

METODO DE SOLUCIONES FUNDAMENTALES
MEJORADO PARA FLUJO TRIDIMENSIONAL
CON SUPERFICIE LIBRE EN MEDIO POROSO

Ing. Iván I. Saavedra Cuadra

Tesis Presentada ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
para optar al título de Doctor en
Ciencias de la Ingeniería.

Caracas, Julio de 2002

Certifico que he leído esta Tesis y que la encuentro apropiada tanto en su contenido como en su formato y apariencia externa



Profesor Henry Power, Tutor

Fecha:

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE INGENIERIA

VEREDICTO

Los suscritos, miembros del jurado designado por el Consejo de la Facultad de Ingeniería y el Consejo de Estudios de Postgrado para examinar la Tesis Doctoral presentado por Ivan Ignacio Saavedra Cuadra, Cédula de Identidad número 81.975.876, bajo el título METODO DE SOLUCIONES FUNDAMENTALES MEJORADO PARA FLUJO TRIDIMENSIONAL CON SUPERFICIE LIBRE EN MEDIO POROSO, a los fines de optar al Título de Doctor en Ciencias de la Ingeniería, dejamos constancia de lo siguiente:

Leído como fue dicho trabajo por cada uno de los miembros del jurado, éste convocó para que la defensa se realizara el día 20/06/2003, en el salón de conferencias del Instituto de Mecánica de Fluidos. El aspirante hizo un resumen oral de su Trabajo de Grado, luego de lo cual respondió satisfactoriamente las preguntas que le fueron formuladas por el Jurado; todo ello conforme a lo dispuesto en los artículos 44, 49, 50, 51 y 52 del Reglamento de Estudios de Postgrado.

Finalizada la defensa, el Jurado deliberó en privado, y por unanimidad, decidió aprobar el Trabajo, por considerar, sin hacerse solidario de las ideas expuestas por el autor, que cumple con lo dispuesto en el Reglamento mencionado. Para este veredicto el Jurado consideró que la obra examinada constituye un aporte valioso al área de la hidráulica mediante el desarrollo de técnicas numéricas para flujo potencial en sistemas grandes.

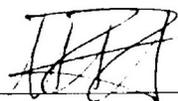
En fe de lo cual se levanta la presenta acta, en original y tres copias, en Caracas a los 20 días del mes de Junio del año 2003, dejándose constancia que, conforme a la normativa vigente, actuó como Coordinador del Jurado el Profesor Henry Power, Tutor del Trabajo.



Prof. Henry Power



Prof. Juan Guevara



Prof. Luis Rojas



Prof. Hervé Jegat



Prof. Pánfilo Masciangioli

Resumen

En este trabajo se desarrolla una implementación del Método de las Soluciones Fundamentales para la solución de problemas de flujo potencial tridimensional con aplicaciones a la simulación de flujo en medio poroso no confinado. El movimiento de la superficie libre se expresa como una condición de contorno mixta y se discretiza utilizando interpolación mediante funciones de base radial a fin de mejorar la resolución del contorno. Se utiliza un método iterativo para efectuar la solución del sistema lineal de ecuaciones obtenido por la formulación de mínimos cuadrados del Método de las Soluciones Fundamentales (MSF).

Se desarrolla una técnica de mejoramiento de la precisión del método de las soluciones fundamentales por mínimos cuadrados mediante un esquema adaptativo de refinamiento. Se utiliza una estructura de datos jerárquica para distribuir las fuentes a partir de una distribución gruesa inicial. El indicador de corrección usado en el procedimiento del refinamiento se basa en la influencia relativa de las intensidades de la fuente obtenidas como parámetros en análisis de regresión múltiple, a partir de la solución de las ecuaciones en cada paso del proceso de refinamiento. Los experimentos numéricos muestran que el indicador basado en el coeficiente de determinación es útil para el refinamiento selectivo de la distribución de fuentes, con una reducción importante del error global en pocos pasos.

Para acelerar el cálculo de la solución iterativa de las ecuaciones del MSF por mínimos cuadrados en sistemas con un gran número de puntos del contorno se desarrolla una modificación de la aplicación del Algoritmo Multipolar Rápido para efectuar el producto por la matriz transpuesta. La combinación del algoritmo multipolar rápido con el algoritmo GMRES para la solución iterativa del sistema de ecuaciones lineales

convierte el esquema en una herramienta poderosa para problemas tridimensionales grandes.

El modelo desarrollado con las técnicas de mejoramiento descritas se aplica en casos de estudio de flujo en medio poroso y se alcanzan con este método soluciones rápidas y precisas de los potenciales y sus derivadas normales.

Contenido

1	Introducción	1
1.1	Modelos de Flujo de Aguas Subterráneas	4
1.2	Métodos de Frontera para la Solución numérica de la Ecuación de Laplace	6
1.3	El Método de las Soluciones Fundamentales	8
1.4	Desarrollo Multipolar Rápido	9
1.5	Refinamiento Adaptativo	11
1.6	Solución de Flujo Potencial con Superficie Libre	12
1.7	Objetivos del Trabajo	13
2	Flujo de Aguas Subterráneas	15
2.1	Características de los Acuíferos	16
2.2	Propiedades Hidráulicas de los Medios Porosos	18
2.3	Ley de Darcy y Flujo Potencial	20
2.4	Métodos Numéricos para la Solución del Flujo y Transporte en Medio Poroso	22
2.4.1	Método de Diferencias Finitas.	25
2.4.2	Método de Elementos Finitos.	26
2.4.3	Método de Elementos de Frontera	29
2.5	Flujo en Medio Poroso No Confinado	31

3	El Método de las Soluciones Fundamentales	33
3.1	Antecedentes sobre el MSF	33
3.2	Planteamiento de la Solución numérica por medio del MSF	36
3.3	Sistema de Ecuaciones Lineales del MSF	40
3.3.1	Enfoque de Colocación Directa	41
3.3.2	Enfoque de Mínimos Cuadrados	42
3.4	Solución de los Sistemas de Ecuaciones	42
3.4.1	Solución Directa	43
3.4.2	Solución Iterativa	45
4	El Método de las Soluciones Fundamentales con Desarrollos Multipolares	47
4.1	División del Dominio Mediante Estructuras Arborescentes	50
4.2	Ecuaciones Básicas del Método de Desarrollo Multipolar Rápido	51
4.3	Traslaciones de Desarrollos Multipolares	53
4.4	El Procedimiento de Desarrollo y Agrupamiento del AMR	55
4.5	Criterio de Separación	57
4.6	Solución de Problemas Armónicos en el MSF por Colocación Directa	60
5	El Método de las Soluciones Fundamentales por Mínimos Cuadrados.	63
5.1	Formulación del Problema de Regresión Lineal Múltiple	64
5.1.1	Estimación de Parámetros en el Modelo de Regresión Lineal	65
5.1.2	El Modelo de Regresión en el MSF	67
5.2	Análisis de la Variabilidad Alrededor de la Superficie de Regresión	68
5.2.1	Varianza–Covarianza de los Parámetros Estimados	70
5.2.2	Partición de la Suma de Cuadrados	71

5.3	Solución de Problemas Armónicos por Mínimos Cuadrados con el Algoritmo Multipolar Rápido	75
5.3.1	Consideraciones Preliminares sobre el Rendimiento del AMR	76
5.3.2	Premultiplicación por la Matriz Transpuesta Utilizando el AMR	78
5.3.3	Pruebas Numéricas del Desarrollo Multipolar en Problemas de Mínimos Cuadrados	79
6	El Método de las Soluciones Fundamentales con Refinamiento Adaptativo	88
6.1	Antecedentes y Consideraciones Preliminares sobre el Refinamiento en el MSF	89
6.2	Determinación de las Mejores Variables de Predicción en Análisis de Regresión	91
6.2.1	Criterio Basado en la Desviación Estándar de los Parámetros Estimados	93
6.2.2	Criterio Basado en la Partición de Sumas de Cuadrados	94
6.2.3	Algoritmos para la selección de mejores subconjuntos de variables de predicción	96
6.3	Estrategia de Refinamiento Adaptativo	98
6.4	Indicadores de Refinamiento	99
6.5	Criterio para la División de las Fuentes	103
6.6	Solución de los Sistemas de Ecuaciones	104
6.7	Geometría de la División de las Fuentes	105
6.8	Terminación del Algoritmo de Refinamiento	107
6.9	Pruebas Numéricas del Refinamiento	108

