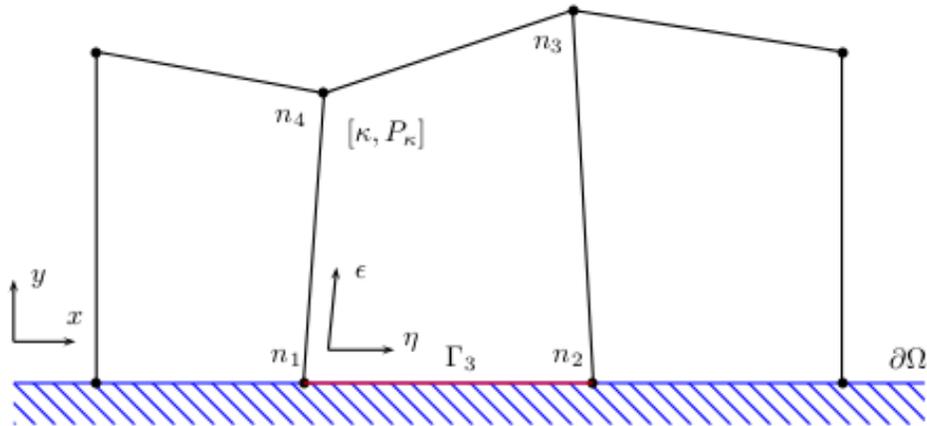


Figura 5.5: Elemento κ . Tratamiento Condiciones de Frontera

los elementos geométricos poseen lados rectos, el operador ξ^κ toma una forma lineal el cual transforma el elemento κ al elemento κ_r . Sin embargo cuando la región es curva, es conveniente hacer uso de una expansión **iso-paramétrica** quien de manera adecuada define un conjunto de funciones paramétricas quienes representarían las fronteras de los elementos curvos por medio del elemento de referencia [35]. En nuestro caso y por la simplicidad de nuestro modelo, la elección ha sido el operador lineal. Una vez establecido la parametrización de las fronteras, la inclusión de las condiciones de frontera toma nuestra atención.

En el momento de describir nuestro problema de contorno en las ecuaciones (1.7) y (1.8), y en especial en (1.8) donde se definieron las condiciones de frontera, establecimos que su naturaleza sería de primer grado no homogénea, es decir condiciones de frontera de Dirichlet la cual necesitamos proyectar sobre una base de expansión discreta, de ésta forma dada una condición de frontera $g(x,y)$ donde $(x,y) \in \partial\bar{\Omega}$, necesitamos un método consistente de aproximación de la condición de frontera en términos de nuestra base global de expansión.

Lo que se quiere es proyectar una condición de frontera conocida $g(x,y)$ sobre una arista Γ que hace parte de la frontera $\partial\kappa$ de un elemento κ que así mismo compone $\partial\Omega$. Según la figura 5.5, la solución a lo largo de la frontera del elemento κ puede ser escrita como:

$$u(x,y)\Big|_{\Gamma_3^\kappa} = \sum_{i=1}^{N^\kappa} \hat{u}_i \hat{\phi}_i^\kappa(x,y)\Big|_{\Gamma_3^\kappa} , \quad (5.7)$$

quien según la descomposición de las funciones modales descritas en las secciones 2.2.1, 2.2.2 y 2.2.3, puede ser reescrita como:

$$u(x,y)\Big|_{\Gamma_3^\kappa} = \sum_{p=0}^{P^\kappa} u_{p0}^\kappa \psi_p(\epsilon(x,y)) . \quad (5.8)$$

Ésta expansión de la función $u(x,y)$ en la frontera $\partial\Omega$, es equivalente a una expansión de una función de una sola variable sobre la arista Γ_3^κ del elemento κ . Así la función $u(x,y)$ debe coincidir con la función $g(x,y)$ que ha sido especificada de antemano. Con esto en mente,

$$\sum_{p=0}^{P^\kappa} u_{p0}^\kappa \psi_p(\epsilon) \approx g(X(\epsilon, -1), Y(\epsilon, -1)) . \quad (5.9)$$

De éste modo nuestra primera parte en la inclusión de las condiciones de frontera, se transforma en un problema de proyección local sobre cada elemento κ , usando las funciones base modales $\psi_p(\epsilon)$, donde el objetivo es determinar los valores de u_{p0} .

5.7.1. Interpolación Basada en una Proyección 1D

Consideremos una función $g(\epsilon) \in \mathcal{C}^1(\kappa_r)$, donde $\kappa_r = [-1,1]$. En ausencia de una arista en los elementos unidimensionales, las funciones jerárquicas que componen un elemento unidimensional pueden separarse, en funciones vértice ψ_0 , ψ_P y funciones internas ψ_l , con $l = 1, 2, \dots, P-1$. La proyección basada en una interpolación se contruye considerando el aporte de ambos tipos de funciones [57]: primeramente la contribución de las funciones vértices y seguidamente la

interpolación de su residuo, usando las funciones internas. Así,

$$g(\epsilon) \approx g_v(\epsilon) + g_i(\epsilon) \quad . \quad (5.10)$$

De éste modo, la proyección usando las funciones vértices y teniendo en cuenta el valor unitario que toman éstas funciones en los extremos del intervalo,

$$g_v(\epsilon) = g(-1)\psi_0(\epsilon) + g(1)\psi_p(\epsilon) \quad , \quad (5.11)$$

con lo cual, la proyección del residuo de ésta

$$g_i(\epsilon) = g(\epsilon) - g_v(\epsilon) = \sum_{l=1}^{P-1} \tilde{g}_l \psi_l(\epsilon) \quad . \quad (5.12)$$

Así, un problema de proyección sobre el espacio de funciones

$$\Psi^{\kappa_r} = \text{span}\{\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_p\} \quad , \quad (5.13)$$

puede ser visto como un problema de minimización, el cual es equivalente a un sistema algebraico

$$\int_{\kappa_r} (g - g_v - g_i)'(\psi_l)' d\epsilon = 0 \quad , \quad l = 1, \dots, P-1 \quad , \quad (5.14)$$

para los coeficientes desconocidos \tilde{g}_l [9].

Ésta aproximación, minimiza el error en la norma L^2 entre la condición de frontera exacta y la aproximación en la frontera de la solución numérica.

Una vez los coeficientes

$$\tilde{\mathbf{g}}^{\kappa} = \{\tilde{g}_0, \tilde{g}_1, \dots, \tilde{g}_p\}, \quad (5.15)$$

han sido obtenidos, estos corresponden a los valores de los coeficientes $\hat{u}_{p_0}^{\kappa}$ asignados a los grados de libertad agrupados en un vector \mathcal{O}_b^{κ} quienes deben ser incluidos en el sistema $(\mathcal{A}, \tilde{\mathbf{b}})$, para cada

uno de los elementos κ que se encuentren interactuando con la frontera Γ .

5.8. Condensación Estática

Un tratamiento previo a los valores de los coeficientes que componen el vector \mathbf{x} que dan solución al sistema (1.18) que a su vez nos aproxima a una solución de nuestro problema variacional equivalente (1.13), es nuestro siguiente objetivo. Cada uno de estos coeficientes, asumira un valor que estara determinado por la interacción de sus funciones base asociadas, con sus pares mas cercanos, ya sean aquellas a un mismo κ o aquellas dispuestas en los primeros vecinos del elemento geométrico. Asi, el vector \mathbf{x} describe en una forma numérica el comportamiento del sistema físico, de allí, que sus entradas sean denominadas como **Grados de Libertad del Sistema** o **DOF**, por sus siglas en inglés.

La forma en que fue construido el sistema (1.18) y en especial la disposición de los grados de libertad, nos han proporcionado características muy útiles en la solución final del sistema: disposición por bloques (grados internos y externos, ecuación (5.5)), simetría y positividad (gracias al operador $a(\cdot, \cdot)$, ecuación (1.10)). Para ser uso de éstas características de nuestro sistema lineal, la solución \mathbf{x} es construida de la solución de *dos* sistemas lineales quienes poseen dimensiones menores al problema original, cuya ganancia final es encontrar una mejora de la precisión de la solución final [56]. Ésta estrategia algunas veces toma el nombre de **Reducción** o **Condensación** del sistema lineal.

El procedimiento de condensación o reducción estática básico fue ilustrado en la publicación de [28], pero en una forma general puede ser planteado usando la notación matricial usada por [66] de la siguiente forma:

El problema discreto **PVD** (ecuación (1.18)) puede ser escrito como,

$$\begin{bmatrix} \mathcal{A}_e & \mathcal{A}_{ei} \\ \mathcal{A}_{ei}^T & \mathcal{A}_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_e \\ \mathbf{x}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{b}}_e \\ \tilde{\mathbf{b}}_i \end{bmatrix}. \quad (5.16)$$

Dado que la matriz \mathcal{A}_i es una matriz diagonal por bloques, es decir

$$\mathcal{A}_i = \text{blockdiag} \left\{ \mathcal{A}_i^\kappa, \quad \forall \kappa \in \mathcal{T}_{hp} \right\}, \quad (5.17)$$

y considerando que las submatrices \mathcal{A}_i^κ son bien condicionadas, calcular la matriz inversa \mathcal{A}_i tiene un costo admisible con lo cual la idea es expresar los grados de libertad internos \mathbf{x}_i en la forma :

$$\mathbf{x}_i = \mathcal{A}_i^{-1} \left(\tilde{\mathbf{b}}_i - \mathcal{A}_{ei}^T \mathbf{x}_e \right), \quad (5.18)$$

de tal forma que al substituir ésta expresión en la primera fila de (5.16), se forma el sistema

$$\tilde{\mathcal{A}} \mathbf{x}_e = \mathbf{b}, \quad (5.19)$$

donde

$$\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{A}_e - \mathcal{A}_{ei} \mathcal{A}_i^{-1} \mathcal{A}_{ei}^T \quad (5.20)$$

y

$$\mathbf{b} = \tilde{\mathbf{b}}_e - \mathcal{A}_{ei}^{-1} \tilde{\mathbf{b}}_i. \quad (5.21)$$

La solución del sistema (5.19) nos permite obtener las entradas \mathbf{x}_e del vector solución \mathbf{x} , seguido a esto, la solución \mathbf{x}_e es usada en los grados internos \mathbf{x}_i por medio de la ecuación (5.18). Aunque en principio, la formulación no indica algún tipo de aproximación que involucre un tipo de error en la solución \mathbf{x} , numéricamente esta reducción de Guyan plantea un error numérico quien puede ser derivado a partir de un análisis de la teoría de perturbación [56].

Aunque en nuestro análisis, el método de condensación estática es usada como una fase posterior

al ensamble global de la matriz final [13], es posible aplicar esta reducción en una fase intermedia. En [63], se muestra como éste tipo de reducción en un paso previo al ensamble global puede llegar a ser mas eficiente el algoritmo final de solución. Otra forma de mejorar la precisión final del problema de contorno asi como la eficiencia del algoritmo, el sistema (5.19) es solucionado por medio de un Método de Gradiente Conjugado usando un preconditionador del tipo *ILU*, quien en el siguiente capitulo sera estudiado en una forma mas específica.

Algunas de los técnicas de condensación mas usadas, en aquellos problemas que involucran el MEF de alto orden aplicado a análisis de problemas de contorno, definidos en dominios de tres dimensiones, son : Condensación de Guyan tanto Estática como Dinámica (**Guyan Condensation** [55]) , Inprovent Reduction System (**IRS**), Component Mode Synthesis Method (**CMS/Craigh-Bampton**), System Equivalent Expansion Reduction Process (**SEREP**) [38].

Éste y otros procedimientos necesarios en el Método de Elementos Finitos de Orden Superior (EFOS), son expuestos en el siguiente algoritmo.

5.9. Algoritmo e Implementación

1. **Construcción de Malla.** Se construye una malla de N elementos rectangulares κ quienes cumplen las condiciones (1), cuyo parámetro es su área característica h y se encuentran agrupados en \mathcal{T}_h quien se considere proximo a el dominio $\bar{\Omega}$ del problema de contorno.
2. **Asignación de Grado Polinomial.** Una vez se ha construido una malla elementos, a cada uno de ellos le es asignado un valor entero positivo diferente de cero, quien toma el nombre de Grado Polinomial, P^κ , y asi tenemos un conjunto $\mathcal{T}_{h,p}$, donde $P = \max \{P^\kappa\}$, $\kappa = 1, \dots, N$.
3. **Ensamble de Conectividad.** Dada la malla $\mathcal{T}_{h,p}$ contabilizamos el número de grados de libertad asi como su relación con cada uno de los elementos geométricos.

3.1 Grados Polinomiales Locales. Antes de considerar el número de grados de libertad, para cada una de las aristas de los N elementos que componen $\mathcal{T}_{h,p}$, aplicamos las reglas mínimas de conformidad, de tal forma que a cada una de las cuatro aristas, se le asigna un grado polinomial $P_{\Gamma_i}^{\kappa}$, cuya elección es basada en el lema 3.4.1.

3.2 Enumeración Grados de Libertad. Una vez que los grados polinomiales han sido especificados en las aristas de cada elemento, se procede a enumerar los grados de libertad de la malla, como se especifico en la sección 5.3.

3.3 Adjudicación Operadores de Conectividad. Los grados de libertad global, se relacionan con cada uno de los N elementos por medio de los operadores de conectividad (5.1), (5.2) y (5.3). De éste modo a cada uno de los elementos κ se le asignan tres operadores de conectividad \mathcal{O}_v^{κ} , $\mathcal{O}_\Gamma^{\kappa}$ y \mathcal{O}_i^{κ} , quienes al agruparse segun las funciones internas y externas generar dos operadores $\mathcal{O}_e^{\kappa} = \mathcal{O}_v^{\kappa} \cup \mathcal{O}_\Gamma^{\kappa}$ y $\mathcal{O}_i^{\kappa} = \mathcal{O}_i^{\kappa}$.

4. Ensamble Sistema Global (\mathcal{A},b) . La construcción del sistema lineal, cuya solución nos proveerán los valores de los grados de libertad que describen el problema de valor de contorno, es ensamblado a partir de:

Para cada elemento $\kappa \in \mathcal{T}_{h,p}$:

4.1 Asignación Funciones Base \mathcal{V}^r : Con los grados de libertad globales proporcionados por los operadores de conectividad, proseguimos a asignarles las funciones base locales correspondientes, Φ_v , $\Phi_\Gamma^{P_\kappa}$ y $\Phi_i^{P_\kappa}$ descritas en las secciones 2.2.1, 2.2.2 y 2.2.3.

4.2 Funciones Externas $\Phi_e^{P_\kappa}$: Las funciones vértice y las funciones arista asociadas al elemento κ se consideran las funciones externas dado a que se encuentran definidas en la frontera del elemento, asi tenemos un conjunto de funciones $\Phi_e^{P_\kappa} = \Phi_v \cup \Phi_\Gamma^{P_\kappa}$.

4.3 Operador Biyectivo ξ^κ : Damos forma al operador biyectivo ξ^κ que está compuesto por una matriz $A_\kappa \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, un vector $b_\kappa \in \mathbb{R}^2$ y al jacobiano \mathcal{J}^κ .

4.4 Puntos y Pesos de Integración: Con el grado polinomial P^κ , construimos los puntos χ^κ y pesos de integración ω^κ (Apéndice B), indispensables en la evaluación de las componentes del operador $a(\cdot, \cdot)$. Así mismo en éste paso, la matriz de diferenciación \mathbf{D} presentada en la ecuación (3.4), es construida a partir del operador biyectivo ξ^κ .

4.5 Evaluación Matriz Local \mathcal{A}^κ : La distinción entre funciones internas y externas, nos permite dar forma por bloques de las submatrices de rigidez \mathcal{R}^κ y de masa \mathcal{M}^κ como se muestra en la ecuación (5.4).

- 1) Evaluamos los elementos de la matrices de masa \mathcal{M}^κ y de rigidez \mathcal{R}^κ usando las funciones externas $\Phi_e^{P^\kappa}$ al interactuar con ellas mismas usando los puntos χ^κ , los pesos de integración ω^κ y la matriz \mathbf{D} obtenidos en el paso 4d, substituyendolos en las ecuaciones (3.18) y (3.21) respectivamente. Una vez obtenidas estas matrices externas, damos lugar a la matriz \mathcal{A}_e^κ .
- 2) Siguiendo el mismo procedimiento del paso 4e1, se eligen las funciones base externas $\Phi_e^{P^\kappa}$ y sus pares internas $\Phi_I^{P^\kappa}$ para construir sus respectivas matrices de masa y rigidez de tal forma que al sumarlas, según la ecuación (5.4), obtenemos la matriz \mathcal{A}_{ei}^κ .
- 3) Finalmente al elegir las funciones $\Phi_I^{P^\kappa}$ y seguir el procedimiento 4e1, tenemos la matriz \mathcal{A}_i^κ .

4.6 Evaluación Vector Local \tilde{b}_f^κ . El procedimiento de construcción del vector local \tilde{b}_f^κ tiene gran similitud al expuesto en el paso 4e en la evaluación de la matriz local \mathcal{A}^κ .

- 1) Usando el operador inverso $\xi^{(-\kappa)}$ a partir de los puntos de integración χ^κ obtenemos los puntos correspondientes en el espacio físico, donde es evaluada la función de carga $f(x, y)$, dando lugar a la matriz \mathcal{F} .
- 2) Considerando las funciones externas Φ_e^κ así como la matriz \mathcal{F} , y los puntos χ^κ con los pesos de integración ω^κ , substituyendolos en la ecuación (3.26), obtenemos el

vector $\tilde{\mathbf{b}}_e^\kappa$.

- 3) Retomando el paso anterior pero evaluado con las funciones internas Φ_1^κ , calculamos el vector $\tilde{\mathbf{b}}_1^\kappa$.

4.7 Ensamble Matriz \mathcal{A} y vector \mathbf{b} . Con las matrices \mathcal{A}_e^κ , \mathcal{A}_{ei}^κ y \mathcal{A}_i^κ que componen la matriz \mathcal{A}^κ , los operadores de conectividad son usados para dar lugar a la matriz \mathcal{A} , segun el algoritmo 5.3.

Algoritmo 5.3: Ensamble Sistema $(\mathcal{A}, \mathbf{b})$

Input: Conjunto $\tilde{\mathbf{A}} = \{\mathcal{A}_e^\kappa, \mathcal{A}_{ei}^\kappa, \mathcal{A}_i^\kappa\}$ de matrices locales.

Conjunto de vectores locales $\tilde{\mathbf{b}} = \{\tilde{\mathbf{b}}_e^\kappa, \tilde{\mathbf{b}}_1^\kappa\}$.

Operadores de Conectividad \mathcal{O}_e^κ y \mathcal{O}_1^κ .

Output: Matrices $\{\mathcal{A}_e, \mathcal{A}_{ei}, \mathcal{A}_i\}$ vectores de carga $\{\tilde{\mathbf{b}}_e, \tilde{\mathbf{b}}_i\}$

```

1
2 for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
3    $k = \mathcal{O}_e^\kappa[i]$ 
4    $\tilde{\mathbf{b}}_e[k] = \tilde{\mathbf{b}}_e[k] + \tilde{\mathbf{b}}_e^\kappa[i]$ 
5   for  $j \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
6      $l = \mathcal{O}_e^\kappa[j]$ 
7      $\mathcal{A}_e[k][l] = \mathcal{A}_e[k][l] + \mathcal{A}_e^\kappa[i][j]$ 
8
9 for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_e^\kappa)$  do
10   $k = \mathcal{O}_e^\kappa[i]$ 
11  for  $j \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_1^\kappa)$  do
12     $l = \mathcal{O}_1^\kappa[j]$ 
13     $\mathcal{A}_{ei}[k][l] = \mathcal{A}_{ei}[k][l] + \mathcal{A}_{ei}^\kappa[i][j]$ 
14
15 for  $i \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_1^\kappa)$  do
16   $k = \mathcal{O}_1^\kappa[i]$ 
17   $\tilde{\mathbf{b}}_1[k] = \tilde{\mathbf{b}}_1^\kappa[i]$ 
18  for  $j \leftarrow 1$  to  $\dim(\Phi_1^\kappa)$  do
19     $l = \mathcal{O}_1^\kappa[j]$ 
20     $\mathcal{A}_i[k][l] = \mathcal{A}_i^\kappa[i][j]$ 
21 return  $\{\mathcal{A}_e, \mathcal{A}_{ei}, \mathcal{A}_i\}, \{\tilde{\mathbf{b}}_e, \tilde{\mathbf{b}}_i\}$ 

```

5. Inclusión Condiciones de Frontera. El sistema $(\mathcal{A}, \mathbf{b})$ representa la discretización de la

ecuación diferencial representada por el operador \mathcal{L} descrito en la ecuación (1.7). Para dar solución al problema de contorno en su conjunto, el sistema debe admitir la inclusión de las condiciones de frontera dadas por (1.8). Para ésto procedemos de la siguiente forma :

5.1 Identificación Grados de Libertad. Procedemos a identificar y almacenar en un vector **BounGF**, los grados de libertad globales que se encuentran tanto en los nodos como en las aristas de aquellos elementos geométricos que se encuentran sobre la frontera $\partial\Omega$.