7	Solución Numérica de Flujo con Superficie Libre	119
7.1	Discretización de la Condición de Contorno de Robin	119
7.2	Funciones de Interpolación	121
7.3	Interpolación Mediante Funciones de Base Radiales	123
7.4	Aplicación de los Splines de Placa Delgada a la Interpolación sobre la Superficie Libre	127
7.5	Aplicación del Esquema de Solución de Flujo Potencial con Superficie Libre	128
7.5.1	Flujo a Través de una Presa	129
8	Conclusiones y Recomendaciones	132
	Referencias	135

Lista de Figuras

3.1	Representación bidimensional de la discretización en el método de las soluciones fundamentales.	40
4.1	Representación bidimensional del árbol de celdas de Barnes y Hut . . .	51
4.2	Notación usada para los puntos en las ecuaciones básicas del Algoritmo Multipolar Rápido	52
4.3	Variables en el criterio de buena separación de celdas	58
4.4	Región de interacción correspondiente al criterio de separación del PAM	59
5.1	Tiempos de ejecución por los métodos directo y multipolar en problemas de diferentes tamaños.	82
5.2	Consumo de memoria de los métodos directo y multipolar en problemas de diferentes tamaños.	83
5.3	Tiempos de ejecución de los métodos directo y multipolar después de la división de las fuentes.	85
5.4	Consumo de memoria de los métodos directo y multipolar después de la división de las fuentes.	86
6.1	Estructura del árbol de refinamiento sobre la superficie de una esfera .	107
6.2	Reducción del error en el refinamiento basado en la varianza de los parámetros estimados con potenciales impuestos en 2048 puntos sobre una esfera.	110

6.3	Reducción del error en el refinamiento basado en la varianza de los parámetros estimados con derivadas normales impuestas en 2048 puntos sobre una esfera.	111
6.4	Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con potenciales impuestos en 2048 puntos sobre una esfera. .	112
6.5	Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con derivadas normales impuestas en 2048 puntos sobre una esfera.	113
6.6	Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con potenciales impuestos en 768 puntos y derivadas normales impuestas en 1800 puntos sobre un cilindro.	114
6.7	Islíneas del potencial calculado con 32 fuentes.	115
6.8	Islíneas del potencial calculado con 104 fuentes.	115
6.9	Islíneas del potencial calculado con 176 fuentes.	116
6.10	Islíneas del potencial calculado con 296 fuentes.	116
6.11	Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con potenciales impuestos en 1800 puntos y derivadas normales impuestas en 1800 puntos sobre un anillo de sección cuadrada.	117
7.1	Condiciones de contorno del problema de flujo a través de una presa. .	129
7.2	Evolución del perfil de la superficie libre en el tiempo.	130
7.3	Variación en el tiempo del nivel de la superficie libre en el extremo aguas abajo.	131

Capítulo 1

Introducción

Los modelos matemáticos para estudios de sistemas hidráulicos permiten estimar el impacto que las acciones ejercidas en cada punto de un sistema puedan tener sobre otros puntos del mismo, a través de las modificaciones de la dinámica hidráulica y de la calidad del agua. Mediante la aplicación de dichos modelos se facilita la predicción de los resultados de alteraciones impuestas por la actividad humana, cuyo efecto se complica por la interacción entre los procesos que ocurren en los sistemas, por lo cual dichos modelos son de gran importancia en estudios de impacto ambiental. Los modelos que se utilizan en ingeniería hidráulica son representaciones simplificadas de fenómenos extremadamente complejos, donde se incorporan las influencias más importantes de acuerdo al propósito del estudio y, mediante la solución de las ecuaciones descriptivas del fenómeno, permiten obtener en forma detallada la distribución espacial o la evolución en el tiempo de las variables del sistema estudiado. La solución se calcula con la ayuda de equipos de computación, mediante un programa al cual se introducen los datos de configuración geométrica y condiciones iniciales y de contorno requeridas para la simulación del sistema físico. Una vez que el modelo ha sido desarrollado y calibrado, constituye una herramienta de gran utilidad para predecir los efectos de cambios introducidos al sistema físico estudiado. La flexibilidad de los modelos numéricos se deriva de su facilidad para efectuar de una manera simple modificaciones en la

geometría e hidráulica del sistema y así estudiar diferentes sistemas y condiciones de diseño mediante un mismo programa.

Los estudios de la explotación del agua como recurso natural son cada día más importantes porque, aunque éste es un recurso natural renovable, su contaminación y explotación sin medida son problemas graves en todo el mundo. La mayor parte de los sistemas de agua dulce han sido objeto de una fuerte explotación en pos del desarrollo humano. En muchos casos las aguas de los ríos y las llanuras en que vivimos han sido reguladas y controladas por obras de ingeniería. Los humedales, que son bañados por aguas poco profundas y suelen estar saturados de nutrientes, se han visto afectados por el desconocimiento generalizado de las múltiples y valiosas funciones beneficiosas que desempeñan en las cuencas y zonas costeras donde se hallan. Los humedales conforman algunos de los sistemas naturales más productivos de la Tierra y son asimismo un medio ideal para transportar personas y mercancías. La productividad biológica de los humedales estuarinos y costeros es enorme y en muchos lugares desempeñan una función importante en la recarga de los acuíferos y la descarga de aguas subterráneas, por lo cual es necesario prestar especial atención a su conservación y uso sostenible debido a su importancia para la futura supervivencia de la especie humana.

De lo anterior se infiere la importancia de la aplicación de las técnicas de modelaje numérico al estudio de los sistemas de aguas subterráneas, afectados por los cambios en las aguas superficiales. La posición de la interfase entre las aguas superficiales y los acuíferos es variable y depende de factores como la ubicación respecto al nivel del mar. La investigación de los movimientos del agua subterránea y de las propiedades hidrológicas del subterráneo es de interés para ingenieros, ecologistas e hidrólogos. El análisis se complica por la presencia de la superficie superior de forma variable, que recibe la denominación de superficie freática. La ubicación de la superficie libre es un problema desafiante en muchas áreas de la mecánica de fluidos. Las aproximaciones por

prueba y error suelen ser ineficientes. Por esto es necesario el desarrollo de programas de computación para implementar la solución de las ecuaciones de flujo en medio poroso para sistemas grandes.

Esta investigación de tesis doctoral se ha centrado en el desarrollo de un modelo computacional que involucra un gran número de puntos, siendo entonces un problema numéricamente intensivo el cual requiere de equipos y técnicas avanzadas de computación. Dicho modelo computacional de flujo con superficie libre en medio poroso basado en la solución numérica de la ecuación de Laplace en 3 dimensiones, aplicable a sistemas de aguas subterráneas parcialmente no confinados, físicamente extensos y conectados con aguas superficiales, requiere la aplicación de métodos eficientes de solución de ecuaciones diferenciales parciales. Aunque con el desarrollo tecnológico actual se han producido equipos de computación con mayor velocidad, para la solución de un problema de esta magnitud de acuerdo a los objetivos de investigación planteados, la ejecución del modelo con técnicas numéricas tradicionales requeriría tiempos de ejecución excesivos del programa. Por esto se han seleccionado, como más adecuados como base para el desarrollo de la solución numérica de flujo potencial tridimensional, los algoritmos correspondientes a los métodos de frontera para la solución de ecuaciones diferenciales parciales.

En años recientes el trabajo sobre las técnicas de ecuaciones integrales para la solución de problemas de ecuaciones diferenciales parciales con valores en la frontera, como alternativa frente a los métodos basados en el dominio, ha dado lugar a un aumento continuo en el uso de los métodos de frontera para la solución de problemas científicos y de ingeniería. Una amplia gama de problemas de interés, descritos por ciertas clases de ecuaciones diferenciales parciales, se puede formular como ecuaciones integrales de frontera. La eficacia de los métodos de frontera para los problemas convencionales resulta de la reducción de la dimensionalidad y de la alta precisión de las técnicas. Aunque entre

dichos métodos ha sido ampliamente usado el BEM, recientemente se han considerado las ventajas del método de las soluciones fundamentales. Ha sido necesario el desarrollo de los programas básicos, acompañado de la investigación de técnicas de computación de alto rendimiento para realzar el funcionamiento del modelo de flujo en el medio poroso y de su posterior aplicación a la solución de flujo con superficie libre. Por estas razones se efectúa la investigación de la solución de este problema desarrollando una técnica eficiente mediante la aplicación del Método de las Soluciones Fundamentales el cual se combina con técnicas de refinamiento para mejorar la precisión y de aceleramiento para sistemas definidos mediante muchos puntos en la frontera. Este trabajo de tesis llena una necesidad en el área de desarrollo de modelos computacionales en ingeniería para estudios de sistemas hidráulicos vinculados con estudios de impacto ambiental.

1.1 Modelos de Flujo de Aguas Subterráneas

El agua subterránea se mueve como el agua superficial pero más lentamente, dependiendo de la porosidad y permeabilidad del substrato. El movimiento lateral y vertical se debe a las diferencias de elevación y de presión. Los modelos son generalmente formulados en términos del medio continuo. El desarrollo de modelos para la estimación del patrón de flujo en aguas subterráneas bajo la influencia de las mareas y niveles de agua superficiales se basa en las ecuaciones que gobiernan este movimiento tridimensional, las cuales se derivan de los principios de conservación de masa y cantidad de movimiento, y se simplifican considerando la ley de Darcy, la cual establece una relación lineal entre la velocidad del flujo y el gradiente de la altura piezométrica, lo cual para situaciones generales en tres dimensiones lleva a la solución del campo de flujo por medio de la teoría del campo potencial, gobernado por la ecuación de Laplace. La solución numérica del flujo en medio poroso ha alcanzado un gran desarrollo que permite determinar de una manera confiable el patrón de flujo en un dominio fijo. Las ecuaciones se complican

por la presencia de la superficie libre o capa freática. La presión del agua en el nivel freático es la atmosférica, y aumenta a partir de la superficie en sentido descendente. Dicha superficie libre sufre constantes modificaciones de nivel, con ascensos y descensos en función de los aportes de agua que se puedan dar. Dado que parte de los valores en la frontera deben aplicarse sobre dicha superficie, el problema no puede resolverse sin conocer la ubicación de la misma, y por otra parte dicha ubicación es parte de la solución del problema. La ubicación de la superficie libre es un problema desafiante en muchas áreas de la mecánica de fluidos, ya que resulta ineficiente efectuar el cálculo mediante aproximaciones que aplican iterativamente los valores de frontera con una superficie inicial, para resolver las ecuaciones y recalcular luego la superficie en base a los nuevos valores calculados en la frontera.

Por otra parte, los modelos para la estimación del transporte de sustancias disueltas, han alcanzado también un gran desarrollo que permite estudiar la contaminación de las aguas subterráneas una vez determinado el campo de flujo. Los fundamentos de los modelos basados en estas ecuaciones pueden encontrarse, por ejemplo, en el libro de Bear [2]. Entre las técnicas numéricas que han sido aplicadas en modelos de flujo y calidad de aguas subterráneas se destacan los métodos de diferencias finitas, de elementos finitos, de volúmenes finitos y de elementos de frontera. Dada la importancia del desarrollo y aplicación de los modelos de flujo y contaminación en aguas subterráneas, se encuentran numerosas publicaciones dedicadas a los métodos de solución en la literatura especializada en las áreas de hidrología, hidráulica y métodos numéricos en ingeniería. El actual grado de desarrollo de técnicas numéricas para la solución de sistemas de ecuaciones con matrices grandes dispersas documentado en el área de computación estadística y matemática y de las técnicas para problemas de N -partículas en el área de física computacional, permite obtener soluciones de la ecuación de Laplace para sistemas grandes, por lo cual estos métodos adecuadamente seleccionados y con

algunas modificaciones permiten resolver sistemas amplios de acuíferos no confinados. Las técnicas para la solución de la ecuación de Laplace y otras técnicas numéricas que constituyen el fundamento del presente trabajo se resumen a continuación. En secciones posteriores se presentan detalles de dichos métodos y de la integración de las técnicas avanzadas desarrolladas en este trabajo al estudio del flujo en medio poroso.

1.2 Métodos de Frontera para la Solución numérica de la Ecuación de Laplace

Este trabajo de tesis doctoral se centra en el desarrollo de programas de computación para implementar la solución numérica de la ecuación de Laplace en 3 dimensiones. Los algoritmos desarrollados como base del modelo de flujo con superficie libre tridimensional se basan en los métodos de frontera para la solución de ecuaciones diferenciales parciales. Dichos métodos presentan muchas ventajas frente a los métodos basados en el dominio, debido a la reducción de la dimensionalidad del problema y de la alta precisión de las técnicas, por lo cual son ampliamente usados para la solución de una amplia gama de problemas de interés en ciencias e ingeniería que se pueden plantear como ecuaciones integrales de frontera.

En general, la base de los métodos de las integrales de frontera es la transformación de la ecuación diferencial parcial original en una ecuación integral equivalente, ya sea por medio de la representación de Green correspondiente (método directo) o en términos de una distribución continua de soluciones singulares de la ecuación diferencial parcial sobre la frontera del problema (método indirecto). Las incógnitas en la formulación integral del problema de valor de frontera serían respectivamente las variables primitivas en la frontera o las densidades superficiales ficticias de las soluciones singulares. De esta manera la ecuación integral obtenida satisface exactamente la ecuación que gobierna el campo, y se busca satisfacer aproximadamente las condiciones impuestas en la frontera.

El Método de Elementos de Frontera (conocido como BEM por sus siglas en inglés), el cual es un método numérico para solución de las ecuaciones integrales de frontera basado en un procedimiento de discretización, ha sido ampliamente usado para la solución numérica de la ecuación de Laplace en 3 dimensiones. Para construir el modelo de una geometría compleja el BEM utiliza una representación basada en formas geométricas simples. En general se elige un conjunto de puntos en la frontera unidos por superficies formadas con trozos suaves descritos por funciones simples. Una función aplicada en la frontera se define por conveniencia usando el mismo conjunto de puntos y generalmente el mismo conjunto de funciones de interpolación. Las integrales de los núcleos en la representación de Green se expresan así en términos de una suma ponderada de las singularidades que se puede representar como el producto de una matriz de soluciones fundamentales por un vector de densidades o intensidades de fuentes. Este método presenta ventajas para la solución de la ecuación de Laplace en 2 y 3 dimensiones, y en particular para el flujo en medio poroso con superficie libre[52], pero su aplicación a un dominio con un gran número de elementos requiere la utilización de técnicas computacionales para acelerar el cálculo, dado que en su forma original el tiempo de cálculo es proporcional al cubo del número de elementos.

Por lo anterior se infiere que las alternativas más adecuadas para la implementación del modelo de flujo con superficie libre en medio poroso se basan en métodos de frontera. Aunque entre dichos métodos ha sido ampliamente preferido el BEM, en particular recientemente [19] se han considerado las ventajas del método de soluciones fundamentales. Para la aplicación a sistemas físicos de gran tamaño, se obtiene adicionalmente un aceleramiento del cálculo aplicando el algoritmo de desarrollo multipolar rápido de Greengard y Rokhlin. [26].