5.2 Cálculo Grados de Libertad en Frontera. Usando el vector **BounGF**, procedemos a determinar el valor de cada uno de estos grados de libertad usando una proyección basada en una interpolación en 1D, descrita en la sección 5.7 por medio de las ecuaciones (5.12) y (5.14).

5.3 Inclusión Grados de Libertad. La inclusión de los valores de frontera es descrita en el algoritmo 5.4.

Algoritmo 5.4: Inclusión Condiciones de Frontera

Input: Conjunto $\tilde{\mathcal{A}} = \{\mathcal{A}_e, \mathcal{A}_{ei}\}$ de matrices locales. Conjunto de vectores locales $\tilde{\mathbf{b}} = \{\tilde{\mathbf{b}}_e, \tilde{\mathbf{b}}_i\}$.

Vector \mathbf{g}^k . Vector grados de libertad en $\partial\Omega$, \mathcal{O}_b^k .

Output: Matrices $\{\mathcal{A}_e, \mathcal{A}_{ei}, \mathcal{A}_i\}$ vectores de carga $\{\tilde{\mathbf{b}}_e, \tilde{\mathbf{b}}_i\}$

```

1
2 for i ← 1 to dim( $\mathcal{O}_b^k$ ) do
3     k =  $\mathcal{O}_b^k[i]$ 
4     for j ← 1 to N do
5          $\tilde{\mathbf{b}}_e[j] = \tilde{\mathbf{b}}_e[j] - \mathbf{g}^k[i] \times \mathcal{A}_e[j][k]$ 
6          $\tilde{\mathbf{b}}_i[j] = \tilde{\mathbf{b}}_i[j] - \mathbf{g}^k[i] \times \mathcal{A}_{ei}[j][k]$ 
7          $\mathcal{A}_e[k][j] = 1,0$ 
8          $\mathcal{A}_{ei}[k][j] = 1,0$ 
9      $\tilde{\mathbf{b}}_e[k] = \mathbf{g}^k[i]$ 
10 return  $\{\mathcal{A}_e, \mathcal{A}_{ei}\}, \{\tilde{\mathbf{b}}_e, \tilde{\mathbf{b}}_i\}$ 

```

6. Solución Sistema Global. Al incluir las condiciones de frontera el sistema (\mathcal{A},b) deja de ser mal condicionado y nos provee una única solución del **PVC**. Para un sistema que posee

gran cantidad de grados de libertad, se hace necesario el uso de un método adecuado en solución de sistemas lineales de gran tamaño. Gracias a nuestra separación entre grados externos e internos, la matriz \mathcal{A} a tomado una forma por bloques, la cual es simétrica y definida positiva. Para reducir la posibilidad de errores aleatorios, así como la reducción del número de operaciones elementales seguimos dos pasos fundamentales:

6.1 Condensación Estática. El procedimiento de condensación estática será descrito en una forma mas específica en la sección 5.8, pero su principio, es el la diagonalización por bloques de la matriz \mathcal{A} .

6.2 Método de Gradiente Conjugado Precondicionado. Una vez hemos conseguido que la matriz \mathcal{A} esté dispuesta en forma por bloques según la ecuación (5.5), ésta matriz con el vector (5.6) componen un sistema lineal cuya solución es obtenida por no mas de un número de pasos por medio del método de Gradientes Conjugados Precondicionado (ver capítulo 6).

7. Evaluación de Error. En éste punto la solución del problema de valor de contorno ha sido determinado. El siguiente paso en el análisis es determinar que tan proxima la solución numérica se encuentra de la solución analítica. Este proceso debe hacerse según la norma del espacio en el cual se esta trabajando como es descrito en el apéndice C.

8. Refinamiento-p. El refinamiento tipo \mathbf{p} implica el aumento del grado polinomial asociado a cada uno de los elementos geométricos que componen la discretización $\mathcal{T}_{h,p}$. Para determinar que elementos deben ser refinados, tomaremos como criterio de elección el error relativo $|e_r^\kappa|$ definido como :

$$|e_{r+1}^\kappa| = |u_{r+1}^\kappa - u_r^\kappa|_{L^2} \quad (5.22)$$

donde u_r^κ , es la solución del problema de contorno (1.7)-(1.8) en el paso de refinamiento r restringido al elemento geométrico κ , de tal forma que

$$|e_r^k| \leq \epsilon_p, \quad \text{donde } \epsilon_p \in \mathbb{R}^+. \quad (5.23)$$

La solución u_0^k será evaluada teniendo en cuenta una distribución polinomial de grado unitario en cada elemento $\kappa \in \mathcal{T}_{h,p}$.

9. **Visualización de Resultados.** La visualización de los resultados, así como de sus respectivos errores se efectúa usando las herramientas de **Matlab**®.

Comentario

Este algoritmo representa y condensa la forma en que el Método de Elementos Finitos de Orden Superior puede ser construido para dar solución a un problema de contorno. Su implementación, puede ser efectuada en cualquier lenguaje de programación ya sea **C++**, **C#**, cualquier versión de **Fortran** o software de alto rendimiento como **Matlab**®, **Mathematica**®. La elección de dicho lenguaje depende fundamentalmente del objetivo para el cual el algoritmo sea dispuesto y de la habilidad del usuario para desarrollar software en dicho lenguaje. En nuestro caso hemos dispuesto como plataforma de programación, **Matlab**®, haciendo las siguientes consideraciones: su versatilidad en el manejo de sistemas lineales, su forma adsequible de introducir las componentes de las matrices y especialmente la integración de la plataforma de visualización necesaria para la visualización de los resultados. Dado al hecho que no se hace uso explícito de funciones o algoritmos desarrollados por **Matlab**® (como es el caso del Método de Gradientes Conjugados), ya que en su totalidad todo el algoritmo es abierto, su traspaso a otro tipo de lenguaje de alto rendimiento, no representa un costo inmensurable de tiempo al momento de unificar el refinamiento tipo **p** y **h**.

Ahora considerando que **Matlab**® no representa un lenguaje de programación de alto o medio nivel, la programación de algoritmos abiertos tiene un costo considerable en tiempo de computo

con respecto a un lenguaje de alto rendimiento. Sin embargo, considerando el hecho que por ahora nos encontramos en una fase inicial de estudio del Método de Elementos Finitos de Orden Superior con refinamientos h y p , en problemas académicos que no involucran una alta complejidad, por ahora **Matlab**® podrá solventar nuestras expectativas.

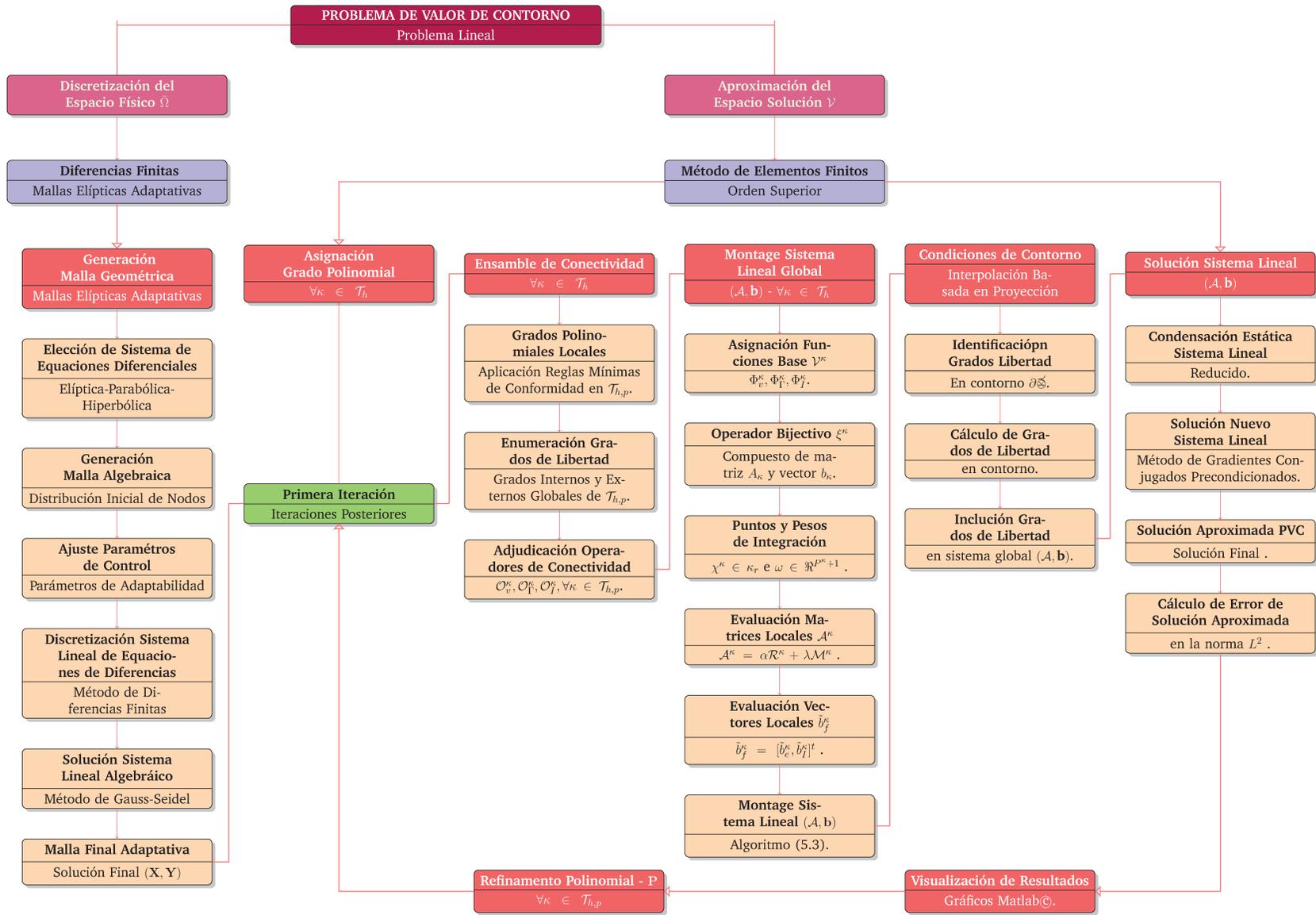


Figura 5.6: Diagrama de Flujo del Método de Elementos Finitos de Orden Superior

Capítulo 6

Métodos Iterativos - Solución de Sistemas Lineales

6.1. Introducción

El problema de resolver un sistema lineal $\mathcal{A}x = b$ como el generado en la procura de una solución de un PVC, es uno de los aspectos fundamentales en el análisis numérico. Existen diversas técnicas que han sido desarrolladas para dicho fin, sin embargo con el adelanto de la computación y los nuevos desarrollos teóricos expuestos en los últimos años, se ha generado un crecimiento considerable en las dimensión de las matrices que estos involucran. Para problemas a pequeña escala, métodos clásicos como lo son Método de Eliminación Gaussiana así como Gauss-Jordan proporcionan satisfactorias soluciones con mínimos errores aleatorios y un orden de $O(m^3)$ de operaciones elementales, siendo $m \times m$ las dimensiones de la matriz real [42]. Sin embargo, éstos métodos directos pierden eficiencia en la medida en que las matrices son *esparsas* y su dimensión crece considerablemente. Es por esta razón que se hace indispensable buscar otros métodos que proporcionen una solución aceptable después de un número de operaciones mucho menor aplicada a matrices poco densas.

Estamos principalmente interesados en métodos que nos permitan partir de un vector inicial x_0 , construir una solución al sistema lineal, en una cierta cantidad de pasos o basados en una tolerancia predeterminada por nosotros. Los **Métodos Iterativos** presentan éstas características. Una vez damos una semilla x_0 nosotros la usaremos para calcular un nuevo vector x_1 , quien a su vez sera usado para generar un x_2 y así sucesivamente hasta conseguir nuestro objetivo. De ésta forma, nosotros generaremos una secuencia $\{x_k\}_0^n$ quien convergerá a la solución x a medida que $n \rightarrow \infty$, [65].

Debido a que n no puede crecer indefinidamente, el parámetro de parada generalmente estara determinado por que tan cercana esta nuestra solución x_n de la solución exacta x , quien sera representado por $|e_n|_2 = |x - x_n|_2$. Basado en éstos criterios, métodos como Jacobi, Gauss-Seidel, Gradientes Conjugados, Arnoldi, entre muchos otros, han sido desarrollados para dar solución a sistemas lineales al converger en un numero $O(m^2)$, sin embargo el que ha surgido como una gran herramienta en la solución de PVC especialmente al usar Elementos Finitos ha sido el método de **Gradiente Conjugado Precondicionado**, quien será nuestro punto de enfoque en las siguientes secciones ¹.

6.2. Método de Paso Descendente

Tanto el Método de Gradiente Conjugado así como su versión Precondicionada, son muy cercanos al método de Paso Descendente cuyo objetivo es el cálculo de una *dirección*, p_k y un tamaño de paso, α_k , en una forma iterativa de tal forma que en n pasos lleguemos a una solución x_n satisfactoria. Su punto de partida es considerar una matriz $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ simétrica definida positiva y un vector $b \in \mathbb{R}^m$, cuyo objetivo es minimizar el funcional

¹En los últimos años el uso de los preconditionadores junto con los métodos multigrad, han surgido como los principales herramientas para solución de sistema de gran porte y especialmente en aquellos problemas de contorno en 3D. [16]

$$J(\mathbf{y}) = \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathcal{A} \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{b} \quad (6.1)$$

de tal forma que el sistema $\mathcal{A}x = b$ posee una solución coincidente con el mínimo. De ésta forma establecemos el siguiente Teorema.

Teorema 6.2.1 Sea $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ definida positiva, con $b \in \mathbb{R}^m$ y $J(\mathbf{y})$ dada por la ecuación (6.1).

Existe un $x \in \mathbb{R}^m$ para quien

$$J(x) = \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} J(\mathbf{y}) \quad (6.2)$$

y quien corresponde a la solución del sistema $\mathcal{A}x = b$ [65].

De una forma implícita el Teorema 6.2.1 nos dice que al minimizar el funcional J estaremos minimizando el error e , de tal forma que

$$|e_n|_{\mathcal{A}}^2 = 2J(x_n) + c \quad , \quad (6.3)$$

siendo c una constante real y $|x|_{\mathcal{A}}^2 = x^T \mathcal{A}x$.

La forma de elegir la dirección p_k y el tamaño del paso α_k debe hacerse considerando que en cada iteración

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \quad , \quad (6.4)$$

$J(x_{k+1}) < J(x_k)$. Así, la mejor elección de p_k esta relacionada directamente con la dirección donde se presenta el mayor descenso del funcional cuadrático $J(\mathbf{y})$ quien puede ser tomada como

$$p_k = -\nabla J(x_k) \quad . \quad (6.5)$$

Ésta elección aunque natural, no es la mas eficiente dado que no se tiene en cuenta las direcciones anteriores, lo cual genera un tiempo de convergencia muy alto y es en éste punto donde el método

de Gradientes Conjugados toma diferencia del método de paso descendente. Una vez establecida la dirección de búsqueda, calcular el tamaño de paso α_k de tal forma que $J(x_{k+1}) \leq J(x_k)$ y ésto puede asegurarse en el momento en que $J(x_{k+1}) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} J(x_k + \alpha p_k)$, así establecemos el siguiente Teorema:

Teorema 6.2.2 Si $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ es obtenido sobre una línea de búsqueda exacta, es decir de forma que

$$J(x_{k+1}) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} J(x_k + \alpha p_k) \quad , \quad (6.6)$$

entonces

$$\alpha_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T \mathcal{A} p_k} \quad (6.7)$$

donde $r_k = b - \mathcal{A}x_k$ [65].

Una vez establecida la forma en que son calculados las direcciones y sus pasos, el método de paso descendente puede ser visto en una forma pictórica como se muestra en la figura 6.1. En ella, se muestra el proceder del método, aplicado a un sistema 2×2 . El funcional cuadrático $J(y)$ para una matriz de estas dimensiones, presenta como líneas de contorno elipses cuyos ejes mayores y menores están determinados por los autovalores de la matriz. El método comienza con un punto inicial x_0 el cual no es necesario establecer de antemano, por supuesto un punto cercano al mínimo generará un número menor de iteraciones, sin embargo esto no es totalmente indispensable. Una vez se tiene el punto inicial, es calculada la dirección p_0 quien corresponde a $-\nabla J(x_0) = b - \mathcal{A}x_0$ y su respectivo paso α_0 por medio de la ecuación (6.7). De forma iterativa son calculados los puntos posteriores x_k con $k = 1, 2, 3, 4, 5$.

La relación entre los ejes de las elipses nos da cuenta de la excentricidad de ésta, quien para el caso de una matriz simétrica definida positiva está vinculada con el número de condición $\mathcal{N}(\mathcal{A})$ [61].

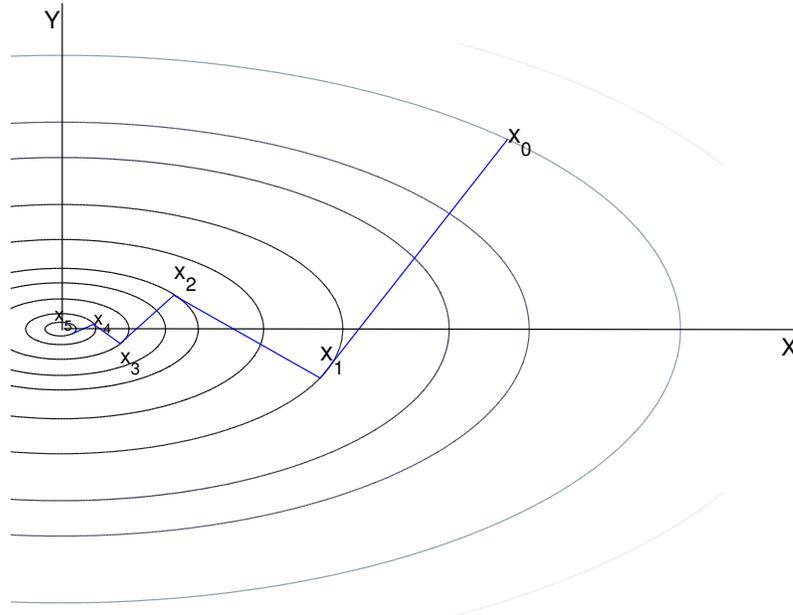


Figura 6.1: Método de Paso Descendente, matriz 2×2

6.3. Método de Gradiente Conjugado

El método de gradientes conjugados (MGC) fue desarrollado en 1952 por *Hestenes y Stiefel* quienes junto con *Reid* en 1971 al proveer un método simple de preconditionamiento potencializo la la eficiencia del método en solución de sistemas de ecuaciones [61]. La gran ventaja del método de gradiente conjugado y especialmente el preconditionado es su velocidad de convergencia en problemas de gran tamaño, quienes han surgido en soluciones de problemas de valor de contorno de segundo orden [44].