1.3 El Método de las Soluciones Fundamentales

El Método de las Soluciones Fundamentales (MSF) constituye uno de los enfoques más intuitivos para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales elípticas. En este método se representa una solución aproximada en forma de una superposición lineal de funciones de fuente (soluciones fundamentales) ubicadas fuera del dominio del problema. Dado que la solución fundamental satisface la ecuación diferencial en todo punto excepto el punto de fuente, se infiere que esta representación satisface exactamente la ecuación que gobierna el campo y se desea entonces satisfacer aproximadamente las condiciones de contorno, impuestas sobre un conjunto de puntos sobre el contorno (puntos de colocación). En [18] se presenta una revisión del MSF, en el cual este enfoque es relacionado con un método BEM indirecto cuya aproximación numérica para la representación de simple capa se reduce a una superposición lineal de soluciones fundamentales. A partir de esta consideración, podemos decir que el MSF es una técnica perteneciente a la clase de métodos de frontera, la cual es aplicable cuando se conoce una solución fundamental de la ecuación diferencial parcial que se desea resolver. En consecuencia el MSF es en cierto modo similar al BEM, con ventajas adicionales en lo que respecta a su simplicidad de formulación y el hecho de que la distribución de los puntos prácticamente no requiere la construcción de una malla de cálculo.

Uno de los trabajos pioneros sobre el MSF es el de Kupradze y Aleksidze [48], el cual fue después expandido por Bogomolny [7]. Aunque el método es útil para una amplia clase de problemas, la discusión en el presente trabajo se limita a la solución de la ecuación de Laplace. La solución del problema interior es aproximada por una combinación lineal de fuentes ubicadas fuera del dominio del problema [37]. Los coeficientes de las soluciones fundamentales con coordenadas preestablecidas son determinados en general resolviendo un sistema de ecuaciones que se obtiene imponiendo las correspondientes condiciones de contorno del problema. Esto puede efectuarse por medio de

colocación directa, para el cual se resuelve un sistema con un número de ecuaciones lineales igual al número de incógnitas, o las condiciones de contorno pueden satisfacerse *en el sentido de mínimos cuadrados* con un número de fuentes menor que el número de puntos donde se especifican las condiciones de contorno. Existe cierta indicación numérica de que este último enfoque puede ser el más eficiente [30].

La implementación del MSF es en apariencia bastante directa. Es necesario solamente especificar los puntos de fuente fuera del dominio del problema y los puntos del contorno sobre los límites del dominio, y luego resolver el sistema de ecuaciones lineales resultante. Dado que esta formulación simple basada en la superposición de singularidades (fuentes) ubicadas fuera del dominio del problema no requiere la construcción de una malla para la distribución de los puntos, el método ofrece la posibilidad de soluciones más precisas y rápidas. Estas ventajas hacen de este método un candidato ideal para la solución de problemas de contornos móviles [10].

1.4 Desarrollo Multipolar Rápido

En los inicios del desarrollo del método de elementos de frontera (BEM), se esperaba que dicho método llegaría a ser más eficiente que los métodos de diferencias finitas y de elementos finitos en todas las clases de problemas, al eliminarse una dimensión en el problema, conduciendo a un número más pequeño de grados de libertad en el sistema de ecuaciones. Sin embargo, un número más pequeño de grados de libertad no significa siempre una solución más rápida, dado que el tratamiento numérico de estas ecuaciones da como resultado sistemas de ecuaciones lineales completamente densos. Las ecuaciones son generalmente mejor condicionadas que las obtenidas por los métodos para la solución de ecuaciones diferenciales parciales basados en el dominio, pero su solución tiene que ser obtenida generalmente usando técnicas de solución directa que

requieren un número de operaciones proporcional al cubo del número de grados de libertad en el algoritmo numérico.

Para obtener numéricamente la solución de la ecuación de Laplace en tres dimensiones, la solución se representa en la forma de una suma de soluciones fundamentales que se expresan como interacciones entre pares de singularidades o partículas. La representación geométrica de una frontera continua en el BEM puede siempre mejorarse aumentando el número de elementos o el orden de la aproximación, incrementando de esta manera el número de interacciones entre partículas. Esto conduce a desventajas importantes en el método, ya que el mejoramiento de la precisión se obtiene con un alto costo debido a la necesidad de un gran número de puntos en la expresión de las integrales, especialmente las correspondientes a los elementos alrededor de la diagonal principal de la matriz del sistema. Para superar las dificultades en el manejo de las matrices enormes y densas que resultan de las interacciones de los puntos, se deben utilizar métodos rápidos de acumulación, los cuales se basan en la consideración de una colección de dichas partículas, la cual vista desde una distancia suficientemente grande se puede considerar como una sola partícula. La pérdida de precisión en esta aproximación decae con la distancia, por lo cual las influencias más lejanas se pueden agrupar en forma aproximada para reducir el tiempo de cálculo.

El algoritmo de desarrollo multipolar rápido ha sido utilizado para simulaciones numéricas que implican el cálculo de potenciales y fuerzas de interacción entre un número muy grande de partículas. Para la aplicación a la solución de la ecuación de Laplace en un dominio continuo, el cálculo de los desarrollos multipolares se efectúa dentro de un esquema de solución iterativa para las ecuaciones del método de soluciones fundamentales, lo cual permite aplicar el método a un dominio con un gran número de puntos de evaluación, en un tiempo proporcional al número de partículas.

La técnica de solución numérica de la ecuación de Laplace en 3 dimensiones mediante el BEM con el Algoritmo Multipolar Rápido (AMR), está constituida básicamente por

la expresión de las integrales de doble capa y de simple capa en la representación de Green como una suma ponderada de soluciones fundamentales [65], la cual para la representación de un sistema físico de gran tamaño, se efectúa mediante el AMR, basado en algoritmos arborescentes para subdividir jerárquicamente el dominio de simulación en áreas bien separadas que pueden interactuar por medio de los desarrollos truncados, y en el concepto de *desarrollos locales* para trasladar y acumular los efectos de múltiples desarrollos multipolares remotos convertidos en un solo desarrollo local, resultando en una complejidad de la evaluación proporcional al número de partículas. Este algoritmo de alto rendimiento fue logrado desarrollando el núcleo en términos de series de armónicos esféricos. Aunque el AMR es aplicable a la integración en el BEM, su aplicación al Método de las Soluciones Fundamentales (MSF) es más evidente.

1.5 Refinamiento Adaptativo

El MSF es una técnica de frontera con una formulación relativamente simple y no exige la construcción de una malla de cálculo. En el presente trabajo, se utiliza el enfoque de *mínimos cuadrados* y en vista de las ventajas y aplicaciones del método, se desarrolla una técnica para mejorar su precisión mediante el ajuste secuencial adaptativo de la distribución de las fuentes. Se logra un mejoramiento en precisión y condicionamiento del sistema de ecuaciones lineales por medio de un esquema adaptativo de refinamiento con solución iterativa del sistema de ecuaciones lineales en cada paso. El procedimiento adaptativo se basa en un indicador de corrección obtenido a partir de la influencia relativa de las intensidades de las fuentes obtenidas como parámetros en análisis de regresión lineal múltiple. El cálculo de la solución aproximada de los problemas potenciales con el enfoque de mínimos cuadrados permite obtener una distribución más razonable del error global en la solución. La solución con un esquema iterativo hace posible adaptar este esquema de refinamiento para problemas potenciales tridimensionales conducentes

a sistemas de ecuaciones con un gran número de incógnitas, y presenta ventajas para problemas con contornos móviles.