La idea básica del MGC es asegurarse que un conjunto de direcciones sucesivas no sean paralelas, de tal forma que despues de n -iteraciones se posea un conjunto de direcciones p_0, p_1, \dots, p_{n-1} \mathcal{A} -conjugadas, tal que la solución deseada x_n de un sistema $\mathcal{A}x = b$, puede ser escrita como

$$x_n = \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k p_k \quad (6.8)$$

En principio el objetivo del MGC no difiere mucho del método de pasos descendentes (**MPD**), sin embargo haciendo un análisis un poco mas detallado de MPD, el error $e_{k+1} = x - x_{k+1}$ despues de $(k + 1)$ -pasos es

$$e_{k+1} = e_k - \alpha_k p_k \quad (6.9)$$

$$= e_0 - (\alpha_0 p_0 + \alpha_1 p_1 + \dots + \alpha_k p_k) \quad (6.10)$$

Bajo esta ecuación lo deseable seria escoger los valores de α_k , de tal forma que se minimice el error $|e_{k+1}|_{\mathcal{A}}$ de tal forma que usando el teorema 6.3.1

Teorema 6.3.1 (Proyección). *Sea $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ una matriz definida positiva, sea $x \in \mathbb{R}^m$, y un subespacio \mathcal{P} de \mathbb{R}^m . Existe entonces un único $x_n \in \mathcal{P}$ tal que*

$$|x - x_n|_{\mathcal{A}} = \min_{\tilde{x} \in \mathcal{P}} |x - \tilde{x}|_{\mathcal{A}}. \quad (6.11)$$

El vector x_n esta caracterizado por la condicion $(x - x_n)^T \mathcal{A} \tilde{x} = 0$ para todo $\tilde{x} \in \mathcal{P}$.

podemos establecer la siguiente proposición :

Proposición 6.3.1 *Sea $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ obtenida a partir de la busqueda de una linea exacta (ver ecuación (6.6)). Entonces $r_{k+1}^T p_k = 0$ y $e_{k+1}^T \mathcal{A} p_k = 0$.*

Entonces a partir de la proposición 6.3.1, despues de un primer paso e_1 sera \mathcal{A} -conjugado con respecto a p_0 . Lo que realmente proponen el MGC diferente al MPD es que los errores relacionados a cada una de las iteraciones, sean \mathcal{A} -ortogonales a p_0 . Por lo tanto los errores poseen una relación de recurrencia dada por

$$e_{k+1} = e_k - \alpha_k p_k. \quad (6.12)$$

Para ésto, si las direcciones p_k son conjugadas con respecto a sus pares anteriores obtendremos que los errores son a su vez conjugadas a dichas direcciones.

Desde un punto de vista de las relaciones de ortogonales los α_k son descritos como por la ecuación (6.7) así, cuando los vectores p_k son \mathcal{A} -conjugados, los coeficientes α_k pueden ser calculados a partir del vector b [14].

Si adoptamos un vector $x_0 \in \mathbb{R}^n$, la mejor forma de calcular una expansión de la solución aproximada x_n , es minimizar el residuo $b - \mathcal{A}x_n$ en términos de las direcciones conjugadas corregidas a partir del gradiente $\nabla J(x_k)$.

De éste modo el algoritmo presentado por *Hestenes* y *Stiefel* en búsqueda de la solución del sistema (\mathcal{A}, b) , es:

Algoritmo 6.1: Algoritmo Método de Gradiente [65].

Input: Sistema (\mathcal{A}, b) , x_0 , $p_0 = r_0 = b - \mathcal{A}x_0$.

```

1
2 while  $\alpha_n \neq 0$  do
3    $\alpha_n = \frac{r_{n-1}^T r_{n-1}}{p_{n-1}^T \mathcal{A} p_{n-1}}$ 
4    $x_n = x_{n-1} + \alpha_n p_{n-1}$ 
5    $r_n = r_{n-1} - \alpha_n \mathcal{A} p_{n-1}$ 
6    $\beta_n = \frac{r_n^T r_n}{r_{n-1}^T r_{n-1}}$ 
7    $p_n = r_n + \beta_n p_{n-1}$ 
8 return  $x_n$ 

```

En el algoritmo método de gradientes conjugados (ver algoritmo 6.1), las direcciones $p_0, p_1, p_2, \dots, p_{n-1}$ no son seleccionadas en el avance, pero son calculadas desde los gradientes g_k por medio de un término corrector. Mientras $\alpha_k \neq 0$ el MGC, presenta las siguientes características.

1. $p_{k-1} \neq 0$,

2.

$$\mathcal{P}_k := \text{span}[p_0, \mathcal{A}p_0, \mathcal{A}^2p_0, \dots, \mathcal{A}^{k-1}p_0] \quad (6.13)$$

$$= \text{span}[p_0, p_1, \dots, p_{k-1}] \quad (6.14)$$

3. Los vectores $p_0, p_1, p_2, \dots, p_{k-1}$ son *conjugados* por pares.

4.

$$J(x_k) = \min_{z \in \mathcal{P}_k} J(x_0 + z). \quad (6.15)$$

6.4. Método de Gradiente Conjugado Precondicionado

En las anteriores secciones se presentaron o enunciaron diferentes métodos iterativos utilizados en la solución de sistemas lineales: nos concentramos principalmente en los métodos de pasos descendentes y en una forma mas específica en el Método de Gradiente Conjugado (**MGC**). La habilidad de MGC de converger a una solución, depende en gran medida de la distribución de los valores de los autovalores de la matriz \mathcal{A} quienes en la figura 6.1, estan representados por los semiejes de las elípses proyectadas en el plano que componen.

A menudo, la modificación del sistema lineal original puede reducir el número de condición de la matriz que describe el sistema y elevar la razón de convergencia del método iterativo usado.

En una forma general, la matriz global final puede ser dividida (*splitting*) en la forma

$$\mathcal{A} = \mathcal{M} - \mathcal{N} \quad (6.16)$$

donde \mathcal{M} representa una matriz no singular de forma tal que, la distribución de los autovalores de la matriz $\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}$ permite que la aplicación de un método iterativo converja en un número de iteraciones menor. Por ésta razón, la matriz \mathcal{M} es denominada *precondicionador* [4]. Por razones

prácticas, la matriz \mathcal{B} debe tener una distribución que permita la solución de un sistema lineal con un costo computacional menor que el de la matriz \mathcal{A} , sumando a esto que el espectro de $\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}$ debe ser mucho más denso y cercano a 1 que el expuesto por \mathcal{A} .

Sin embargo, estas características de la matriz \mathcal{M} presentan conflictos. La forma más eficiente de construir \mathcal{M} es considerarla como la matriz unitaria \mathcal{U} , pero el espectro de $\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}$ es inalterado. Por otro lado \mathcal{M} puede ser tomado como la misma matriz \mathcal{A} , pero en este caso, el costo computacional de construir \mathcal{M}^{-1} es demasiado elevado a pesar que su espectro es el ideal del que se está procurando.

La elección de la matriz \mathcal{M} no solamente puede estar influenciada por la reducción del número de condición de la matriz que involucra el sistema lineal final a solucionar. Considerando que la matriz \mathcal{A} global presenta características de simetría y positividad, el producto $\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A}$ puede dar lugar a una matriz con ausencia total de estas propiedades fundamentales, limitando considerablemente los procesos iterativos disponibles en la solución del sistema, es decir, el Método de Gradiente Conjugado no podría ser aplicado al sistema equivalente. Para sortear dicho inconveniente, nosotros podemos resolver un sistema diferente pero equivalente quien dará lugar al **Método de Gradiente Conjugado Precondicionado** (MGCP).

Consideremos el sistema lineal expuesto en la ecuación 5.19 y una matriz \mathcal{B} simétrica definida positiva de forma tal que

$$(\mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}\mathcal{B}^{-1})(\mathcal{B}\mathbf{x}_e) = \mathcal{B}^{-1}\mathbf{b} \quad (6.17)$$

en una forma reducida

$$\tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}} \quad (6.18)$$

donde $\tilde{\mathbf{x}} = \mathcal{B}\mathbf{x}_e$, $\tilde{\mathbf{b}} = \mathcal{B}^{-1}\mathbf{b}$ y la matriz $\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}\mathcal{B}^{-1}$ es a su vez simétrica definida positiva [49]. Este nuevo sistema equivalente, sigue manteniendo las características fundamentales del

sistema original y permite el uso del **MGC**. Si aplicamos el algoritmo 6.1 al sistema equivalente y obtenemos $\tilde{\mathbf{x}}_k$, $\tilde{\mathbf{p}}_k$, $\tilde{\mathbf{r}}_k$ y $\tilde{\mathbf{w}}_k = \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathbf{p}}_k$, nosotros podemos definir los siguientes cambio de variable

$$\mathcal{M} = \mathcal{G}^2 \quad , \quad (6.19)$$

$$\mathbf{p}_k = \mathcal{G}^{-1}\tilde{\mathbf{p}}_k \quad , \quad (6.20)$$

$$\mathbf{x}_k = \mathcal{G}^{-1}\tilde{\mathbf{x}}_k \quad , \quad (6.21)$$

$$\mathbf{z}_k = \mathcal{G}^{-1}\tilde{\mathbf{r}}_k \quad , \quad (6.22)$$

$$\mathbf{r}_k = \mathcal{G}\tilde{\mathbf{r}}^k = \mathbf{b} - \mathcal{A}\mathbf{x}_k \quad , \quad (6.23)$$

el algoritmo 6.2 describe el método de gradientes conjugados preconditionado.

Algoritmo 6.2: Algoritmo Método de Gradiente Conjugado Precondicionado [39],[49].

Input: Sistema $(\mathcal{A}, \mathbf{b})$, x_0 , \mathcal{M}, τ .

```

1
2  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathcal{A}\mathbf{x}_0$ 
3 Resolver  $\mathcal{M}\mathbf{z}_0 = \mathbf{r}_0$  para  $\mathbf{z}_0$ 
4  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0$ 
5 for  $k = 1, 2, \dots$  do
6      $\mathbf{w}_{k-1} = \mathcal{A}\mathbf{p}_{k-1}$ 
7      $\alpha_{k-1} = \frac{\mathbf{r}_{k-1}^T \mathbf{r}_{k-1}}{\mathbf{p}_{k-1}^T \mathbf{w}_{k-1}}$ 
8      $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_{k-1} \mathbf{p}_{k-1}$ 
9      $\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_{k-1} - \alpha_{k-1} \mathbf{w}_{k-1}$ 
10    Si  $\|\mathbf{r}_k\|_2 \leq \tau$  parar y retornar  $\mathbf{x}_n$  si no ,
11    Resolver  $\mathcal{M}\mathbf{z}_k = \mathbf{r}_k$  para  $\mathbf{z}_k$ 
12     $\beta_{k-1} = \frac{\mathbf{z}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{r}_{k-1}^T \mathbf{r}_{k-1}}$ 
13     $\mathbf{p}_k = \mathbf{z}_k + \beta_{k-1} \mathbf{p}_{k-1}$ 
14 return  $\mathbf{x}_k$ 
    
```

Es importante notar que en las líneas 3 y 11 se hace presente el sistema $\mathcal{M}\mathbf{z}_k = \mathbf{r}_k$ quien debe ser resuelto para \mathbf{z}_k en cada iteración, de tal modo que éste debe ser económico de resolver en terminos de número de operaciones fundamentales, para que el **MGCP** presente un mejor

comportamiento que el expuesto por **MGC**.

6.5. Precondicionadores

Existen diversos precondicionadores que han sido estudiados en la solución de sistemas lineales generados a partir de la discretización de los métodos *espectral/hp*. De hecho se pueden encontrar en la literatura [7], formas de construir el precondicionador \mathcal{G} a partir del operador $a(\cdot, \cdot)$ desarrollado en problemas de contorno elípticos en dos dimensiones. Así mismo, existen otras metodologías como las usadas por los *Métodos Multigrid Precondicionados* que han dado grandes aportes en la reducción del número de iteraciones, del orden de $\mathcal{O}(N)$, siendo N el número de grados de libertad [16], [37],[14].

Sin embargo, nos concentraremos en las metodologías clásicas en la construcción de precondicionadores: *Precondicionador de Jacobi*, *Precondicionador SSOR*, *Precondicionador ILU* y *Discretización de Bajo Orden*.

6.5.1. Precondicionador Jacobi.

Uno de los más importantes y conocidos precondicionadores es el Escalamiento Diagonal o también llamado Precondicionador de Jacobi:

$$\mathcal{M} = \text{diag}(\mathcal{A}) \tag{6.24}$$

quien provee una matriz no singular y en especial una matriz definida positiva si \mathcal{A} lo es, [61]. A pesar que su aplicación es fácil, desafortunadamente no es un poderoso precondicionador, de hecho si este precondicionador es aplicado al método de paso descendente, el precondicionador de Jacobi, no acelera la convergencia del método.

6.5.2. Precondicionador SSOR.

Un simple pero efectivo preconditionador puede ser obtenido a partir del Método de Gauss-Seidel.

Dada una matriz simétrica \mathcal{M} , ésta puede ser descompuesta en la forma

$$\mathcal{A} = D - L - L^T \quad (6.25)$$

donde L representa una matriz triangular inferior y D es una matriz diagonal. Gracias a ésta forma el preconditionador \mathcal{M} puede ser escrito como:

$$\mathcal{M} = \frac{\omega}{2 - \omega} \left(\frac{1}{\omega} D - L \right) D^{-1} \left(\frac{1}{\omega} D - L^T \right) \quad (6.26)$$

donde $\omega \in [0,2]$ es conocido como el parámetro de sobre-relajación [4]. La experiencia muestra que la calidad del preconditionador no es muy sensible a la elección del parametro ω , mas sin embargo, no es necesariamente el mejor preconditionador al ser usado en problemas de PVC.

6.5.3. Precondicionador ASSOR

El preconditionador *SSOR* es frecuentemente usado dado a su facilidad de construcción sin embargo el cálculo de su inversa representa un reto superior. Para dar solución a esto, al preconditionador *SSOR* se construye una aproximación al seleccionar su diagonal principal [67], de forma que

$$\mathcal{M} = \text{diag} \left\{ \frac{\omega}{2 - \omega} \left(\frac{1}{\omega} D - L \right) D^{-1} \left(\frac{1}{\omega} D - L^T \right) \right\} \quad (6.27)$$

Ésta aproximación del preconditionador *SSOR* permite invertir el preconditionador rapidamente y un control sobre el mismo.

6.5.4. Precondicionador ILU.

Uno de los más populares precondicionadores son los así llamados *Incomplete LU* o (**ILU**), quienes son basados en una descomposición LU incompleta. La idea detrás de éste precondicionador es calcular una matriz triangular inferior \mathcal{G} , con la propiedad que \mathcal{G} tiene una estructura esparsa algunas veces *cercana* al factor G -Cholesky de la matriz \mathcal{A} . Para matrices simétricas del tipo que aparecen en el método de elementos finitos, la descomposición ILU es equivalente a una descomposición de Cholesky $\mathcal{A} \approx \mathcal{G}^T \mathcal{G}$ [12].

Éste precondicionador incompleto de Cholesky es construido usando las fórmulas clásicas del método de Cholesky pero, las únicas posiciones en la matriz \mathcal{A} que reciben una modificación, son aquellas en las cuales la entrada original es diferente de cero. De ésta forma, la construcción de dicho precondicionador se muestra en el algoritmo 6.3.

Algoritmo 6.3: Algoritmo Precondicionador ILU [4].

Input: Matriz \mathcal{A}

```

1
2 for  $i = 2 : N$  do
3
4   for  $k = 1 : i - 1$  do
5
6     if  $\mathcal{A}_{i,k} \neq 0$  &  $\mathcal{A}_{k,k} \neq 0$  then
7
8        $\mathcal{A}_{i,k} = \mathcal{A}_{i,k} / \mathcal{A}_{k,k}$ 
9
10      for  $j = k+1 : m$  do
11
12        if  $\mathcal{A}_{i,j} \neq 0$  then
13
14           $\mathcal{A}_{i,j} = \mathcal{A}_{i,j} - \mathcal{A}_{i,k} \times \mathcal{A}_{k,j}$ 
15
16 return  $\mathcal{A}$ 

```

Hay que resaltar que el algoritmo 6.3 construye la descomposición incompleta de Cholesky de la matriz \mathcal{A} cuyo factor \mathcal{G} se encuentra almacenado en la misma matriz, como una metodología

necesaria en el ahorro de memoria y optimización del procedimiento. Es decir

$$\mathcal{G} = \text{TrianInf}\{\mathcal{A}\} \quad (6.28)$$

después de ser aplicado el algoritmo de factorización incompleto o preconditionador ILU es evaluado usando \mathcal{G} , $\mathcal{M} = \mathcal{G}^2$.

Capítulo 7

Resultados Numéricos Problemas de Contorno con Frontera Discontinua

7.1. Introducción

Para observar la versatilidad del Método de Elementos Finitos al usar como funciones base Polinómios ortogonales de grado superior, en los siguientes secciones obtendremos soluciones aproximadas de problemas de contorno con frontera discontinuas. El primer problema que vamos a estudiar tiene por objetivo principal dar como muestra los resultados obtenidos a partir de la elección de diferentes bases polinomiales en la solución de un problema de transferencia de calor en ausencia de fuentes y conductividad térmica constante en un placa rectangular de dimensión $L = 1$, quien en una de sus aristas posee una temperatura $T = 1,0$ y en el resto es cero. Éste problema, posee una solución aproximada usando el método de Fourier para problemas de contorno y nos dara una estimación de que tan proxima se encuentra la solución aportada por el método numérico con respecto a una estimación inicial. En ésta primera parte daremos una estimación del error entre la solución de Fourier y **MEFOS**, asi como la distribución polinomial que el sistema adquiere al final de siete (7) pasos de refinamiento. Así mismo, se presenta el

comportamiento del Número de Condición $\mathcal{N}(\hat{\mathcal{A}})$ como función de los grados de libertad externos al igual que su dependencia con el grado máximo polinomial.

En un segundo problema se retoma un problema de transferencia de calor, modificando considerablemente las condiciones de contorno. La idea principal de éste nuevo problema es mostrar el comportamiento de los cuatro preconditionadores en la solución de un sistema lineal, generado a partir del *MEFOS*.

Finalmente en un tercer problema, corresponde a un problema de contorno dispuesto de tal forma que presenta la solución numérica presenta una discontinuidad cerca de una de las fronteras del dominio $\bar{\Omega}$. El objetivo de dicho problema es visualizar el comportamiento del refinamiento polinomial, al presentar un problema de contorno con una solución discontinua.

7.2. Polinómios Ortogonales

Nuestro primer problema es descrito como :

$$-\alpha\Delta u + \lambda u = 0 \quad , \quad (x,y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1) \quad (7.1)$$

con $\alpha, \lambda = 1$ y

$$u(x,y) \Big|_{\partial\Omega} = \begin{cases} 1 & \text{si } x = 0, y \in [0,1] \quad , \\ 0 & \text{si } x = 1, y \in [0,1] \quad , \\ 0 & \text{si } y = 0, x \in [0,1] \quad , \\ 0 & \text{si } y = 1, x \in [0,1] \quad . \end{cases} \quad (7.2)$$

Éste problema representa un problema de contorno con condiciones de frontera de primer tipo cuyo operador diferencial describe una ecuación de Helmholtz [48] y cuya solución correspondiente al usar la representación en funciones de Green es :

$$u(x, y) = \int_0^1 \left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} G(x, y, \epsilon, \eta) \right] \Big|_{\epsilon=0} d\eta, \quad (7.3)$$

donde $G(x, y, \epsilon, \eta)$ corresponde a :

$$G(x, y, \epsilon, \eta) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(p_n x) \sin(p_n \epsilon)}{\beta_n \sinh(\beta_n)} H_n(y, \eta) \quad (7.4)$$

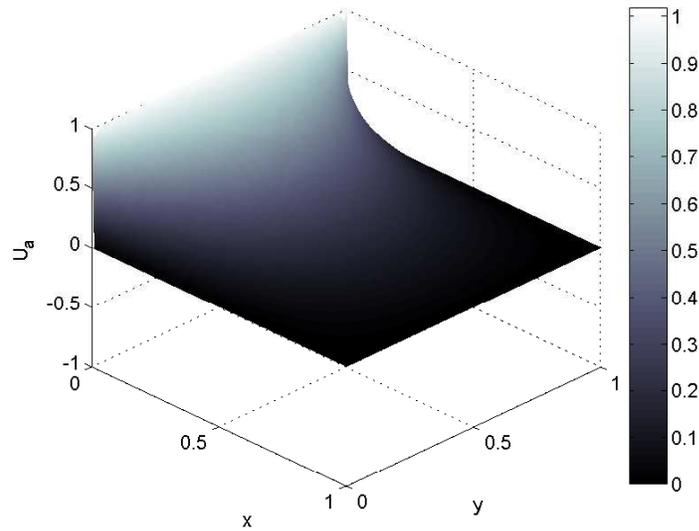
con

$$p_n = \pi n, \quad \beta_n = \sqrt{p_n^2 - \lambda}, \quad (7.5)$$

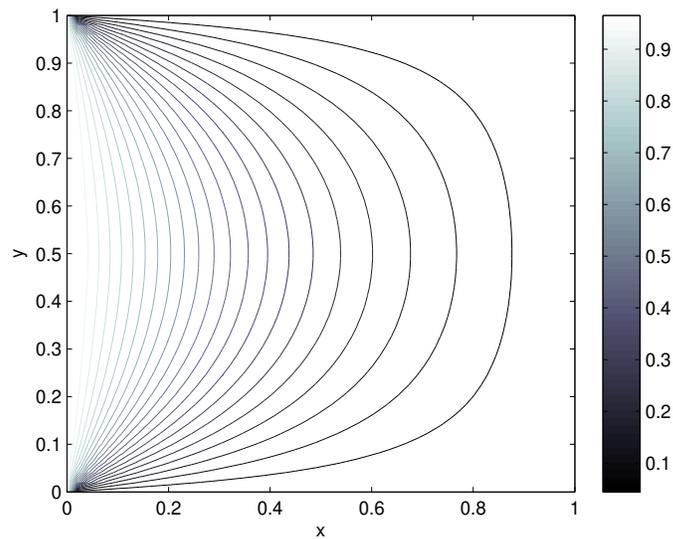
$$H_n(y, \eta) = \begin{cases} \sinh(\beta_n \eta) \sinh[\beta_n(1 - y)], & \text{para } 1 \geq y > \eta \geq 0, \\ \sinh(\beta_n y) \sinh[\beta_n(1 - \eta)], & \text{para } 1 \geq \eta > y \geq 0, \end{cases} \quad (7.6)$$

La solución analítica del primer problema esta expresada en función de una sumatoria infinita de terminos generados en la función de Green, G . Dado a ésto, computacionalmente no es posible dar una solución completamente analítica y por tanto estamos obligados a dar un corte a ésta sumatoria, lo cual genera una solución aproximada u_a . Considerando los primeros cien (100) terminos de la serie, la solución aproximada desarrollada a partir de la solución analítica, se encuentra expuesto en la figura 7.1.

El problema de contorno, presenta dos puntos de discontinuidad en los puntos (0,0) y (0,1). Ésto nos permite poner a prueba no solamente la conformidad de la solución obtenida numéricamente, la cual debe ser satisfecha independientemente del problema de contorno, si no, especialmente la adaptatividad del método. Aplicando el algoritmo 5.9 expuesto en el capítulo 5, para una malla compuesta por $N = 361$ elementos rectangulares, los resultados obtenidos para cada uno de las posibles elecciones de función base presentes en la tabla 2.1, se muestran en las figuras 7.2, 7.3 y 7.4. El número de elementos N que se ha elegido es elegido teniendo en consideración el refinamiento polinomial. A medida que es aumentado N la estabilidad del refinamiento polinomial



a. Solución Analítica $u_a(x,y)$ del problema de contorno (7.1),(7.2), obtenidas a partir de la ecuación (7.3).



b. Líneas de contorno de la solución analítica $u_a(x,y)$.

Figura 7.1: Resultado Analítico problema de contorno (7.1)-(7.2) según la ecuación (7.3).

se ve cuestionada, principalmente por el método de solución del sistema global $(\mathcal{A}, \mathbf{b})$ (que en éste caso es **MGC**), no permite un análisis detallado del comportamiento de la elección de las bases polinomiales.

El refinamiento- p que ha dado lugar a la distribución polinomial final en cada uno de los casos elegidos de las funciones ψ , es seguido según el criterio expuesto en (5.22). Se ha tomado un máximo de siete (7) pasos de refinamiento, quien proporciona un grado polinomial máximo de siete para cada elemento geométrico de la malla uniforme. Como caso inicial de prueba y identificación de posibles problemas de implementación, en éste primer caso consideramos como método de solución **Gradientes Conjugados (MGC)** sin preconditionamiento.

La primera columna de las figura 7.2 nos proporciona una visión global del resultado de la solución numérica quien para cuatro tipo de funciones base ψ es muy similar. Para ver que tan cercano nos encontramos de la solución analítica y las diferencias que se plantean el uso de diferentes funciones base, en la segunda columna mostramos los resultados del cálculo de los errores **a posteriori** (ver apéndice C) presentes en cada uno de los elementos geométricos que componen la malla geométrica.

El cálculo del error e_a (ver figuras 7.2,7.3) nos da una previsión de la localización de las discontinuidades en la frontera. En principio, los elementos que se encuentran cercanos a los puntos (0,0) y (0,1) muestran un error superior a aquellos elementos internos del dominio o en aquellos que comparten una sección de frontera continua. Con un orden cercano a 10^{-7} , la solución numérica u obtenida por medio del *MEFOS* es una buena aproximación a la solución analítica u_a generada a partir de la ecuación (7.3).

En la tercera columna de las figuras 7.2 y 7.3, presentamos la distribución polinomial sobre los elementos geométricos. Dado a que el problema es simétrico con respecto al eje y , la distribución polinomial debería presentar dicho comportamiento en especial un mayor grado en aquellos elementos que comparten las discontinuidades.

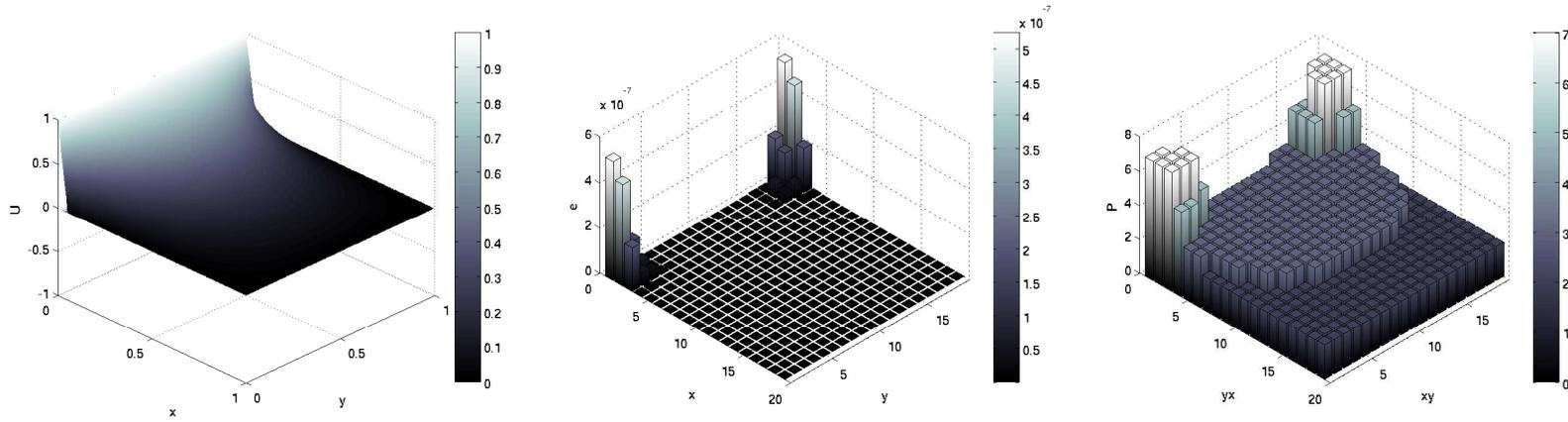
Aunque el error de u_e y el grado P^k de cada uno de los elementos, puede ser un primer indicativo de que tan cercana es la solución numérica, nuestro análisis esta concentrado principalmente en las consecuencias de elegir una u otra familia de funciones jerárquicas. Según [10] dos de los criterios que se deben tener en cuenta en la elección apropiada de una base jerárquica son: el

comportamiento del número de condición de la matriz de masa local y el número de iteraciones necesarias para determinar el vector solución u al usar el método de gradientes conjugados.

Dado que el estudio realizado por [10] pretendía dar una primer modelo del comportamiento de algunas bases jerárquicas al ser usadas en elementos de orden superior, el número de condición de una matriz local de masa generada a partir de dichas funciones base fue tomado como parámetro de estudio, sin embargo debido a que nuestro problema de valor de contorno no solamente involucra terminos de primer orden si no tambien de segundo orden y siendo que cada elemento adquiere de forma *independiente* su grado polinomial, consideraremos como factor relevante, el número de condición de la matriz $\hat{\mathcal{A}}$ producto del método de condensación estática sobre el sistema $\mathcal{A}\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$ original (ver la sección 5.8) y el número de iteraciones necesarias por el método de gradientes conjugados para llegar a una solución aproximada satisfactoria en la solución del sistema 5.19.

Así, la conducta que toma el número de condición de la matriz $\hat{\mathcal{A}}$ con respecto al numero de grados de libertad del sistema, como función del grado maximo polinomial, asi como el número de iteraciones del MGC, se muestran en la figura 7.4 a., b. y c., respectivamente.

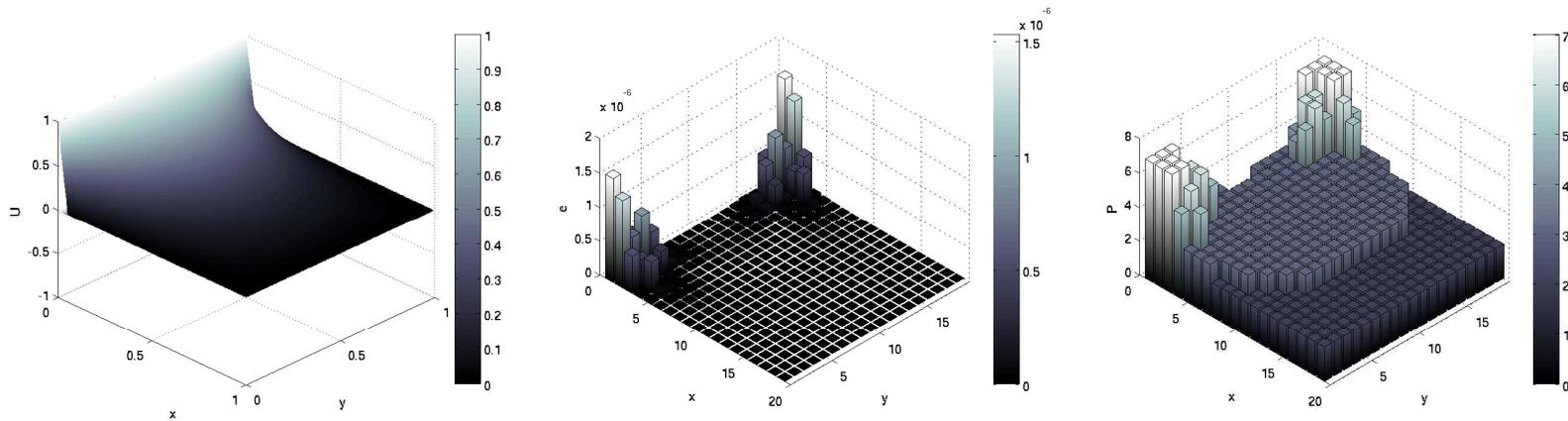
En la figura 7.4.a. el número de condición de la matriz $\hat{\mathcal{A}}$ es estudiado como función del número de grados de libertad presentes en la discretización del sistema físico. Debido al modo adaptativo de nuestro abordage, el número de grados de libertad varia dependiendo de la elección de función base. Los polínomios de *Legendre* asi como los polinomios de *Lobatto*, presentan un número de condición con muy poca variación en la medida que aumenta los grados de libertad, de hecho durante el transcurso de las pruebas, los polinomios de *Lobatto* llegaron a tener una coincidencia exacta en el número de condición en cada una de las iteraciones como se muestra en 7.4 b..



a.1. Solución u , ψ -Legendre.

a.2. Error $e = |u_a - u|$, ψ -Legendre.

a.3. Distribución P , ψ -Legendre.

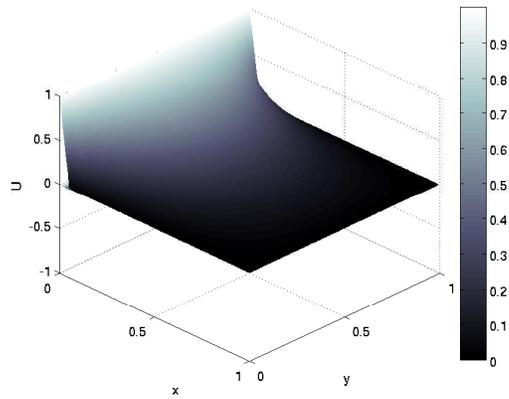


b.1. Solución u , ψ -Lobatto.

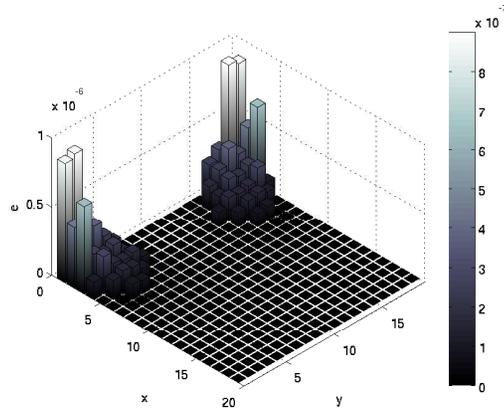
b.2. Error $e = |u_a - u|$, ψ -Lobatto.

b.3. Distribución P , ψ -Lobatto.

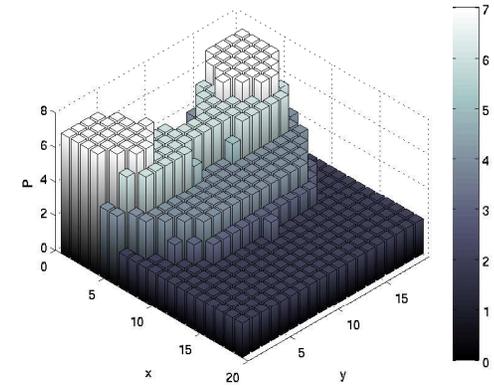
Figura 7.2: Resultados Obtenidos en la solución del problema de contorno (7.1)-(7.2) al elegir las funciones ψ , Legendre y Lobatto, según la Tabla 2.1. Grados de Libertad \mathcal{D}_f , dados por (3.27), son: 3390 y 3534, respectivamente.



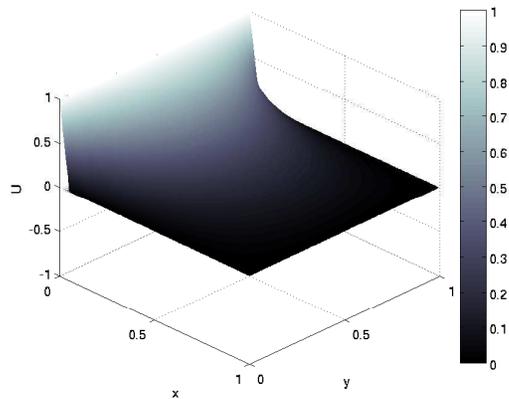
c.1. Solución u , ψ -Chebyshev.



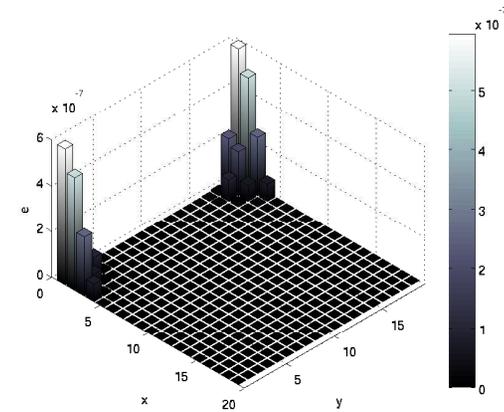
c.2. Error $e = |u_a - u|$, ψ -Chebyshev.



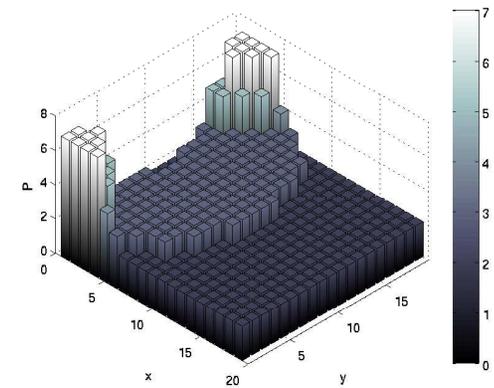
c.3. Distribución P , ψ -Chebyshev.



d.1. Solución u , ψ -Jacobi.



d.2. Error $e = |u_a - u|$, ψ -Jacobi.



d.3. Distribución P , ψ -Jacobi.

Figura 7.3: Resultados Obtenidos en la solución del problema de contorno (7.1)-(7.2) al elegir las funciones ψ , **Chebyshev** y **Jacobi**, según la Tabla 2.1. Grados de Libertad \mathcal{D}_f dados por (3.27), son: 6281 y 3146, respectivamente.

Contrario al comportamiento de *Legendre* y *Lobatto*, los polinomios *Ultraesféricos* y de *Chebyshev*, muestran un crecimiento considerable no solamente en el número de grados de libertad necesarios para adquirir unos resultados similares a los int-*Legendre* [57], si no un crecimiento cercano a lo exponencial del número de condición $N(\hat{\mathcal{A}})$. Del mismo modo este comportamiento se ve en una forma mas clara en la figura 7.4 b., donde observamos detalladamente el crecimiento que experimenta $N(\hat{\mathcal{A}})$ cuando son elegidos como base los polinómios de *Chebyshev*.

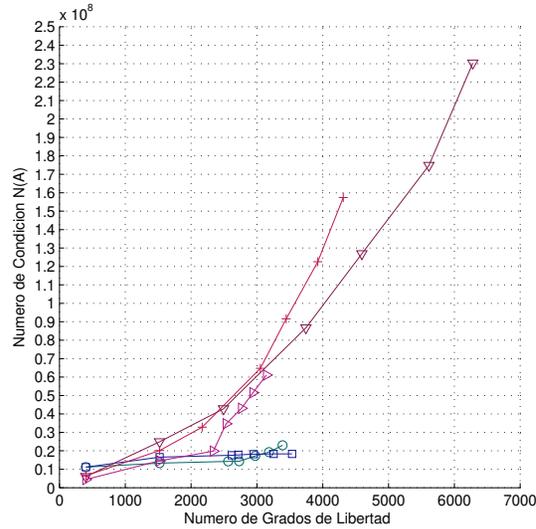
Al elegir los polinómios de *Jacobi*, $N(\hat{\mathcal{A}})$ parece presentar un comportamiento intermedio entre el expuesto por los polinomios de *Gegenbauer* y los de *Legendre*, asi como el crecimiento de grados de libertad no es tan radical como el expuesto por los polinomios de *Chebyshev* y es muy similar a los de *Lobatto*.

Despues de estudiar el comportamiento que presenta $N(\hat{\mathcal{A}})$ como función tanto del grado polinomial asi como del número de grados de libertad, concentramos nuestra atención cuando éste es presentado en función del número de iteraciones del **MGC**, presentado en la figura 7.4 c.. Ninguno de las elecciones posibles de funciones base, excede el intervalo [36,55] en número de iteraciones **MGC**, con lo cual parece un comportamiento estable debido a la corta longitud del intervalo, considerando las dimensiones de las matrices $\hat{\mathcal{A}}$ del orden de 6000×6000 en el caso *Chebyshev*.