1.6 Solución de Flujo Potencial con Superficie Libre

Al aplicar la solución de la ecuación de Laplace al estudio del flujo en medio poroso con superficie libre, se obtiene el potencial Φ en todo el dominio y la solución de $\partial\Phi/\partial n$ en los contornos da el flujo. Para simplificar la discusión de los métodos numéricos se obvia el factor K' (la permeabilidad dividida entre la porosidad efectiva) que afecta el potencial en el caso de medio poroso. El potencial en la superficie es $\Phi = \eta$, o sea la elevación de la superficie libre, y $\partial\eta/\partial t$ es la velocidad vertical de la misma. El movimiento de la superficie se discretiza [52] expresando la derivada de la elevación de la superficie libre con respecto al tiempo como función de la derivada normal del potencial y considerando el ángulo que forma la superficie con la horizontal. De esta manera se obtiene una condición de contorno mixta sobre la superficie libre que expresa el potencial y su derivada en el tiempo $(k + 1) \Delta t$ en términos de los valores en el tiempo $k\Delta t$.

Para la discretización de la superficie libre, el procedimiento numérico involucra la selección de un número finito de puntos sobre el contorno móvil definido en forma discreta en el espacio. El vector normal y el desplazamiento de la superficie se obtienen por interpolación a partir de los valores en los puntos dados. Si se describe la superficie mediante métodos tradicionales, en general se necesita la construcción de una malla de cálculo y un procedimiento de búsqueda, se requiere imponer continuidad en las derivadas y se suelen presentar problemas cuando los elementos son muy alargados. Por esta razón en este trabajo se desarrolla, para interpolación sobre la superficie libre, la adaptación de los splines de placa delgada, que minimizan una medida de la curvatura, tienen todas las ventajas de las funciones de base radial y no necesitan malla de cálculo.

1.7 Objetivos del Trabajo

La investigación de tesis doctoral se centra en el desarrollo de un modelo computacional de flujo con superficie libre en medio poroso, aplicable a sistemas de aguas subterráneas parcialmente no confinados, físicamente extensos y conectados con aguas superficiales, tales como los que se encuentran en sistemas de humedales. Este es un problema numéricamente intensivo el cual requiere de técnicas avanzadas de computación. Por esto se requiere la aplicación de métodos eficientes de solución de ecuaciones diferenciales parciales, ya que la ejecución del modelo con técnicas numéricas tradicionales requeriría tiempos de ejecución excesivos del programa. Por esta razón se investiga la solución de este problema desarrollando una técnica eficiente mediante la aplicación del Método de las Soluciones Fundamentales con aceleramiento y refinamiento que lo convierten en un esquema poderoso y constituyen un aporte original al combinar el desarrollo multipolar con el método de mínimos cuadrados, y al introducir la técnica de refinamiento adaptativo como una innovación en el método de las soluciones fundamentales. Los objetivos se desglosan específicamente en los siguientes:

1. Implementación de métodos numéricos para la solución de la ecuación de Laplace, con programas ajustados para su mejor rendimiento.
 - (a) Estudio de la solución de la ecuación de Laplace en tres dimensiones mediante el método de las soluciones fundamentales por mínimos cuadrados.
 - (b) Estudio de la solución de flujo no permanente casi estático con superficie libre en medio poroso.
2. Desarrollo de métodos eficientes de solución de las ecuaciones resultantes de la aplicación del Método de las Soluciones Fundamentales por mínimos cuadrados empleando técnicas avanzadas de computación.

- (a) Desarrollo de una técnica de aceleramiento para un gran número de puntos en la discretización del contorno, ajustando el rendimiento del Algoritmo Multipolar Rápido bajo las condiciones especiales del Método de las Soluciones Fundamentales.
 - (b) Desarrollo de una técnica de refinamiento para mejorar la precisión de la solución numérica.
3. Aplicación del modelo de flujo en medio poroso con las técnicas de solución desarrolladas a casos de estudio en sistemas de interés en ingeniería hidráulica como son las aguas subterráneas y presas de tierra.

Capítulo 2

Flujo de Aguas Subterráneas

El estudio del agua subterránea es importante para la realización de obras de ingeniería y muy especialmente para el uso de dicha agua con fines de abastecimiento para satisfacer las necesidades del hombre. El desarrollo de modelos para la estimación del patrón de flujo en aguas subterráneas bajo la influencia de las mareas y niveles de agua superficiales se basa en las ecuaciones que gobiernan este movimiento tridimensional debido a las diferencias de elevación y de presión. El agua subterránea se mueve como el agua superficial pero más lento, dependiendo de la porosidad y permeabilidad del substrato. Las formaciones geológicas en que se acumula el agua subterránea y que son capaces de cederla reciben el nombre de acuíferos.

Los acuíferos sirven como conductos de transmisión y como depósitos de almacenamiento. Como conductos de transmisión transportan el agua subterránea desde las áreas de recarga, hacia lagos, pantanos y pozos. Como depósitos de almacenamiento, los acuíferos actúan suministrando agua de sus reservas para ser utilizada cuando la extracción exceda a la recarga y, a la vez, almacenando agua durante los períodos en que la recarga resulta mayor que la extracción. En este capítulo se describen los fundamentos y métodos de solución utilizados en los modelos de flujo en aguas subterráneas basados en la teoría de flujo potencial.

2.1 Características de los Acuíferos

Un acuífero es una formación geológica que contiene agua y la deja salir fácilmente. Junto a los acuíferos propiamente dichos, aparecen otras formaciones geológicas que reciben nombres de acuerdo con sus posibilidades de contener agua y de permitir su circulación, tales como los acuicludos, los acuitardos y los acuífugos.

Los acuicludos son formaciones geológicas impermeables que contienen agua, pero que no la transmiten, haciendo de este modo imposible su explotación. En este caso están las arcillas, que a pesar de contener enormes cantidades de agua (en muchos casos, más del 50% de su volumen) no la drenan por gravedad ni la dejan pasar; por consiguiente, no son aptas para la construcción en ellas de captaciones de agua subterránea. Los acuitardos son formaciones geológicas semipermeables que, conteniendo agua en gran cantidad, la transmiten muy lentamente, por lo que en estas formaciones tampoco resulta adecuado emplazar captaciones; no obstante, en determinados casos, la presencia de un acuitardo puede proporcionar a un acuífero que esté en contacto con él, una recarga vertical que puede llegar a ser importante. Las arcillas limosas y arenosas son formaciones que pueden comportarse como acuitardos. Los acuífugos son aquellas formaciones geológicas impermeables que no contienen agua ni la pueden transmitir, tales como, por ejemplo, los macizos rocosos no alterados.

No todas las formaciones geológicas poseen las propiedades que caracterizan a un acuífero, es decir, que sus intersticios o espacios huecos, sean capaces de almacenar el agua y de servirle de conductos a la vez para transmitirla, permitiendo su aprovechamiento para satisfacer las necesidades del hombre. Desde este punto de vista, el concepto de acuífero es en cierto modo relativo, ya que una formación geológica no se considerará como acuífero en un lugar donde haya otras en que sea posible captar 50 veces más agua; pero en una región árida, donde no haya otras posibilidades, esa

formación puede considerarse como un acuífero útil para resolver las necesidades de una pequeña población.

Los espacios huecos o intersticios que presentan las rocas que componen los acuíferos, pueden ser poros o vacíos intergranulares, como en el caso de rocas formadas por depósitos sedimentarios granulares consolidados o no, o fracturas, fisuras y canales de disolución. Es oportuno destacar aquí, que una porosidad alta puede ser una buena cualidad de un acuífero pero que la alta porosidad no necesariamente implica la capacidad de transmitir grandes cantidades de agua.

Los acuíferos también pueden clasificarse de acuerdo con el grado de confinamiento de las aguas que contienen, dependiendo de la distribución de la misma en los estratos. Si todos los poros de un estrato del suelo están llenos de agua, el estrato se llama zona saturada, la capa superior en la cual los poros contienen aire y agua se llama zona de aeración. Entre ambas zonas existe una franja capilar cuyo espesor depende de las propiedades del suelo, y en materiales muy finos puede tener un espesor relativamente grande, sin embargo en la mayoría de las aplicaciones de ingeniería puede ignorarse su efecto.