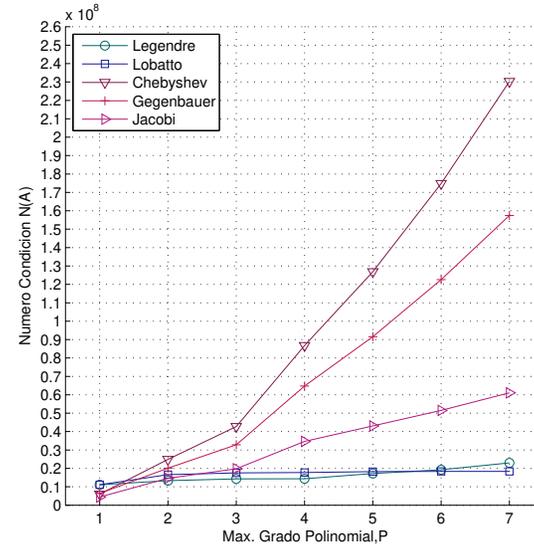
Finalmente, la figura 7.4 d. nos provee un dato fundamental en el análisis numérico correspondiente a la razón de convergencia de un método. En nuestro caso hemos tomado este parámetro de convergencia, como el error existente entre dos iteraciones consecutivas del algoritmo. *Legendre*, *Chebyshev*, *Gegenbauer* y *Jacobi* parecen tener un decaimiento muy cercano entre ellas, bastante alejado de lo mostrado por *Lobatto* aunque este siga siendo decadente. Es importante notar, que no en toda iteracion el error entre iteraciones es menor que la anterior, presentando un comportamiento oscilatorio con un cierto amortiguamiento a medida que aumenta el número de iteraciones.

Despues de éste análisis de la elección de funciones base jerárquicas, compensar entre la *adapta-*

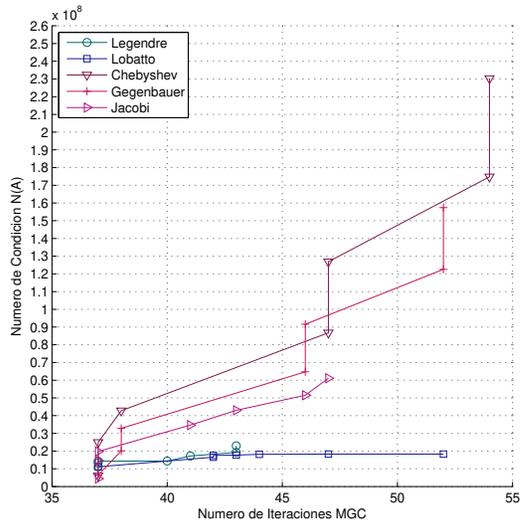
tibilidad en el refinamiento- p , número de condición de la matriz $\tilde{\mathcal{A}}$ y el número de iteraciones en MGC consideramos que la mejor elección de función base para el problema de contorno (7.1)-(7.2) son, los polinomios de Legendre y como segunda opción los polinómios Jacobi, con $\alpha = 1,0$ y $\beta = 1,0$.



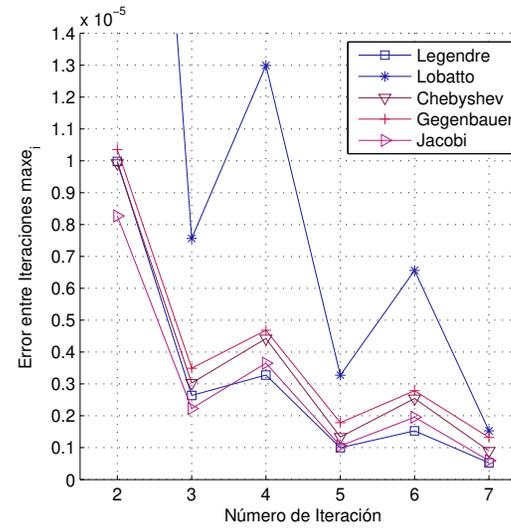
a. Número de Condición $\mathcal{N}(\hat{\mathcal{A}})$ como función de Número de Grados de Libertad.



b. Número de Condición $\mathcal{N}(\hat{\mathcal{A}})$ como función Grado Máximo Polinomial.



c. Número de Condición $\mathcal{N}(\hat{\mathcal{A}})$ como función del Número de Iteraciones MGC.



d. Error entre Iteraciones como función del Número de Iteraciones MGC

Figura 7.4: Comportamiento Número de Condición $\mathcal{N}(\hat{\mathcal{A}})$ como función del Número de Grados de Libertad Total, Grado Maximo Polinomial y Número de Iteraciones MGC. Problema (7.1)-(7.2).

7.3. Elección de Precondicionadores

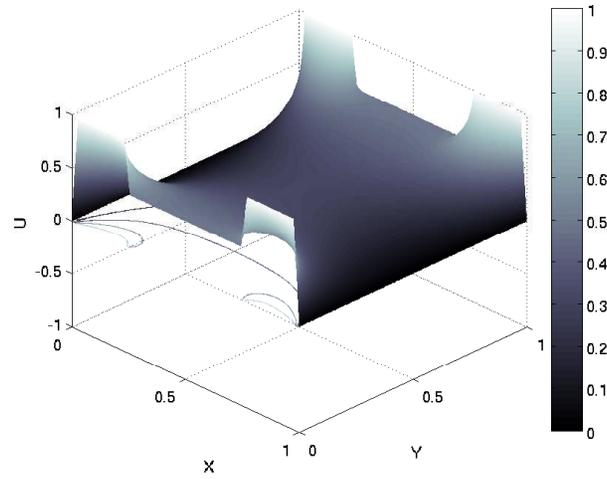
Nuestro segundo problema pretende dar un paso adelante en el análisis de como afecta la elección de un preconditionador específico al solucionar un PVC con frontera discontinua. Para eso planteamos el siguiente PVC. Determinir la funcion u , tal que:

$$-\Delta u + \lambda u = 0 \quad , \quad (x,y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1) \quad (7.7)$$

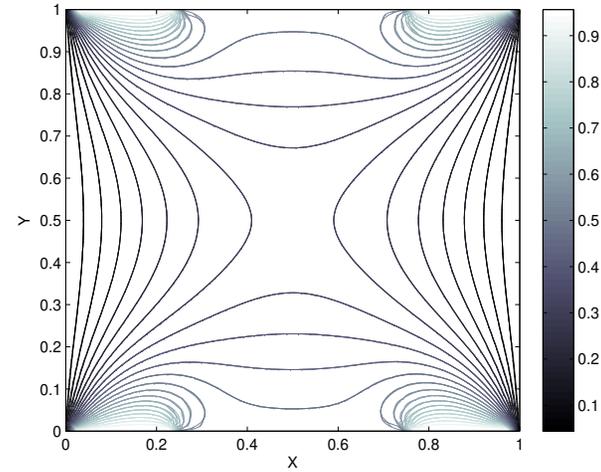
con $\lambda = 1$ y

$$u(x,y) \Big|_{\partial\Omega} = \frac{1}{2} \begin{cases} 0 & \text{si } x = 0, y \in [0,1] \quad , \\ 0 & \text{si } x = 1, y \in [0,1] \quad , \\ \mathcal{H}(x + \frac{3}{4}) - \mathcal{H}(x - \frac{1}{4}) + \mathcal{H}(x - \frac{3}{4}) & \text{si } y = 0, x \in [0,1] \quad , \\ \mathcal{H}(x + \frac{3}{4}) - \mathcal{H}(x - \frac{1}{4}) + \mathcal{H}(x - \frac{3}{4}) & \text{si } y = 1, x \in [0,1] \quad . \end{cases} \quad (7.8)$$

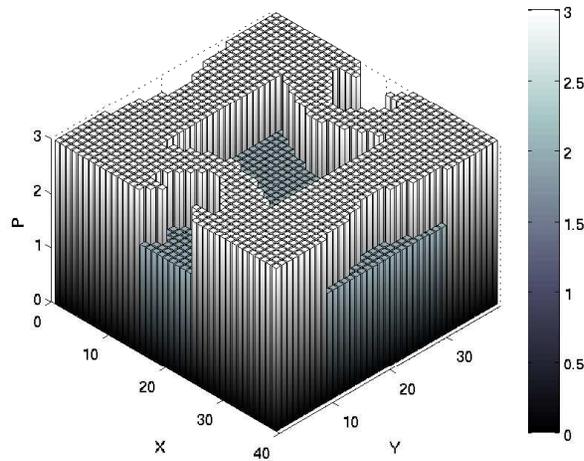
donde la función $\mathcal{H}(x)$ representa la función de Heaviside o tambien llamada Función Escalon. Éste problema al igual que el primero posee una solución analítica quien es obtenida en forma detallada en [48]. Sin embargo, a pesar de tener una solución analítica general para un problema PVC en un dominio rectangular, como es el que se encuentra presente en nuestro estudio, llegar a una representación gráfica de dicha solución por el momento no fue del todo satisfactoria, principalmente por el hecho de estar involucrada la evaluación de integrales cuyo integrando son funciones de Green expresadas en terminos de una serie. De ésta forma, la obtención numérica de la solución aproximada resulto ser mucho mas económica y eficiente que la evaluación de la solución provista por Polyanin. Una vez aclarado éste punto, una primera visualización de la solución obtenida, es presentada en la figura 7.5 y los resultados obtenidos en diferentes preconditionadores es presentada en la tabla 7.1.



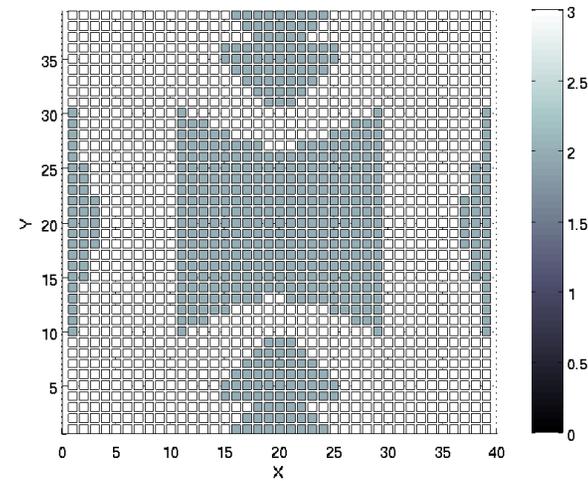
a. Solución $u(x,y)$ del problema de contorno (7.7)-(7.8)



b. Líneas de contorno de la solución $u(x,y)$, segundo problema.



c. Distribución polinomial generada después de seis (6) pasos de refinamiento.



d. Vista superior distribución polinomial sobre cada elemento geométrico.

Figura 7.5: Solución numérica obtenida del problema de contorno (7.7)-(7.8) usando el algoritmo 5.9. Solución final obtenida después de tres (3) pasos de refinamiento polinomial, sobre una malla $\mathcal{T}_{h,p}$ compuesta de 1521 elementos geométricos. Número de grados de libertad finales es 11191. Grado máximo polinomial es igual a 3.

Precondicionador	Max.-p	Error Max. (e)	$N(\hat{\mathcal{H}})$	\mathcal{D}_f	Iteraciones
Sin	1	$0,000 \cdot 10^{-00}$	$5,657 \cdot 10^{02}$	1600	60
	2	$1,362 \cdot 10^{-05}$	$1,146 \cdot 10^{03}$	6241	98
	3	$2,938 \cdot 10^{-06}$	$1,261 \cdot 10^{03}$	11191	109
Tiempo Computo: 478,03s.					
Jacobi	1	$0,000 \cdot 10^{-00}$	$5,657 \cdot 10^{02}$	1600	60
	2	$1,362 \cdot 10^{-05}$	$1,146 \cdot 10^{03}$	6241	94
	3	$2,938 \cdot 10^{-06}$	$1,261 \cdot 10^{03}$	11191	106
Tiempo Computo: 479,63s.					
SSOR	1	$0,000 \cdot 10^{-00}$	$5,657 \cdot 10^{02}$	1600	74
	2	$1,362 \cdot 10^{-05}$	$1,146 \cdot 10^{03}$	6241	80
	3	$2,938 \cdot 10^{-06}$	$1,261 \cdot 10^{03}$	11191	81
Tiempo Computo: 640,66s.					
ASSOR	1	$0,000 \cdot 10^{-00}$	$5,657 \cdot 10^{02}$	1600	83
	2	$1,362 \cdot 10^{-05}$	$1,146 \cdot 10^{03}$	6241	106
	3	$2,938 \cdot 10^{-06}$	$1,261 \cdot 10^{03}$	11191	115
Tiempo Computo: 474,15s.					
ILU	1	$0,000 \cdot 10^{-00}$	$5,657 \cdot 10^{02}$	1600	36
	2	$1,362 \cdot 10^{-05}$	$1,146 \cdot 10^{03}$	6241	39
	3	$2,938 \cdot 10^{-06}$	$1,261 \cdot 10^{03}$	11191	40
Tiempo Computo: 3303,87s.					

Cuadro 7.1: Resultados numéricos obtenidos del problema (7.7)-(7.8) usando MEFOS considerando diferentes precondicionadores en el Método de Gradiente Conjugado Precondicionado.

La solución de la figura 7.5 corresponde a la obtenida al elegir las polinomios de Legendre, bajo

una malla de 1521 elementos rectangulares con un orden polinomial no superior a 3. Dado a las diferencias casi imperceptibles entre las soluciones obtenidas a partir de diversos preconditionadores, nos hemos permitido mostrar solamente una de ellas, usando el preconditionador de *Jacobi*.

Las variables que vamos a considerar en nuestro análisis serán: el número de condición de la matriz $\tilde{\mathcal{A}}$, quien es denotado por $\mathcal{N}(\tilde{\mathcal{A}})$, el error entre soluciones obtenidas en diferentes pasos de refinamiento, \mathbf{e}_k , el número de grados de libertad del sistema, \mathcal{D}_f , el número de iteraciones empleadas por el *MGCP* y finalmente el tiempo de computo ¹.

Nuestro algoritmo muestra ser consistente con respecto a la elección de diferentes preconditionadores, ya que la solución final debe ser invariante con respecto a la elección del método de solución del sistema lineal final. Al considerar los grados de libertad (\mathcal{D}_f) despues de tres (3) pasos de refinamiento polinomial, en la tabla 7.1, encontramos una coincidencia exacta en los cuatro casos. El número de pasos de refinamiento fue limitado a tres, principalmente a la inestabilidad presentada por el Método de Gradiente Conjugado en sistema de mayor tamaño, y dado el hecho que el objetivo de éste problema no era mostrar la adaptabilidad del algoritmo, tomamos pertinente considerar los resultados con un grado maximo polinomial igual a tres.

Como parámetro de observación consideraremos el error relativo entre iteraciones, dado por :

$$\Delta \mathbf{x}_k = \frac{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}|_2}{|\mathbf{x}_k|_2}. \quad (7.9)$$

Su comportamiento con respecto al número de iteraciones tomadas por *MGCP* para alcanzar un error relativo $\Delta \mathbf{x}_k < 10^{-11}$, se encuentran representadas en la figura 7.6. La primera elección de preconditionador en obtener un error relativo $\Delta \mathbf{x}_k$ menora a la tolerancia especificada, corresponde al preconditionador *ILU* con 40 iteraciones, seguido por *SSOR* con 81, al optar por

¹El **Tiempo de Computo** que es considerado en éste análisis, no es el tiempo real utilizado por la maquina para dar una solución a nuestro problema. El parámetro que denominaremos como tiempo de computo es el aportado por **Matlab**© el cual involucra el tiempo de maquina y el tiempo utilizado por el software comercial para compilar nuestro algoritmo, al lenguaje de maquina.

un factor $\omega = 0,725$ como mejor resultado y, finalmente, los preconditionadores de *Jacobi* y *ASSOR* se encuentran muy cercanos al comportamiento expuesto por el método de gradientes sin preconditionamiento quien esta por el orden de las 109 iteraciones.

Al evaluar los resultados expuestos en la figura 7.6, la mejor elección dada al menor número de pasos de convergencia del *MGCP* parece ser *ILU*, sin embargo, éste resultado se ve opacado por su tiempo de computo, 3303,87s, quien representa aproximadamente siete (7) veces el tiempo de computo tomado por el *MGC* sin preconditionamiento alguno. Aunque el preconditionador cumple su función de disminuir el número de iteraciones del *MGC* el costo que representa el cálculo de \mathcal{G} por medio del algoritmo 6.3 y especialmente su inversa \mathcal{G}^{-1} hace de su uso poco recomendable.

La siguiente elección como preconditionador supone *SSOR*. Aunque representa una aumento cercano a un 33,9% en tiempo de computo con respecto al método sin preconditionamiento, su costo es menor comparado al *ILU*, dado al hecho que el cálculo de su inversa \mathcal{G}^{-1} involucra la inversa de la matriz diagonal D y una matriz triangular inferior L , cuyas inversas involucran un número menor de operaciones fundamentales. El objetivo de disminuir el número de iteraciones con respecto a *MGC* es cercano al 24%, lo cual en sistemas de gran tamaño es una mejora considerable.

Tanto los preconditionadores *Jacobi* y *ASSOR* se encuentran muy cercanos a los resultados obtenidos sin preconditionamiento, sin embargo, no es posible descartarlos de plano dado a que debido a las condiciones de problema, uno u otro preconditionador, puede cumplir su función de una mejor forma que otra.

Como resultados de apoyo a la figura 7.6, presentamos el comportamiento expuesto por el residuo $|b - \tilde{\mathcal{A}}\mathbf{x}|_2$ al elegir los preconditionadores expuestos en la sección 6.5, en la figura 7.7.

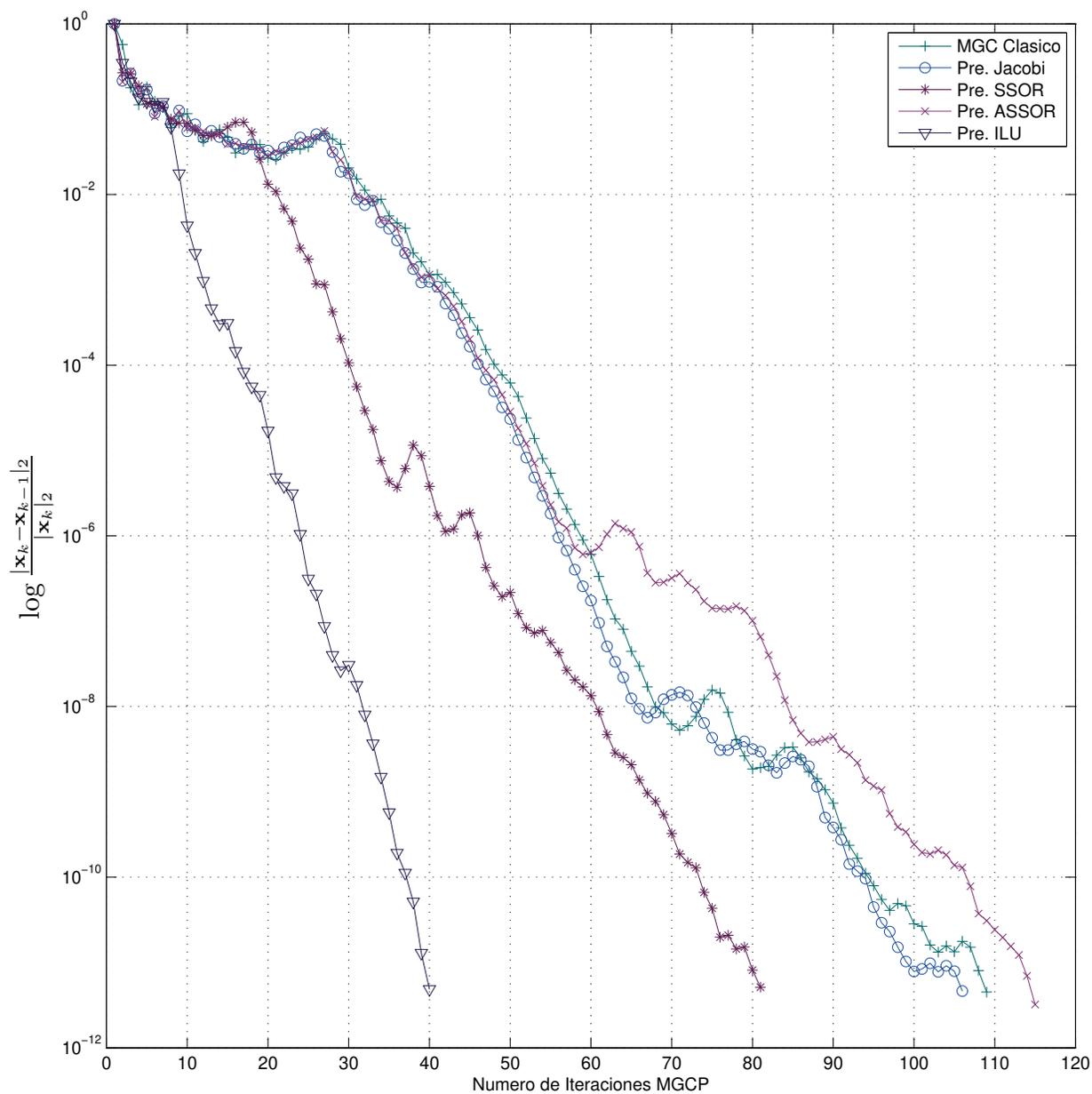


Figura 7.6: Estudio del término $\frac{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}|_2}{|\mathbf{x}_k|_2}$ como función del número de iteraciones al elegir diferentes Precondicionadores en la solución del problema expuesto en la ecuación (7.7)-(7.8), en el paso final de refinamiento- \mathbf{p} . Parámetros $\omega_{SSOR} = 0,725$ y $\omega_{ASSOR} = 0,5$.