Los acuíferos libres son aquellos en que el agua subterránea presenta una superficie libre, sujeta a la presión atmosférica, como límite superior de la zona de saturación. Esta superficie libre se conoce como superficie freática y el nivel a que ella se eleva, respecto a otro de referencia, nivel freático. Está formado en general por un estrato permeable parcialmente saturado de agua que yace sobre otro estrato impermeable o relativamente impermeable. En la mayoría de los casos existe solamente un nivel freático, pero en algunos casos, a causa de la presencia de acuicludos o acuitardos de pequeñas dimensiones relativas, pueden existir acuíferos con niveles freáticos adicionales, llamados acuíferos colgados. En algunos acuíferos libres compuestos de partículas finas, el drenaje por gravedad de los poros puede que no sea instantáneo, de manera que entregan el

agua un cierto tiempo después de que el nivel freático baja, por lo cual se les denomina acuíferos libres con entrega retardada.

En los pozos perforados en los acuíferos libres, el agua se eleva hasta el nivel freático. Los acuíferos confinados son formaciones geológicas permeables, completamente saturadas de agua, confinadas entre dos capas o estratos impermeables o prácticamente impermeables. En estos acuíferos, el agua está sometida, en general, a una presión mayor que la atmosférica y al perforar un pozo en ellos, el agua se eleva por encima de la parte superior del acuífero hasta un nivel que se denomina nivel piezométrico. La superficie imaginaria que representa la carga piezométrica en los distintos puntos del acuífero se conoce como superficie piezométrica. En algunos casos, la superficie piezométrica puede estar por encima del nivel del terreno natural, por lo que un pozo perforado en el lugar fluirá espontáneamente como un manantial artesiano.

El flujo del agua por debajo de presas de concreto se comporta en forma similar al caso de un acuífero confinado, mientras que el comportamiento del flujo a través de presas de tierra y el drenaje del suelo saturado es semejante al de un acuífero no confinado.

2.2 Propiedades Hidráulicas de los Medios Porosos

En el comportamiento hidráulico de los acuíferos pueden distinguirse varias propiedades cuantitativas que se describen a continuación y que se utilizan para caracterizar dicho comportamiento y establecer sus leyes, lo cual puede ser utilizado para la construcción de modelos que son generalmente formulados en términos del medio continuo. Si consideramos la estructura del suelo encontramos que el sistema de poros está limitado por contornos impermeables que componen el esqueleto poroso. En el caso de arenas, están compuestas por partículas macroscópicas, que se aproximan más a un medio poroso ideal, con poros relativamente grandes, excluyendo medios con microporos o partículas

de tamaño coloidal. Aun en el medio poroso ideal el espacio de los poros no está distribuido uniformemente, sino que más bien consiste de celdas cavernosas conectadas por canales más estrechos. Los suelos naturales contienen partículas que pueden desviarse significativamente de la forma idealizada esférica y adicionalmente sus tamaños están lejos de ser uniformes. La verdadera naturaleza del flujo en los canales del medio poroso es un problema muy complejo. Es por esto que su tratamiento ha sido posible en un sentido promedio con un enfoque de medio continuo basado en la ley de Darcy. El énfasis en esta sección está en la descripción macroscópica del flujo de agua a través de medios porosos saturados. Se excluyen los efectos de capilaridad y evaporación, al igual que fenómenos químicos y electroquímicos en la superficie. El tratamiento del flujo en un nivel microscópico se deja de lado y se aplica un enfoque de medio continuo para describir el comportamiento del fluido a través del volumen poroso.

La porosidad ϵ^* , también llamada porosidad volumétrica, se define como la relación del volumen de espacios vacíos al volumen aparente o total del medio poroso. La porosidad es una cantidad adimensional que a veces se expresa en forma de porcentaje. Es necesario distinguir entre los poros que permiten al agua pasar hacia otros poros, es decir, los poros interconectados, y otros poros que son cerrados, produciendo estancamiento. Solamente los poros interconectados contribuyen al flujo de aguas subterráneas, de manera que para los efectos del flujo puede definirse una porosidad efectiva ϵ .

Se ha definido como coeficiente de almacenamiento, el volumen de agua que puede ser liberado por un prisma vertical del acuífero, de sección unitaria y de altura igual a su espesor saturado, cuando se produce un descenso unitario de la carga hidráulica (del nivel piezométrico o del nivel freático).

La conductividad hidráulica representa la mayor o menor facilidad con que el medio deja pasar el agua a través de él por unidad de área transversal a la dirección del flujo.

Como se explicará más adelante, esta facilidad se entiende en el sentido del flujo global a través del área aparente o total. La conductividad hidráulica darciana o lineal K no depende solamente de las características del medio, sino también de las del fluido (su viscosidad y peso específico) por lo que se ha establecido una relación entre K , las propiedades del fluido, y una característica intrínseca del medio que es independiente del fluido que circula a través de él. Esa característica se denomina permeabilidad intrínseca o geométrica y se representará por el símbolo k . La ecuación que relaciona K con k se puede expresar como:

$$K = \frac{k\rho g}{\mu} \quad (2.1)$$

donde ρ es la densidad del fluido, μ es la viscosidad dinámica del fluido y g es la aceleración de la gravedad. Otra propiedad utilizada para caracterizar los acuíferos es la transmisibilidad, definida como el producto del espesor saturado del acuífero h por la conductividad hidráulica.

$$T = Kh \quad (2.2)$$

2.3 Ley de Darcy y Flujo Potencial

Las ecuaciones de flujo de aguas subterráneas se simplifican considerando la ley formulada por el ingeniero francés Henry Darcy, quien la publicó por primera vez en el año 1856. Darcy reconoció que el caudal que cruza a través de una sección de una tubería es proporcional a la diferencia en altura e inversamente proporcional a la longitud, y de forma análoga concluyó en sus estudios sobre pozos de agua potable, que el caudal a través de un área dada normal a la dirección del flujo en el subsuelo es proporcional a la derivada de la altura piezométrica en dicha dirección. En forma más general, la ley

de Darcy establece una relación lineal entre la velocidad del flujo u y el gradiente de la altura piezométrica

$$\vec{u} = -K\nabla\Phi \quad (2.3)$$

donde K es la conductividad hidráulica y Φ es la altura piezométrica dada como

$$\Phi = \frac{p}{\rho g} + z \quad (2.4)$$

donde p es la presión, ρ es la densidad del fluido, g es la aceleración de la gravedad y z es la elevación. En el caso más general, la conductividad hidráulica es un tensor, pero en un medio isotrópico, K es un valor escalar y el vector de velocidad tiene la misma dirección que el gradiente de la altura piezométrica. Se puede observar directamente que para establecer la continuidad del flujo, Φ debe satisfacer la ecuación de Laplace, lo cual lleva a la solución del campo de flujo por medio de la teoría del campo potencial. Para la solución de la ecuación de Laplace en un problema de aguas subterráneas, se suelen imponer en el contorno potenciales (alturas piezométricas) que pueden estar dados en función de los niveles de las aguas superficiales, y las derivadas normales se hacen iguales a cero en los contornos impermeables.

Es necesario hacer notar que el agua fluye solamente a través de los poros, pero en general se asume que el agua pasa a través de una sección de área A en un sentido promedio. De esta manera, para encontrar la velocidad real con la cual se desplaza el fluido, en vez de utilizar el área de la sección se utilizaría el área de poros efectiva, por lo cual en un medio isotrópico resulta que la magnitud de dicha velocidad es u/ϵ .

La velocidad obtenida por la ley de Darcy es la del fluido relativa al suelo, de manera que en casos de movimiento del suelo como de subsidencia sería necesario tomar en cuenta además el movimiento de los granos del sólido. La ley de Darcy es válida en el flujo laminar, gobernado por fuerzas viscosas. En casos más generales puede definirse

una ley de conductividad no darciana en la cual la velocidad con que circula el agua subterránea es proporcional a una potencia del gradiente hidráulico.