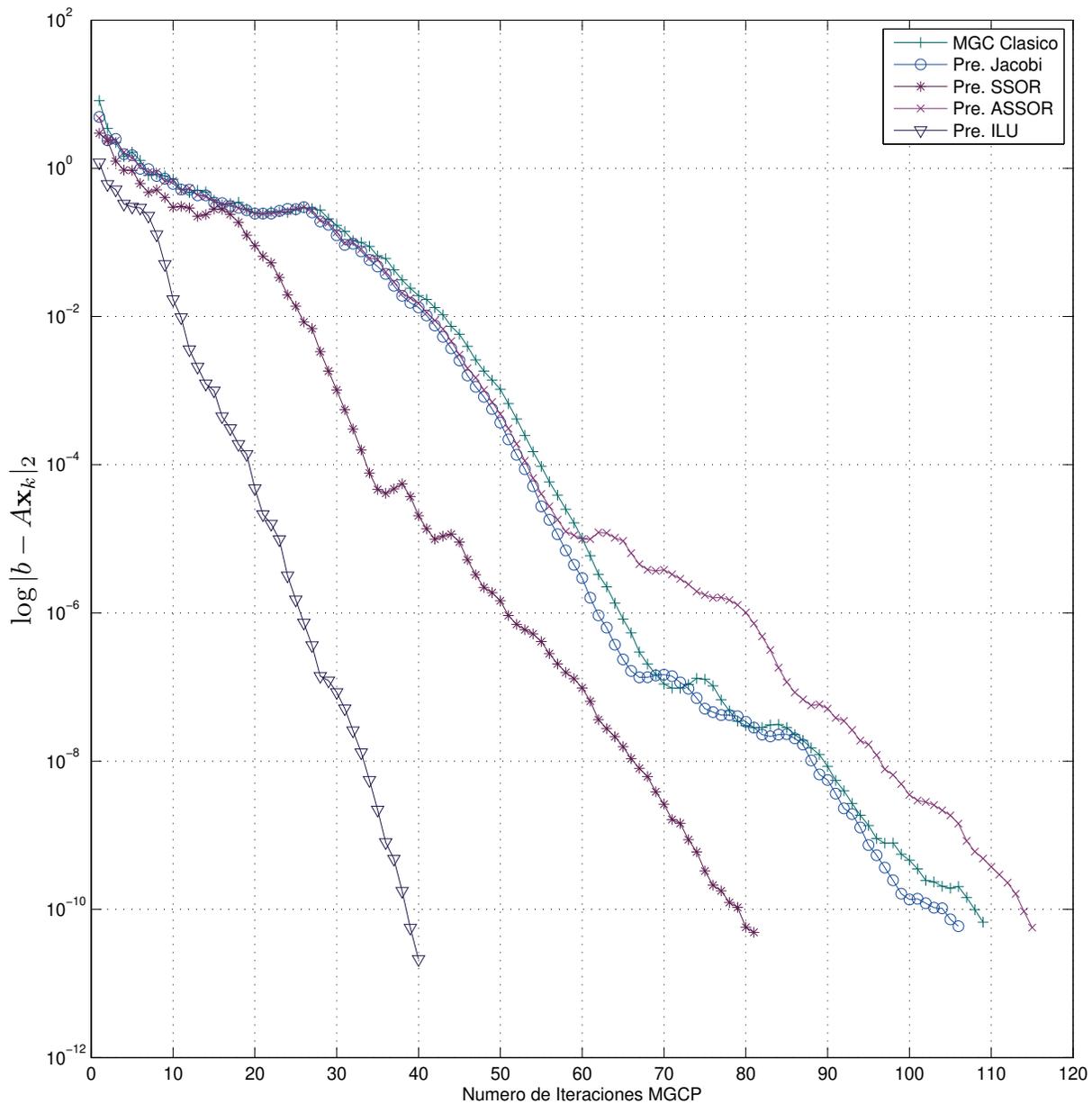


Figura 7.7: Estudio del termino $|b - \mathcal{A}x_k|_2$ como función del número de iteraciones del método de Gradiente Conjugado Precondicionado, al elegir diferentes Precondicionadores en la solución del problema expuesto en la ecuación (7.7)-(7.8), en el paso final de refinamiento- p . Parámetros $\omega_{SSOR} = 0,725$ y $\omega_{ASSOR} = 0,5$.

7.4. Capa Límite - *Boundary Layer*

Para concluir nuestro análisis del Método de Elementos Finitos de Orden Superior unido con un método espectral, daremos paso a un problema que comunmente es denominado como **Capa Límite** o **Boundary Layer** en ingles ². El problema de contorno es descrito como:

Determina la función $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathfrak{R}$, tal que

$$-\epsilon \Delta u + \lambda u = 1 \quad , \quad (x,y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1) \quad (7.10)$$

con $\epsilon = 10^{-3}, \lambda = 1$ y

$$u(x,y) \Big|_{\partial\Omega} = \begin{cases} 1 & \text{si } x = 0, y \in [0,1] \quad , \\ 0 & \text{si } x = 1, y \in [0,1] \quad , \\ \frac{\partial u}{\partial \bar{n}} = 0 & \text{si } y = 1, x \in [0,1] \quad , \\ \frac{\partial u}{\partial \bar{n}} = 0 & \text{si } y = 0, x \in [0,1] \quad . \end{cases} \quad (7.11)$$

Éste tipo de problemas tienen la capacidad de mostranos los pesos que tienen cada uno de los terminos de *Rigidez* y *Masa* en la ecuación diferencial (7.10) al elegir adecuadamente las constantes ϵ y λ . Debido a las condiciones de frontera naturales impuestas en las fronteras $y = 1, x \in [0,1]$ y $y = 0, x \in [0,1]$, la solución presentara un comportamiento dependiente únicamente de la variable x . Así, la solución analítica está dada como :

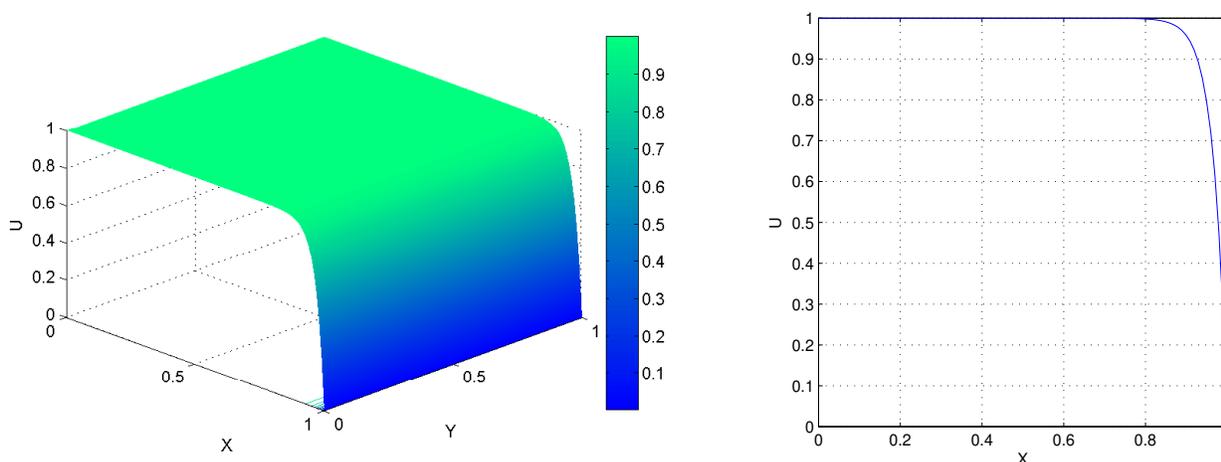
$$u_a(x,y) = \frac{-\exp\left[\frac{x-1}{\sqrt{\epsilon}}\right] + \exp\left[\frac{x+1}{\sqrt{\epsilon}}\right] - \exp\left[\frac{2}{\sqrt{\epsilon}}\right] + 1}{1 - \exp\left[\frac{2}{\sqrt{\epsilon}}\right]} \quad (7.12)$$

cuya representación se muestra en la figura 7.8.

Éste problema presenta un cambio abrupto en la cercanías de la frontera $x = 1, y \in [0,1]$ y en la

²Éste tipo de problemas se encuentra típicamente en Dinámica de Fluidos en especial en la interacción de fluidos con interfaces rígidas, en la cual se de cumplir la condición de *no deslizamiento*.

mayor parte del dominio $\bar{\Omega}$ presenta un comportamiento igual a uno.



a. Visualización solución analítica $u_a(x,y)$

b. Vista lateral solución analítica $u_a(x,y)$.

Figura 7.8: Vista lateral y solución analítica del problema (7.10)-(7.11) Boundary Layer con un decrecimiento abrupto de la solución cerca a la frontera $x = 1, y = [0,1]$, usando la ecuación (7.12).

Los resultados obtenidos numéricamente usando el algoritmo estudiado en la sección 5,9 se encuentran resumidos en la tabla 7.2: se muestra para cada uno de los 5 pasos de refinamiento polinomial, el comportamiento de los grados de libertad (\mathcal{D}_f) del sistema lineal final, el número de condición de la matriz $\tilde{\mathcal{A}}$, el número de iteraciones tomadas por MGCP para obtener una solución óptima.

Refinamiento-p	$\max_k \{ e_r^k \}$	$N(\tilde{\mathcal{A}})$	\mathcal{D}_f	MGCP
1	$0,000 \cdot 10^{-00}$	$4,403 \cdot 10^{03}$	3600	47
2	$4,852 \cdot 10^{-06}$	$6,312 \cdot 10^{03}$	14161	66
3	$1,871 \cdot 10^{-07}$	$7,976 \cdot 10^{03}$	20081	68
4	$5,227 \cdot 10^{-09}$	$8,064 \cdot 10^{03}$	24931	70
5	$6,450 \cdot 10^{-10}$	$1,158 \cdot 10^{04}$	28005	69

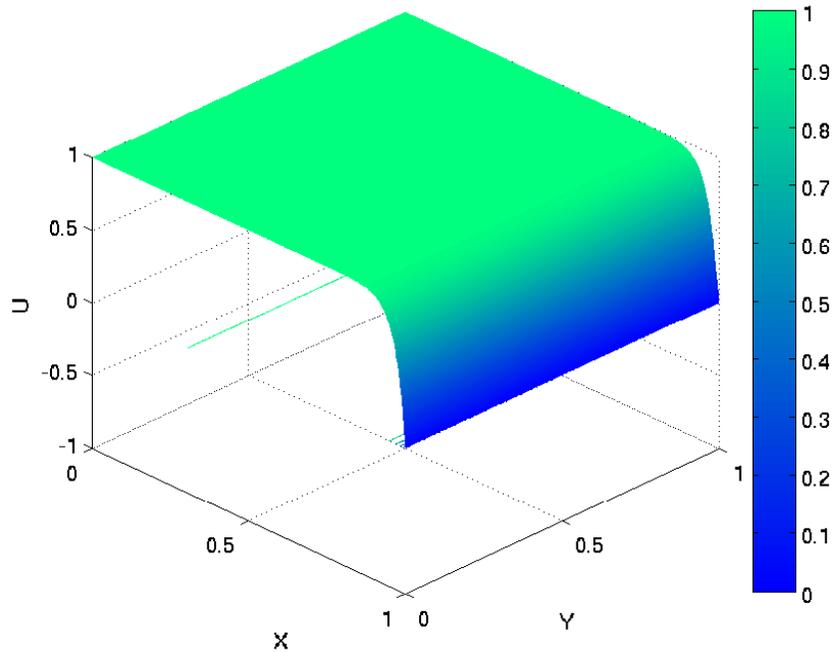
Cuadro 7.2: Resultados obtenidos para el problema (7.10) en el proceso de refinamiento tipo p , al usar como preconditionador ASSOR cuyo parámetro $\omega_{ASSOR} = 1,25$.

Como espacio de funciones base se ha tomado la base jerárquica construida a partir de los polinómios de *Legendre* y como preconditionador en la solución del sistema lineal, el preconditionador *ASSOR*, quien arrojó los mejores resultados con un parámetro $\omega_{ASSOR} = 1,25$. El número de grados de libertad finales es de 28005 cuya solución final se muestra en la figura (7.9). Como esperábamos, la solución numérica presenta un descenso importante en el último 10% del intervalo $[0,1]$ en el eje x .

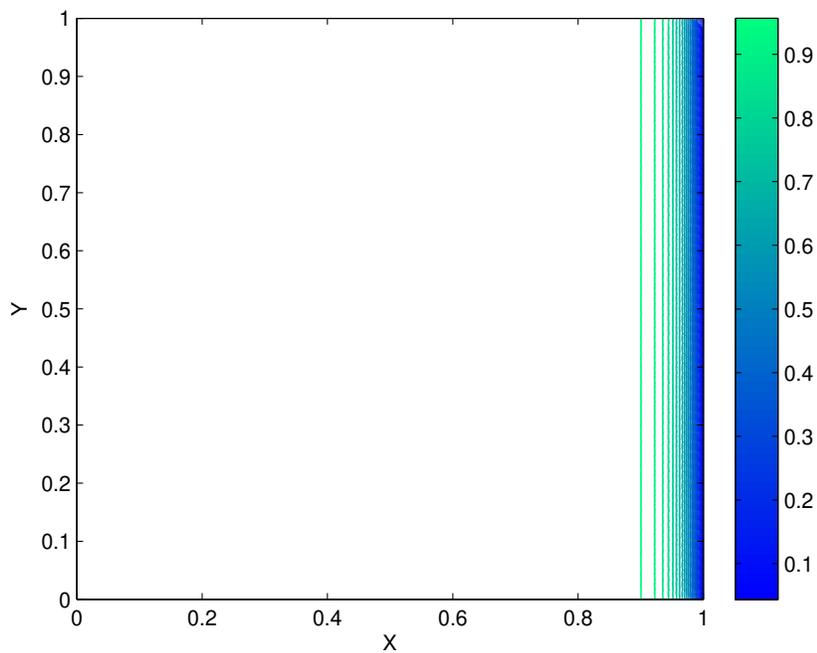
El error $e_a = |u - u_a|_2$ calculado para cada uno de los elementos geométricos, se representa en la figura 7.10. Es posible a partir de ésta figura evaluar un error no mayor $6,5 \cdot 10^{-10}$ quien a nuestra consideración representa una buena aproximación de la solución analítica. La distribución del error a lo largo del dominio $\bar{\Omega}$ nos muestra que los mayores errores se encuentran distribuidos en las fronteras cuyos condiciones de fronteras son esenciales, dado a que es necesario restringir la solución en estas fronteras.

En la figura 7.12 presentamos la distribución polinomial sobre el dominio $\bar{\Omega}$. El mayor grado polinomial alcanzado es igual a cinco (5), que se encuentra presente en los elementos geométricos que estan cerca a la frontera Γ_2 del dominio $\bar{\Omega}$. Como era de esperarse la distribución polinomial es simétrica con respecto al segmento de línea $y = 0,5$, dado a las condiciones de frontera naturales impuestas en los lados Γ_3 y Γ_4 . Asi mismo, en el interior del dominio, dado a que la solución tiende a ser constante, no es necesario un grado polinomial superior a dos (2) para alcanzar un error lo suficientemente bajo a 10^{-10} , de éste modo el refinamiento solamente ocurre en aquellos lugares donde se presente un mayor decaimiento de la solución numérica, es decir en la cercanía de las fronteras cuyas condiciones impuestas son Dirichlet.

El tiempo de computo tomado por nuestro algoritmo implementado en **Matlab**© para dar solución al problema de Capa Limite, fue de 3551,76s y dado al hecho que el número de pasos de refinamiento es igual a 5 y el número de de elementos fue 3481, consideramos que el tiempo no es demasiado elevado para realizar posibles estudios con geometrias mas complejas y ecuaciones diferenciales con un mayor grado de libertad.



a. Solución $u(x,y)$ del problema de contorno (7.10).



b. Líneas de contorno de la solución $u(x,y)$ del problema Boundary Layer.

Figura 7.9: Resultados obtenidos para el problema (7.10), con una malla uniforme sobre el dominio $\bar{\Omega} = [0,1] \times [0,1]$ compuesta de 3481 elementos geométricos. Constantes $\epsilon = 10^{-3}$ y $\lambda = 1,0$. Número de Grados de Libertad 28005.

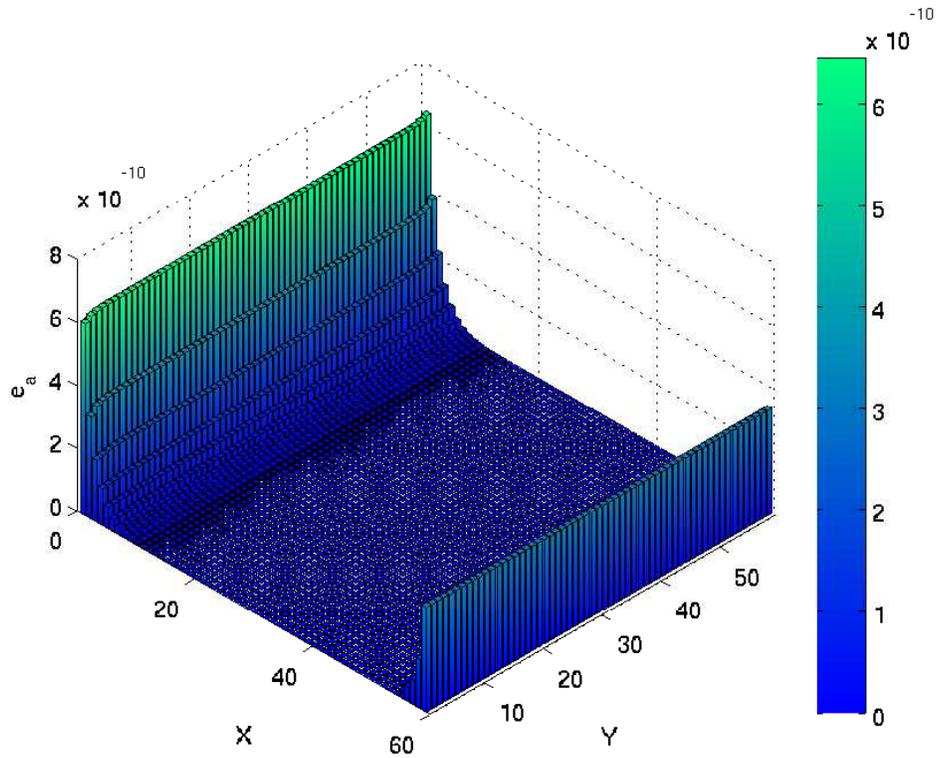


Figura 7.10: Error $|u - u_a|_2$ obtenido en cada elemento geométrico del problema de contorno (7.10).