Debe evitarse el uso de la ley de Darcy en casos muy especiales con flujos muy rápidos o con mayor separación de las partículas del suelo, y tampoco será aplicable cuando los gradientes sean muy pequeños de manera que el flujo global no llegue a iniciarse, especialmente en el caso de poros muy pequeños.

De hecho, considerando las dimensiones de los poros que ocurren en los suelos en la naturaleza, resulta que la ley de Darcy es aplicable en la mayoría de los flujos de aguas subterráneas en la práctica. Bear([2],[3]) presenta una amplia clasificación de problemas de predicción en aguas subterráneas que se pueden encontrar en la práctica. Este trabajo se centra en problemas de flujo en medio poroso saturado en un acuífero freático.

2.4 Métodos Numéricos para la Solución del Flujo y Transporte en Medio Poroso

El entendimiento físico y matemático del flujo a través de un medio poroso ha sido mejorado continuamente desde el trabajo pionero de Darcy. Para desarrollar teorías básicas y describir matemáticamente varios fenómenos relacionados con el flujo en medio poroso se han usado investigaciones experimentales de campo y analogías eléctricas. Se pueden usar varios métodos analíticos para resolver problemas simples, utilizando técnicas matemáticas tales como separación de variables, variable compleja, transformadas de Fourier y Laplace, series infinitas y otras. La mayoría de las soluciones exactas pueden aplicarse solamente en geometrías de campo muy simples, y el significado físico de algunas de dichas soluciones no es directamente conceptualizable, especialmente cuando se presenta en forma de series de integrales de funciones especiales. Referencias importantes de apoyo en este tema son los libros de Polubarinova–Kochina[58], Harr[33],

Bear [2],[3]. La solución de las ecuaciones de transporte de sustancias disueltas, ha sido también ampliamente estudiada y permite determinar la distribución y evolución de los contaminantes en las aguas subterráneas una vez determinado el campo de flujo [2].

Para obtener una solución de problemas prácticos basada en soluciones analíticas, en general se supone que el sistema puede describirse por medio de un número de segmentos de volumen en cada uno de los cuales los parámetros del modelo (porosidad, conductividad hidráulica, coeficiente de dispersión, constantes de reacción, etc.) son aproximadamente constantes. La solución analítica de las ecuaciones diferenciales se aplica para el cálculo de las velocidades y concentraciones de las sustancias dentro de cada subdominio considerando las actividades dentro del mismo e ignorando el efecto de otras más allá de los contornos de cada subdominio. El problema global se plantea estableciendo las condiciones de compatibilidad entre los distintos segmentos, y la solución se obtiene mediante la unión de las soluciones individuales. Este tipo de solución en general puede efectuarse solamente en casos muy simples, y en estos modelos pueden presentarse casos especiales tales como puntos de transición entre zonas en las cuales se aplican diferentes soluciones analíticas, para lo cual se requiere resolver sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales.

Las técnicas de solución juegan un papel significativo en el desarrollo de los modelos. Los métodos de solución van desde cálculo manual y uso de nomogramas hasta procedimientos de optimización y simulación complejos ayudados por computadoras. Se han utilizado métodos gráficos en casos en que no se disponía de soluciones analíticas, y en base al entendimiento que se obtiene al resolver el problema paso a paso, puede decirse que si el problema es suficientemente simple para ser resuelto manualmente o con la ayuda de un nomograma o una calculadora programable, este es el método más deseable. Para problemas más complejos, las soluciones del modelo pueden requerir miles de cálculos que serían demasiado costosos y tendientes a error si se intentaran usar sin

ayuda de una computadora. En las últimas décadas, con el advenimiento de equipos de computación digital rápidos, poderosos y de bajo costo, los métodos numéricos se han convertido en un medio natural para obtener soluciones rápidas y precisas. Un computador puede dar resultados para modelos relativamente complejos de optimización y simulación en una forma rápida, precisa y de bajo costo. El mayor componente del costo del modelaje por computadora suele presentarse en el desarrollo del modelo y en la calibración previa a la verificación y simulación.

La solución numérica del flujo en medio poroso ha alcanzado un gran desarrollo que permite determinar de una manera confiable el patrón de flujo y concentración en un dominio fijo. Una porción substancial de la literatura sobre modelos de simulación de flujo y calidad del agua está dedicada a los procedimientos de solución. Muchos modelos de computadora usados en el presente incluyen el procedimiento de solución en la documentación del programa. Aun al usar un programa de computadora bien documentado, es importante entender las limitaciones de los procedimientos de solución al definir las dimensiones de los segmentos de volumen de un acuífero y otros parámetros que pueden afectar la estabilidad y precisión de las soluciones del modelo.

Las ecuaciones de un modelo forman un sistema de ecuaciones diferenciales parciales que representan las propiedades de almacenamiento y transporte. El procedimiento de solución de dichas ecuaciones puede basarse en soluciones analíticas, o en métodos de solución numérica aproximada, tales como el de diferencias finitas o el de elementos finitos, descritos en textos de referencia sobre solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales como el de Lapidus y Pinder[49]. Pinder y Gray[57], Huyakorn y Pinder[36] presentan aplicaciones de dichos métodos al flujo de aguas subterráneas, incluyendo referencias extensivas de otros autores en estos temas. Más recientemente se ha incrementado el uso de las técnicas de ecuaciones integrales para la solución de las ecuaciones de flujo y dispersión, como alternativa frente a los métodos basados en el

dominio, con una ventaja fundamental que resulta de la reducción de la dimensionalidad del problema.

2.4.1 Método de Diferencias Finitas.

El método de diferencias finitas se ha utilizado tradicionalmente para resolver ecuaciones de flujo y calidad del agua. La amplia difusión de su uso se debe principalmente a su simplicidad conceptual y a su facilidad de programación en un computador, ya que en este método las ecuaciones diferenciales se transforman directamente en ecuaciones aproximadas en diferencias finitas. En términos generales los pasos a seguir para obtener la solución numérica son: (1) Seleccionar un método de diferencias finitas adecuado para este tipo de ecuaciones; (2) Discretizar las ecuaciones diferenciales; (3) Resolver el sistema de ecuaciones algebraicas así obtenido.

En el proceso de discretización de las ecuaciones diferenciales por medio de diferencias finitas, las variables dependientes que describen el estado del sistema se consideran definidas en un número finito de puntos o nodos de la *red computacional* dentro del dominio a considerar, cuyas dimensiones están dadas por el número de variables independientes. Los valores nodos están identificados mediante un conjunto de índices (ej. $\Phi_{i,j}$), relacionados con las coordenadas espaciales y temporal de los nodos por medio de los *intervalos de discretización* en cada dimensión (ej. $\Delta x, \Delta y$). El conjunto de nodos en los cuales están definidos los valores de las variables a usarse en la aproximación de las derivadas parciales y sus coeficientes en las ecuaciones diferenciales del modelo, forma la *molécula computacional* de un esquema de diferencias finitas. De esta manera, la solución de la ecuación de Laplace en dos dimensiones puede expresarse en forma simple mediante un esquema centrado

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \frac{\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} + O(\Delta x^2 + \Delta y^2) = 0 \quad (2.5)$$

Al aplicar el esquema de diferencias finitas sobre los puntos de la malla, con un conjunto dado de condiciones de contorno expresadas también en forma aproximada, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales para cuya solución puede utilizarse un método iterativo como el de Gauss-Seydel. La aplicación clásica del método de diferencias finitas a la solución de un problema de derivadas parciales en dos dimensiones involucra la discretización del dominio de cálculo mediante una malla de celdas cuadradas o rectangulares de dimensiones fijas. Si se refina la malla, el dominio numérico dará una mejor representación del dominio físico; sin embargo, esto resultará en un aumento del número de puntos o nodos de cálculo, y consiguientemente se necesitará más memoria y mayor tiempo de computación, por lo cual el método de diferencias finitas presenta grandes limitaciones en su aplicación a dominios de geometría irregular.