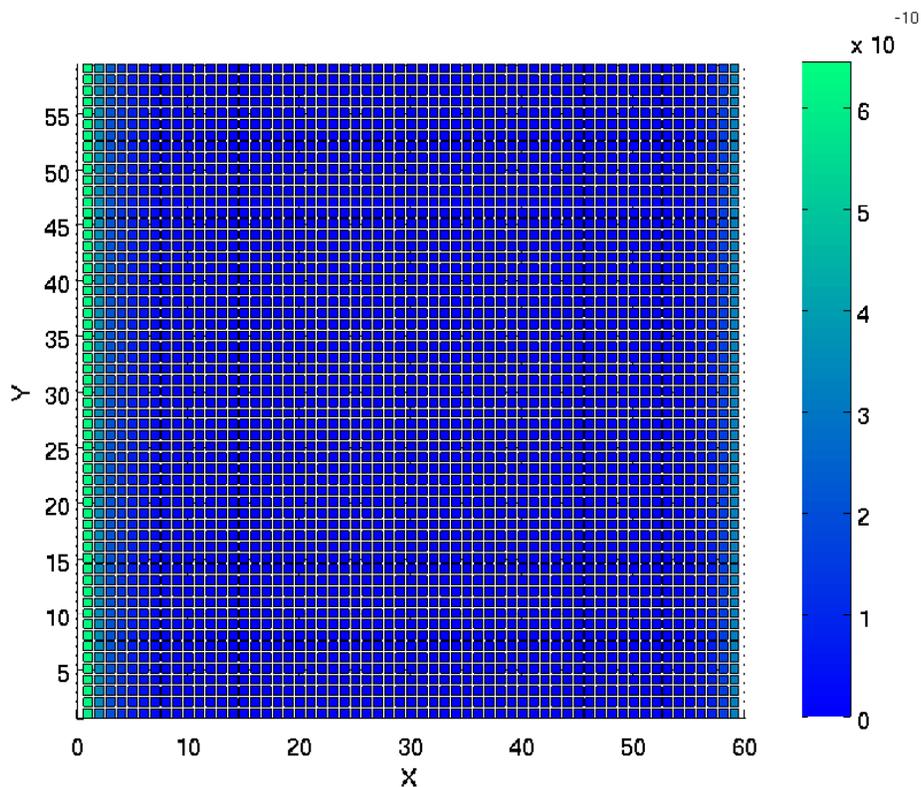


Figura 7.11: Vista superior de la distribución de errores sobre cada elemento geométrico dispuesto para el problema *Boundary Layer*.

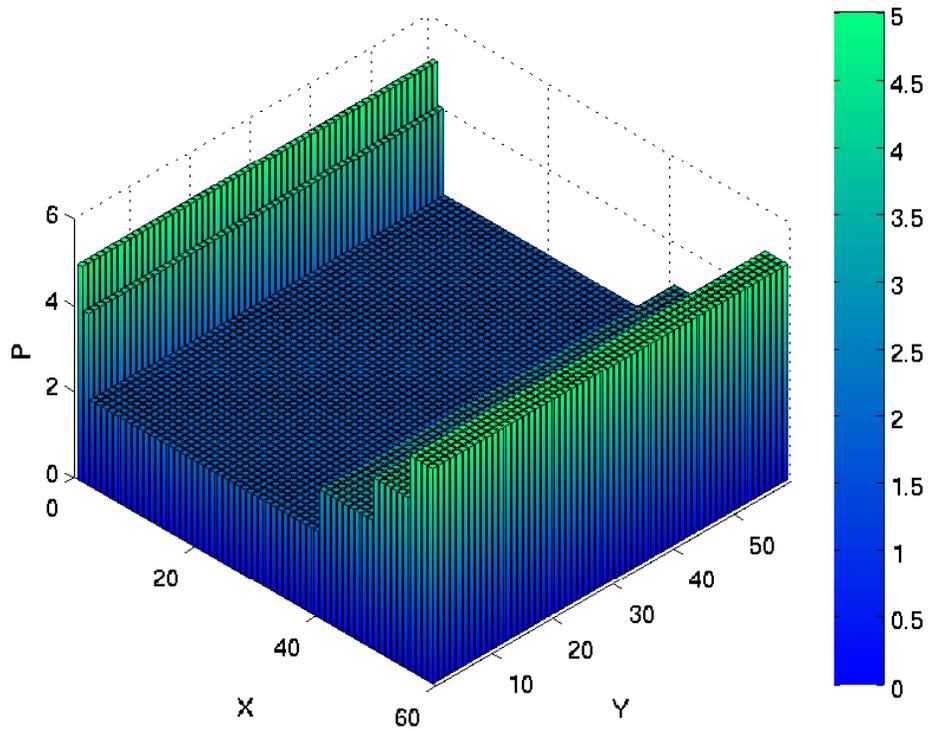


Figura 7.12: Distribución Polinomial obtenida despues de cinco (5) pasos de refinamiento-p. Problema de contorno (7.10).

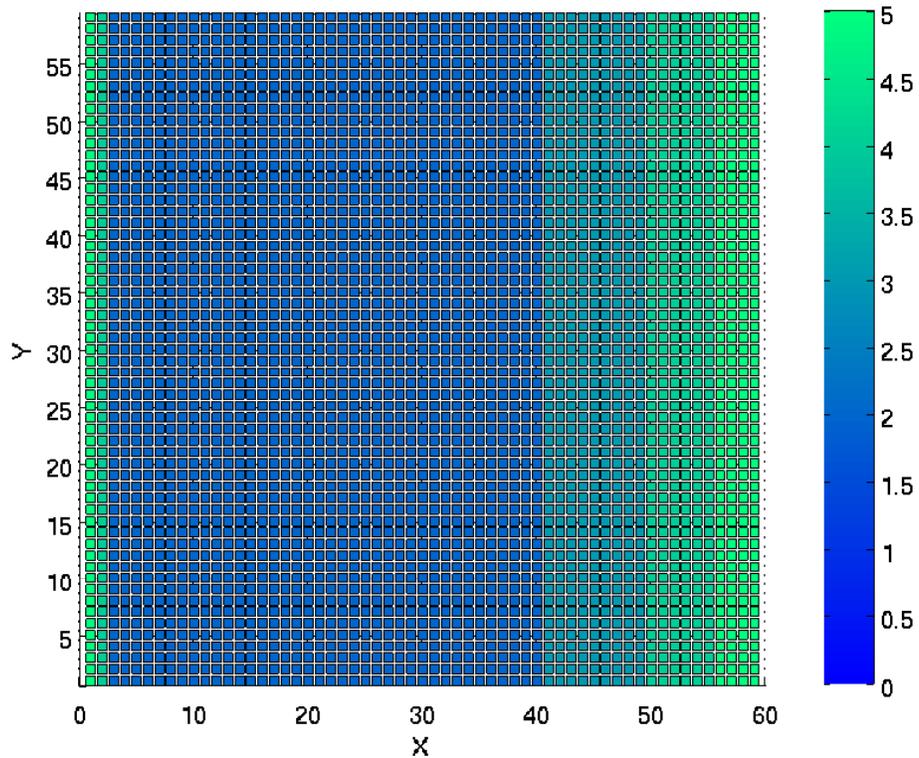


Figura 7.13: Vista superior distribución polinomial problema Boundary Layer.

Capítulo 8

Consideraciones Finales

8.1. Acerca del MEF-OS

Desarrollar el Método de Elementos Finitos de Orden Superior desde su formulación matemática, pasando por su construcción, ensamble e implementación final, nos proporcionó un entendimiento muy completo de como éste funciona y la capacidad que éste tiene al ser usando en la solución de problemas de contorno.

Pasamos por la formulación matemática en el capítulo 1, quien nos dio el entendimiento de como era posible plantear una solución debil para problemas de frontera, partiendo de la formulación de Galerkin llegando a obtener un problema discreto equivalente el cual podriamos plantear como un sistema lineal, el cual nos daría los coeficientes necesarios para representar adecuadamente nuestra propuesta de solución. En el capítulo introductorio nos concentramos en plantear la teoría para el MEFOS, sin restringir el estudio a bases polinomiales lineales, sino que consideremos una cierta “independencia” entre los elementos, de tal forma que podriamos asignarles una base polinomial de orden arbitrario.

En el capítulo 2, nos concentramos en estudiar de una forma adecuada cual era el tipo ideal de funciones polinomiales que se podriana adaptar a nuestro problema. En especial, concentramos

nuestros esfuerzos en las **Bases Jerárquicas**, quienes son definidas en función de un conjunto de familias polinomiales, ya sean a partir de los polinomios de **Jacobi**, **Chebyshev** entre otros. Expositos la mejor forma de construir el espacio de funciones jerárquicas e hicimos una selección entre funciones definidas en los vértices, aristas y en el interior de un elemento patrón, en el cual se efectuaban cada una de las operaciones de nuestro problema.

Una vez habíamos planteado la formulación matemática quien nos daba la serenidad de la existencia y unicidad de una solución a nuestro problema discreto, era hora de construir el problema a solucionar. La evaluación local de las matrices de **Rigidez** (\mathcal{R}^κ), **Masa** (\mathcal{M}^κ) y **Disipación** (\mathcal{D}^κ) para cada elemento geométrico κ que compone nuestra discretización $\mathcal{T}_{h,p}$, por medio de un subespacio de funciones base \mathcal{V}^r y usando una adecuada Cuadratura de Integración, fue uno de los avances importantes en el capítulo 3. Así mismo, la construcción del vector local de carga \mathbf{b}^κ , quien dara lugar al vector de carga global fue representada adecuadamente al final de dicho capítulo.

Con todos los argumentos locales evaluados, el ensamble del sistema global a solucionar era el siguiente paso. En el capítulo 5, el aspecto computacional fue considerado en plenitud: la forma en como son construidos los operadores de conectividad entre elementos geométricos teniendo en cuenta las reglas de Conformidad, quienes restringían nuestra solución aproximada a ser continua en las fronteras presentes entre los elementos $\kappa \in \mathcal{T}_{h,p}$, así como éstos a partir de las matrices y vectores locales daban forma a nuestro sistema general. Una vez establecido el sistema global, así como la inclusión de las condiciones de contorno del problema, el **Método de Condensación Estática** nos permitió representar la solución de nuestro problema discreto, como la solución de dos sistemas de orden menor, de tal forma que nos permitía reducir considerablemente el número de operaciones necesarias para dar solucionar el sistema lineal global.

A pesar que el método de condensación estática reducía la complejidad de calcular la solución al problema discreto, hicimos un estudio somero de cuales métodos podrían ser usados en la solución de los dos sistemas lineales menores. El método de paso descendiente, método de Gradiente

Conjugado y finalmente el Método de Gradiente Conjugado Precondicionado, nos llevaron a elegir a éste último como una de las mejores opciones para dar lugar a nuestra solución. Asimismo, consideramos los diferentes preconditionadores que podríamos elegir al usar em MGCP: el preconditionador de Jacobi, preconditionador SSOR y finalmente ILU fueron estudiados.

El camino en el cual se ha planteado el Método de Elementos Finitos de Orden Superior, nos permite hacer un refinamiento tipo \mathbf{p} en la solución de diversos problemas de contorno como los expuestos en el capítulo 7. No nos encontramos muy lejos de desarrollar un método **FEM- \mathbf{hp}** completo, de hecho hemos considerado como refinamiento tipo \mathbf{h} , el uso de mallas elípticas adaptativas las cuales fueron expuestas en el capítulo 4.

8.2. Acerca de Mallas Adaptativas

La forma en que el dominio físico $\bar{\Omega}$ es discretizado en un conjunto de elementos geométricos $\mathcal{T}_{h,p}$ es fundamental. Aunque la discretización del dominio de problemas de contorno, en las últimas décadas ha sido en gran medida efectuada por métodos tales como, **Avance Frontal**, **Método de Delaunay** o por subdivisión de Elementos, especialmente usados por su bajo costo computacional [40] para problemas de alta complejidad, en muchos casos los métodos diferenciales proveen una mejor aproximación del dominio $\bar{\Omega}$.

Es claro por supuesto que el costo computacional y especialmente el tiempo usado por el usuario para dar una calidad óptima a una malla final, puede llegar a ser superior que el usado en los métodos de mallas sin estructura, sin embargo, ésto puede proporcionar una mejor convergencia del problema de contorno. En el capítulo 4, proporcionamos las bases fundamentales de las mallas elípticas adaptativas quienes pueden ser expandidas en dominios mas complejos, aquellos que no sean simplemente conexos [32] o en algunos casos, extenderse hasta dominios en tres dimensiones.

Los parámetros de control suelen ser fundamentales en la generación de mallas elípticas ya que

nos permiten densificar las líneas de las mallas en ciertas zonas, es por eso que una adecuada elección de las funciones P y Q presentes en las ecuaciones 4,17 y 4,18 pueden dar a diversos comportamientos [32].

Con éstas consideraciones podemos dar paso a unas perspectivas futuras de nuestro trabajo.

8.3. Perspectivas Futuras

1. Unificación Lenguajes.

El desarrollo por separado de los dos tipos de refinamiento, tanto \mathbf{p} como \mathbf{h} , usando lenguajes de programación diferentes (**C++** y **Matlab**®), representa un reto de unificación, al momento de construir un software que tenga la capacidad de hacer los dos refinamientos simultáneamente. Así mismo usar **Matlab**® como plataforma de programación, limita considerablemente el rendimiento de los algoritmos que fueron implementados, aun así estos estuvieran en su forma optimizada. Es por ésta razón que consideramos implementar el algoritmo de MEF-OS, en el lenguaje de **C++**.

2. Problemas de Flujo.

El uso de mallas elípticas tiene una gran demanda en aquellos problemas en los cuales se involucra la dinámica de fluidos. Así mismo, la presencia de problemas de **Boundary Layer** hace necesario el uso de refinamientos de las base polinomiales en las cercanías de las fronteras en las cuales exista interacción entre el fluido y un medio sólido.

3. Tres Dimensiones.

Los problemas físicos reales siempre se encuentran en un espacio tridimensional. Sea cual sea el problema físico que se aborde, siempre se encuentra definido en un espacio de tres componentes que necesitamos explorar en más detalle. [37] ejemplifica el uso de los elementos Finitos de Orden Superior en éste sentido, encaminado en problemas de flujo

definidos en tres dimensiones, los cuales plantea retos fundamentales especialmente en la definición del espacio de funciones y en el ensamble de la matriz global.

4. Galerkin Discontinuo.

La implementación de un Método de Elementos Finitos de Orden Superior es la base para desarrollar un Método de Galerkin Discontinuo. Las reglas de conformidad que el MEF-OS debe cumplir en las fronteras entre elementos, es reemplazada por unas funciones representativas, denominadas **flujos numéricos**, quienes deben proporcionar la continuidad de la solución aproximada final.

Aunque en la formulación del método de Galerkin Discontinuo (G-D), la independencia del grado polinomial asociado a cada elemento κ es satisfecha y no existe el ensamble de un sistema global, la solución final es construida a partir de la solución de sistemas lineales locales, quienes son definidos gracias a la formulación debil del problema de contorno. El MEF-OS se puede considerar como una base de inicio en el estudio del método G-D, quien en ambiente académico esta tomando fuerza en el estudio de problemas de contorno con dependencia temporal en general.

Apéndice A

Polinómios Ortogonales

A.1. Familia Polinómios de Jacobi J

Los polinómios clásicos de Jacobi, $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, de orden n son una solución para los problemas de autovalores de Sturm-Liouville

$$\frac{d}{dx}(1-x^2)\omega(x)\frac{d}{dx}P_n^{(\alpha,\beta)}(x) + n(n+\alpha+\beta+1)\omega(x)P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = 0 \quad , \quad (\text{A.1})$$

para $x \in [-1,1]$, donde las funciones de peso, $\omega(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$. Una de las propiedades fundamentales de los polinómios de Jacobi es la ω – *Ortogonalidad*, consecuencia directa de la ecuación (A.1)

$$\int_{-1}^1 P_i^{(\alpha,\beta)}(x)P_j^{(\alpha,\beta)}(x)\omega(x)dx = \delta_{i,j} \quad . \quad (\text{A.2})$$

Dado que no existe una expresión conocida para evaluar los polinómios de Jacobi, es conveniente hacer uso de la relación de recurrencia

$$xP_n^{(\alpha,\beta)}(x) = a_nP_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x) + b_nP_n^{(\alpha,\beta)}(x) + a_{n+1}P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x) \quad , \quad (\text{A.3})$$

donde los coeficientes estan dados por

$$a_n = \frac{2}{2n + \alpha + \beta} \sqrt{\frac{n(n + \alpha + \beta)(n + \alpha)(n + \beta)}{(2n + \alpha + \beta + 1)}} , \quad (\text{A.4})$$

y

$$b_n = -\frac{\alpha^2 - \beta^2}{(2n + \alpha + \beta)(2n + \alpha + \beta + 2)} . \quad (\text{A.5})$$

Considerando que es una formula de recurrencia, ésta necesita unos valores iniciales

$$P_0^{(\alpha, \beta)}(x) = \sqrt{2^{-\alpha-\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha + \beta + 2)}{\Gamma(\alpha + 1)\Gamma(\beta + 1)}} , \quad (\text{A.6})$$

$$P_1^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{1}{2} P_0^{(\alpha, \beta)}(x) \sqrt{\frac{\alpha + \beta + 3}{(\alpha + 1)(\beta + 1)}} [(\alpha + \beta + 2)x + (\alpha - \beta)] . \quad (\text{A.7})$$

Aqui, $\Gamma(x)$ es la función clásica Gamma [1],[58],[30] .

Apéndice B

Puntos y Pesos de Integración

Los puntos y pesos necesarios en la evaluación numérica de integrales definidas son obtenidas a partir del uso de los polinomios de Legendre y las reglas de cuadratura de Gauss. Así, lo que se busca es expresar una integral definida en un intervalo $[-1,1]$, como una sumatoria de Q [22] términos expresada en la forma

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \dots + \omega_Q f(x_Q) \quad (\text{B.1})$$

de tal forma

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{k=1}^Q \omega_k f(x_k) + \mathcal{R}(f) \quad (\text{B.2})$$

donde $\omega_k \in \mathbb{R}$ y los puntos $x_k \in [-1,1]$ con $k = 1, \dots, Q$. Una buena forma de determinar los pesos w_k y los puntos x_k , es por medio del uso de formulas recurrencia de polinomios ortogonales. Los zeros de los polinomios pueden ser calculados mediante iteraciones Newton-Rapshon para encontrar las raices de cualquier polinómio real. Para los polinomios de Jacobi por ejemplo, quienes se encuentran definidos en el intervalo $[-1,1]$ y satisfacen la formula de recurrencia [1]

$$a_{1n}P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = (a_{2n} + a_{3n}x)P_n^{(\alpha,\beta)} - a_{4n}P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x) \quad (\text{B.3})$$

con

$$a_{1n} = 2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta) \quad (\text{B.4})$$

$$a_{2n} = (2n+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2) \quad (\text{B.5})$$

$$a_{3n} = (2n+\alpha+\beta) \quad (\text{B.6})$$

$$a_{4n} = 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2) \quad (\text{B.7})$$

siendo $P_0^{(\alpha,\beta)} = 1$, $P_1^{(\alpha,\beta)} = \frac{1}{2}[2(\alpha+1) + (\alpha+\beta+2)(x-1)]$, $\alpha, \beta > -1$. En general no existe una forma explícita de como calcular los puntos nodales x_k que garanticen la solución exacta de la integral B.1 si la función no tiene una representación polinomial, por esto se definen en terminos de las raíces de los polinomios de Jacobi [37] de tal forma que :

$$x_i = x_{i,m}^{(\alpha,\beta)} \quad (\text{B.8})$$

$$P_m^{(\alpha,\beta)}(x_{i,m}^{(\alpha,\beta)}) = 0 \quad , \quad i = 0, \dots, m-1 \quad (\text{B.9})$$

Una vez definidos los puntos nodales en los cuales se debe evaluar la función $f(x)$, se procede a determinar el valor de los respectivos pesos ω_k , dependiendo del método de integración que este-mos utilizando. Para nuestro caso, **Gauss-Lobatto-Legendre** ha sido nuestra selección particular, cuyos pesos estan determinados según el punto nodal, de la siguiente forma:

$$x_i = \begin{cases} -1 & , \quad i = 1 \quad , \\ x_i = x_{i-1,Q}^{(1,1)} & , \quad i = 2, \dots, Q-1 \quad , \\ 1 & , \quad i = Q \quad , \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

$$\omega_i^{(0,0)} = \frac{2}{Q(Q+1)[L_Q(x_i)]^2} \quad , \quad i = 0, \dots, Q \quad (\text{B.11})$$

de forma tal que

$$R(f) = 0 \quad \text{si} \quad f(x) \in \mathcal{P}_{2Q-1}([-1,1]) \quad (\text{B.12})$$

y $L_Q(x)$ representa los polinomios de Legendre quienes corresponden a una forma particular de los polinomios de Jacobi, con $\alpha = 0$ y $\beta = 0$.

Como una extensión del análisis unidimensional, para una función $f : \kappa_r \rightarrow \mathfrak{R}$ definida en una región $\kappa_r = [-1,1] \times [-1,1]$, la integración en la región κ_r puede ser representada como:

$$\int_{\kappa_r} f(x,y) dx dy = \sum_{k=1}^{Q^2} \omega_k f(x_k, y_k) \quad . \quad (\text{B.13})$$

donde ω_k representan los pesos de integración y (x_k, y_k) son los puntos de integración, cuando $k = 1, \dots, Q^2$. Si existe la posibilidad de definir la función $f(x,y)$ como el producto de dos funciones $h, g : [-1,1] \rightarrow \mathfrak{R}$ de forma tal $f(x,y) = h(x)g(y)$, la integración de f en la región κ_r toma la forma:

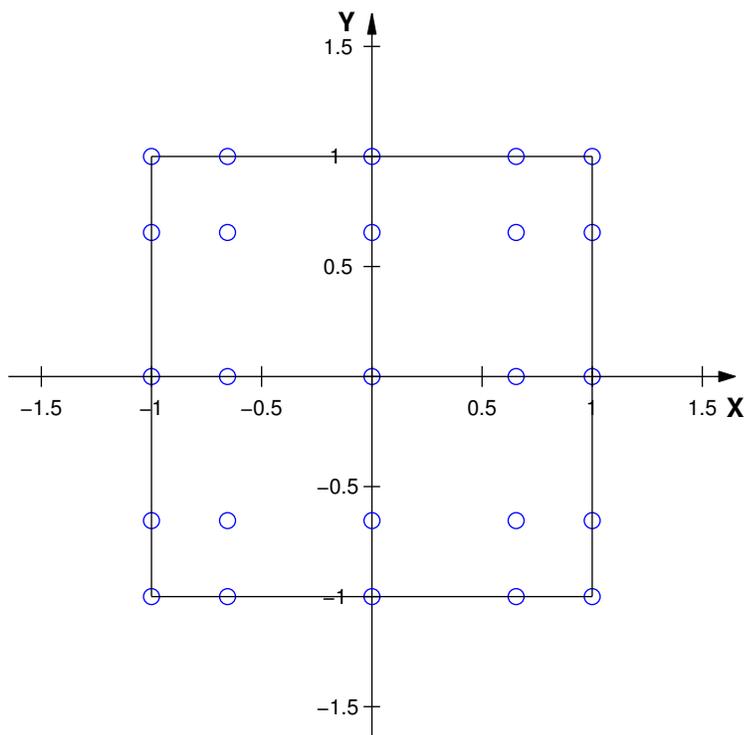
$$\int_{\kappa_r} f(x,y) dx dy = \left(\int_{-1}^1 h(x) dx \right) \left(\int_{-1}^1 g(y) dy \right) \quad (\text{B.14})$$

$$= \left(\sum_{l=1}^Q \omega_l h(x_l) \right) \left(\sum_{k=1}^Q \omega_k g(y_k) \right) \quad (\text{B.15})$$

en una forma reducida

$$\int_{\kappa_r} f(x,y) dx dy = \sum_{l,k=1}^Q \omega_{l,k} h(x_l) g(y_k) \quad (\text{B.16})$$

donde $\omega_{l,k} = \omega_l \omega_k$. Los puntos obtenidos para un valor de $Q = 5$ son expuestos en la tabla [B.1](#).



x_i	y_i	ω_i
-1.0000	-1.0000	0.0100
-0.6547	-1.0000	0.0544
-0.0000	-1.0000	0.0711
0.6547	-1.0000	0.0544
1.0000	-1.0000	0.0100
-1.0000	-0.6547	0.0544
-0.6547	-0.6547	0.2964
-0.0000	-0.6547	0.3872
0.6547	-0.6547	0.2964
1.0000	-0.6547	0.0544
-1.0000	0.0000	0.0711
-0.6547	0.0000	0.3872
-0.0000	0.0000	0.5057
0.6547	0.0000	0.3872
1.0000	0.0000	0.0711
-1.0000	0.6547	0.0544
-0.6547	0.6547	0.2964
-0.0000	0.6547	0.3872
0.6547	0.6547	0.2964
1.0000	0.6547	0.0544
-1.0000	1.0000	0.0100
-0.6547	1.0000	0.0544
-0.0000	1.0000	0.0711
0.6547	1.0000	0.0544
1.0000	1.0000	0.0100

Cuadro B.1: Pesos y Puntos de Integración Gauss-Lobatto-Legendre $Q = 5$.

Apéndice C

Estimativas de Error en el Método de Elementos Finitos

Determinar de forma adecuada el error generado al obtener una solución aproximada de un problema de contorno usando el Método de Elementos Finitos, sigue siendo hoy en día un tema de estudio. Dado a que la solución se encuentra alojada en un espacio de funciones cuya base es polinomial, la diferencia entre la solución aproximada u y su contraparte analítica u_a , denotada por $e = (u - u_a)$ puede generar un problema de contorno equivalente al problema original, al cual se le puede dar solución localmente en cada uno de los elementos geométricos considerando como condiciones de frontera Dirichlet [24]. Sin embargo éste procedimiento *a posteriori* implica la solución de un segundo sistema problema de contorno el cual hace indispensable conocer una mayor información de la geometría que el problema inicial [3].

Antes de efectuar cualquier cálculo para obtener la solución aproximada u , puede evaluarse una estimativa del error generado con respecto a su solución analítica. El principal objetivo de este abordaje *a priori* es saber cual es el orden de convergencia del método de elementos finitos, esto es, nos dira el error $|u - u_a|$ en alguna norma $|\cdot|$ como función de $\mathcal{O}(h,P)$, donde h es el tamaño de máximo de la malla y P el orden polinomial máximo [46].

El objetivo de éstas estimativas es darnos una medida razonable de la eficiencia dada por nuestro método en función de la disminución de h y del incremento de P .

C.0.1. Estimativas de error *a priori* en MEF

Existen diversos tipos de normas que podemos considerar al momento de evaluar el error e_a en el MEF. Una de éstas normas que hace uso de la disposición en la que se encuentra descrito el problema de contorno, es así llamada la norma de la energía $(|\cdot|_E)$.

Usando la notación dispuesta para el operador $a(\cdot, \cdot)$ (1.10) en base al operador diferencial \mathcal{L} (1.7),

$$|f|_E = a(f, f)^{\frac{1}{2}}. \quad (C.1)$$

De tal forma que la norma del error e_a se encuentra dispuesta en la forma:

$$|e_a|_E = a(u - u_a, u - u_a)^{\frac{1}{2}} \quad (C.2)$$

Ésta forma del error en el MEF, nos muestra implícitamente una de sus principales desventajas: el cálculo del término $\nabla(u - u_a)$. Así mismo el uso de ésta norma puede traer consecuencias de inestabilidad, ya que los coeficientes α y λ del operador diferencial, pueden llegar a ser no constantes, incrementando el número de operaciones en el cálculo de $|e_a|_E$.

Otra opción a la norma de la energía, y usando el hecho que la solución aproximada u se encuentra en un espacio de *Hilbert* (\mathcal{H}^1), podemos considerar la norma usual de dicho espacio, quien se encuentra definida como:

$$|u - u_a|_{\mathcal{H}^1} = \left[\int_{\bar{\Omega}} \{ \nabla(u - u_a) \}^2 \partial\bar{\Omega} + \int_{\bar{\Omega}} (u - u_a)^2 \partial\bar{\Omega} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (C.3)$$

Una característica de ésta norma es su coincidencia con respecto a la norma de la energía en el caso en el cual $\alpha = \lambda = 1$.

Una tercera posibilidad de norma, es usar la norma asociado al espacio L_p , esto es

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}_a|_{L_p} = \left[\int_{\bar{\Omega}} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_a)^p \partial \bar{\Omega} \right]^{\frac{1}{p}}, \quad (\text{C.4})$$

quien en muchas ocasiones es usada con $P = 2$.

De ésta forma, podemos dar lugar al siguiente teorema [3].

Teorema C.0.1 *Asumiendo que $0 < \alpha < \alpha_0$ y $0 < \lambda < \lambda_0$ y asumiendo que u satisface $a(u, v) = b_f(v)$ para todo $v \in \mathcal{V}$ segun la sección 1.2. Siendo u_a una aproximación por el Método de Elementos Finitos, usando funciones de Hermite cúbicas de u en una malla con un tamaño caracteriztico h . Entonces*

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}_a|_{\mathcal{GC}^1} \leq Ch^3 |\mathbf{u}^{(4)}|_{L_2} \quad (\text{C.5})$$

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}_a|_{L_p} \leq Ch^3 |\mathbf{u}^{(4)}|_{L_p} \quad \text{con } 1 \leq p < \infty, \quad (\text{C.6})$$

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}_a|_{L_\infty} \leq Ch^3 |\mathbf{u}^{(4)}|_{L_\infty}. \quad (\text{C.7})$$

Bibliografía

- [1] M. ABRAMOWITZ AND I. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, National Bureau of Standards - Applied Mathematics Series 55, 1964.
- [2] M. AINSWORTH AND J. T. ODEN, *A posteriori Error Estimation in Finite Element Methods*, John Wiley & Sons, 2000.
- [3] M. AINSWORTH AND O. TINSLEY, *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Method*, John Wiley & Sons, INC, 2000.
- [4] O. AXELSSON, *Iterative Solution Methods*, Cambridge University Press, 1994.
- [5] I. BABUŠKA, J. CHANDRA, AND J. FLAHERTY, *Adaptive Computational Methods for Partial Differential Equations*, SIAM, 1983.
- [6] B. A. BABUŠKA, I. SZABÓ, *The p-version of the finite element method*, SIAM, Journal Numerical Analysis, 18 (1981), pp. 515–545.
- [7] I. BABUŠKA, A. GRAIG, J. MANDEL, AND J. PITKÄRANTA, SIAM. Journal Numerical Analysis, 28 (1991), pp. 624–661.
- [8] I. BABUŠKA, M. GRIEBEL, AND J. PITKÄRANTA, International Journal of Numerical Methods Engineering, 28 (1989), pp. 1891–1908.

- [9] I. BABUŠKA AND M. SURI, *Numerical Mathematics*, 55 (1989), pp. 97–121.
- [10] I. BABUŠKA, B. A. SZABÓ, AND I. KATZ, *SIAM. Journal of Numerical Analysis*, 18 (1981), pp. 515–545.
- [11] I. BABUŠKA AND I. SZABO, *Finite Element Analysis*, John Wiley & Sons., 1991.
- [12] M. BENZI, *Preconditioning techniques for large linear systems: A survey*, *Journal of Computational Physics*, 182 (2002), pp. 418–477.
- [13] N. BOUHADDI AND R. FILLOD, *A method for selection master dof in dynamic substructuring using the gyan condensation method*, *Computers & Structures*, 45 (1992), pp. 941–946.
- [14] D. BRAESS, *Finite Elements, Theory, fast solvers, and applications in solid mechanics*, Cambridge University Press, 2007.
- [15] S. BRENNER, *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, Springer, 2008.
- [16] C. CANUTO, A. ALERO QUARTERONI, Y. HUSSAINI, AND Z. THOMAS, *Spectral Methods Fundamentals in Single Domains*, Springer, 2010.
- [17] G. CAREY AND J. T. ODEN, *Finite Elements, A Second Course. Volume II*, Prentice-Hall, 1983.
- [18] ———, *Finite Elements, Computational Aspects Volume II*, Prentice-Hall, 1984.
- [19] P. CARNEVALLI, R. MORRIS, Y. TSUJI, AND G. TAYLOR, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33 (1992), pp. 3759–3779.
- [20] P. G. CIARLET, *The Finite Element Methods for Elliptic Problems*, North-Holland Publishing, 1978.
- [21] R. COURANT, *Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations*, *Bulletin of the American Mathematical Society*, 49 (1943), pp. 1–23.

- [22] P. J. DAVIS AND P. RABINOWITZ, *Methods of Numerical Integration - Second Edition*, Academic Press Inc., 1984.
- [23] B. DIETRICH, *Finite Elements, Theory, Fast Solver, and Applications in Solid Mechanics*, 2007.
- [24] P. DIEZ, J. J. EGOZCUE, AND A. HUERTA, *Un estimador del error residual para el método de los elementos finitos*, *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 14 (1998), pp. 557–582.
- [25] S. GANGADHARN, R. T. HAETKA, AND N. E., *An easily implemented static condensation method for structural sensitivity analysis*, *Communications in Applied Numerical Methods*, 6 (1990), pp. 161–171.
- [26] G. GASSNER, F. LÖRCHER, C.-D. MUNZ, AND J. HESTHAVEN, *Polymorphic nodal elements and their application in discontinuous galerkin methods*, *Journal Computational Physics*, 228 (2009), pp. 1573–1590.
- [27] D. GOTTLIEB AND S. ORSZAG, *Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1977.
- [28] R. J. GUYAN, *Reduction of stiffness and mass matrices*, *AIAA*, 3 (1984), pp. 380–380.
- [29] J. HÄUSER AND J. XIA, *Modern introduction to grid generation*, 1996.
- [30] J. HESTHAVEN AND T. WARBURTON, *Nodal Discontinuous Galerkin Methods. Algorithms, Analysis and Applications*, Springer, 2008.
- [31] C. HIRSCH, *Numerical Computation of Internal and External Flows*, John Wiley & Sons, 2007.
- [32] K. HOEMANN, *Computational Fluid Dynamic. Volume 1.*, Engineering Education System, 2000.

- [33] E. ISAACSON AND H. KELLER, *Analysis of Numerical Methods*, John Wiley & Sons, 1966.
- [34] C. JOHNSON, *Numerical Solution of partial differential equations by the finite element method*, Cambridge University Press, 1987.
- [35] P. KANUPP AND S. STEINBERG, *Fundamentals of Grid Generation*, CRC Press, 1994.
- [36] H. KARDESTUNCER AND F. BREZZI, *Finite Element Handbook*, McGraw-Hill, 1976.
- [37] G. KARNIADAKIS AND S. SHERWIN, *Spectral/hp Element Methods for Computational Fluid Dynamics*, Oxford University Press, 2005.
- [38] P. KOUTSOVASILIS AND M. BEITELSCHMIDT, *Model reduction of large elastic systems. a comparison study on the elastic piston rod*, (2007), pp. 1–6.
- [39] R. LEVEQUE, *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*, SIAM, 2007.
- [40] V. LISEIKIN, *Grid Generation Methods*, Springer, 2010.
- [41] R. MARTÍNEZ, J. C. RODRÍGUEZ, AND G. A. GAVIRIA, *Estudio y construcción de mallas elípticas por el método de gauss-seidel*, *Revista Colombiana de Física*, 42 (2011), pp. 147–151.
- [42] C. MEYER, *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, SIAM, 2000.
- [43] S. MIKHLINE, *The Numerical Performance of Variational Methods*, Worters-Noorhoff, 1971.
- [44] R. MORRIS, Y. TSUJI, AND P. CARNEVALLI, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33 (1992), pp. 2059–2071.
- [45] J. T. ODEN, *Analysis of Plate-beam Structures*, Ph. D. thesis, Oklahoma State University, (1963).
- [46] A. PEANO, *Computational and Mathematics with Applications*, 2 (1976), pp. 211–224.

- [47] A. POLYANIN AND V. ZAITSEV, *Handbook of Nonlinear Partial Differential Equation*, Chapman & Hall / CRC, 2003.
- [48] A. D. POLYANIN, *Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists*, Chapman & Hall/CRC, 2000.
- [49] P. PULINO, *Álgebra Linear e suas Aplicações -Notas de Aula*, Unicamp, 2013.
- [50] A. QUARTERONI, *Numerical Models for Differential Problems*, Springer, 2009.
- [51] A. QUARTERONI, R. SACCO, AND F. SALERI, *Numerical Mathematics*, Springer, 2010.
- [52] D. REDDY, *Functional Analysis and Boundary-Value Problems: an introductory treatment*, New York. N.Y. Logman Scientific and Technical, 1986.
- [53] K. SAMIR, F. SAIED, AND A. SAMEH, *Efficient iterative solvers for structural dynamic problems*, *Computers & Structures*, 82 (2004), pp. 2363–2375.
- [54] C. SCHWAB, *p- and hp- Finite Element Methods: Theory and Applications in Solid and Fluid Mechanics*, Oxford University Press, 1998.
- [55] K. SHYE AND M. RICHARDSON, *Mass, stiffness and damping matrix estimates from structural measurements*, *IMAC*, (1987), pp. 1–7.
- [56] C. SU-HUAN AND H. PAN, *Guyan reduction*, *Communications in Applied Numerical Methods*, 4 (1988), pp. 549–556.
- [57] P. SÖLIN, *Higher-Order Finite Element Methods*, Chapman and Hall/CRC, 2004.
- [58] G. SZEGÖ, *Orthogonal Polynomials*, American Mathematical Society, 1975.
- [59] J. THOMPSON, B. SONI, AND N. WEATHERILL, *Handbook of Grid Generation*, CRC Press, 1999.

- [60] J. THOMPSON, Z. U. A. WARSI, AND W. C. MASTIN, *Numerical Grid Generation. Foundations and Applications*, CRC Press, 1995.
- [61] L. TREFETHEN AND D. BAU, *Numerical Linear Algebra*, SIAM, 1997.
- [62] I. A. VASEVA, V. D. LISEIKIN, V. Y. LIKHANOVA, AND Y. N. MOROKOV, *Some aspects of grid generation*, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 48 (2008), pp. 1600–1619.
- [63] T. VEJCHODSKÝ AND P. SÖLÍN, *Static condensation, partial orthogonalization of basis functions, and ilu preconditioning in the hp-fem*, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 218 (2007), pp. 192–200.
- [64] R. VOIGT, D. GOTTLIEB, AND Y. HUSSAINI, *Spectral Methods for Partial Differential Equations*, SIAM, 1984.
- [65] D. WATKINS, *Fundamentals of Matrix Computations*, Wiley-Interscience, 2002.
- [66] E. WILSON, *The static condensation algorithm*, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 8 (2005), pp. 198–203.
- [67] G. YANG AND P. JIANG, *Ssor and assor preconditioners for block-broyden method*, *Applied Mathematics and Computation*, 188 (2007), pp. 194–205.
- [68] O. C. ZIENKIEWICZ AND R. L. TAYLOR, *The Finite Element Method*, McGraw-Hill, 1994.
- [69] O. C. ZIENKIEWICZ AND R. L. TAYLOR, *The Finite Element Method. Volume 1: The Basis*, Butterworth Heinemann, 2000.