2.4.2 Método de Elementos Finitos.

Si el dominio físico es geoméricamente irregular, es preferible usar el *Método de Elementos Finitos*. En contraste con los esquemas de diferencias finitas en los cuales el dominio de interés se sustituye por un conjunto de puntos discretos, en este método el dominio se subdivide en segmentos o subdominios a los cuales se refiere el término *elementos*. Todos los balances son efectuados directamente sobre el elemento computacional, el cual puede tener una forma arbitraria.

Para construir el modelo de una geometría compleja, se utiliza una representación basada en formas geométricas simples, siendo usados frecuentemente elementos cuadrados, rectangulares o triangulares, los cuales pueden también tener lados curvos. En general se elige un conjunto de puntos en el dominio unidos por trozos descritos por funciones simples. Una función aplicada en el dominio se define por conveniencia usando el mismo conjunto de puntos y generalmente el mismo conjunto de funciones de interpolación.

Una virtud esencial del método de elementos finitos es que permite una discretización muy flexible, de forma que puede reducirse notablemente el número de elementos necesarios para una representación adecuada del fenómeno estudiado utilizando elementos de mayor tamaño en las zonas del dominio numérico en las cuales se espera observar mayor uniformidad en los valores de las variables del problema, tales como las velocidades del flujo y concentraciones de las sustancias. Además la forma y orientación de los elementos puede adaptarse mejor a un contorno irregular, de donde resulta un mejor tratamiento de las condiciones de contorno.

En el método de elementos finitos, la variación de las variables en un elemento se representa en función de valores discretos especificados en los nodos, los cuales suelen ubicarse en el centro de los lados del elemento y en el centroide. La función incógnita, es representada dentro del elemento por un polinomio interpolador el cual es continuo dentro del elemento, así como sus derivadas hasta un orden especificado. Generalmente, la función de interpolación es de un orden de continuidad más bajo entre elementos que dentro de cada elemento, de forma que el bloque constitutivo fundamental en el método es el subdominio o elemento. Una formulación conceptualmente simple puede obtenerse usando el método de los residuos ponderados. En este método la función deseada $u(\cdot)$ es reemplazada por una aproximación en serie finita $\hat{u}(\cdot)$:

$$\hat{u}(\cdot) = \sum_{j=1}^N U_j \mathbf{g}_j(\cdot) \quad (2.6)$$

En general, el conjunto de funciones $\mathbf{g}_j(\cdot)$, $j = 1, 2, \dots, N$, escogidas de forma que satisfacen algunas de las condiciones de contorno impuestas en el problema, puede definirse tanto en el dominio espacial como temporal, y los U_j son coeficientes indeterminados. Estas funciones suelen denominarse funciones de forma, funciones de base o funciones de interpolación. Se desea luego satisfacer aproximadamente las ecuaciones diferenciales parciales del sistema. La sustitución de la función $\hat{u}(\cdot)$ en la ecuación diferencial

da como resultado un residuo $R(\cdot)$. Los coeficientes indeterminados deben entonces seleccionarse de forma que este residuo sea minimizado en cierto sentido. Un esquema directo podría efectuar la integral de $R(\cdot)$ igual a cero. Se introducen entonces funciones de ponderación $w_i(\cdot)$, y haciendo la integral de cada residuo ponderado igual a cero, se obtiene un conjunto de N ecuaciones independientes. Dependiendo de la definición de las funciones de ponderación se obtienen múltiples esquemas. La aplicación del teorema de Green a las ecuaciones obtenidas de esta manera permite acomodar ciertas condiciones de contorno directamente en el conjunto de ecuaciones integrales.

Al menos en teoría, este sistema de ecuaciones puede resolverse para las N incógnitas. La solución del sistema de ecuaciones suele acelerarse mediante técnicas que aprovechan la estructura en banda o dispersa de la matriz del sistema. En la aplicación del método de elementos finitos se ha llegado a un alto desarrollo de las técnicas de solución de las ecuaciones, aunque su aplicación no pueda efectuarse en forma tan directa como el método de diferencias finitas. El actual grado de desarrollo de técnicas numéricas para la solución de sistemas de ecuaciones con matrices grandes dispersas documentado en el área de computación estadística y matemática permite obtener soluciones de la ecuación de Laplace para sistemas grandes, por lo cual estos métodos adecuadamente seleccionados y con algunas modificaciones permiten resolver sistemas amplios de acuíferos.

Los conceptos de refinamiento de mallas, basados en estimados de error a posteriori, han sido utilizados con éxito en múltiples aplicaciones del método de elementos finitos. Rank y Werner [64] demuestran la efectividad de una técnica de refinamiento adaptativo para mejorar la precisión en el cálculo de flujo potencial bidimensional con superficie libre, lo cual es importante para el caso que nos ocupa.

2.4.3 Método de Elementos de Frontera

El método de elementos de frontera (BEM) es un método numérico para solución de las ecuaciones integrales de frontera basado en un procedimiento de discretización, el cual es en cierta forma similar al método de elementos finitos, pero se efectúa solamente sobre el contorno del problema. En general, se expresa el problema mediante una ecuación integral equivalente a la ecuación diferencial parcial que se desea resolver, por medio de la representación de Green correspondiente (método directo). Las integrales de los núcleos en la representación de Green se expresan así en términos de una suma ponderada de las singularidades que se puede representar como el producto de una matriz de soluciones fundamentales por un vector de densidades o intensidades de fuentes, que son las incógnitas en la formulación integral del problema de valor de frontera.

Alternativamente, en un BEM indirecto la solución se presenta en términos de una distribución continua de soluciones singulares de la ecuación diferencial parcial sobre la frontera del problema, y las incógnitas son las densidades superficiales ficticias de las soluciones singulares. De esta manera la ecuación integral obtenida satisface exactamente la ecuación que gobierna el campo, y se busca satisfacer aproximadamente las condiciones impuestas en la frontera.

El BEM se ha extendido en muchas áreas del análisis en ingeniería. El BEM puede reducir el esfuerzo computacional a través de una reducción de la dimensionalidad, y es muy adecuado para manejar algunos problemas de flujo en medio poroso, particularmente con contornos móviles.

La implementación computacional del BEM se basa en rutinas que efectúan la integración y el ensamblaje de la matriz. Para la solución de la ecuación de Laplace tridimensional

$$\nabla^2\Phi = 0 \tag{2.7}$$

que gobierna el potencial Φ en un dominio dado, dichas rutinas calculan la forma discreta de las integrales que surgen al aplicar la colocación al planteamiento de la ecuación de Laplace en forma de ecuación integral. Las expresiones de las integrales se obtienen aproximando los contornos, por ejemplo, mediante elementos simples triangulares curvos, y aproximando las funciones en el contorno mediante una constante en cada elemento. Los operadores integrales de Laplace definidos como

$$\{L\mu\}_\Gamma \equiv \int_\Gamma \Phi^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mu(\mathbf{y}) dS_y \quad (2.8)$$

$$\{M\mu\}_\Gamma \equiv \int_\Gamma \frac{\partial \Phi^*}{\partial n_q}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mu(\mathbf{y}) dS_y \quad (2.9)$$

donde Γ es el contorno, \mathbf{n}_q es el vector unitario normal a Γ en \mathbf{y} , $\mu(\mathbf{y})$ es una función de densidad, $\Phi^*(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ es la solución fundamental o función de Green para la ecuación de Laplace

$$\Phi^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{4\pi r} \quad (2.10)$$

donde $r = |\mathbf{r}|$, $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$.

A fin de deducir las formas discretas de las integrales, Γ se aproxima por un conjunto de n elementos $\tilde{\Gamma} = \sum_{j=1}^n \Delta \tilde{\Gamma}_j$. La densidad en el contorno μ se sustituye por su equivalente sobre el contorno aproximado $\tilde{\Gamma}$. La función se sustituye luego por una constante sobre cada elemento. Las integrales anteriores expresadas con los operadores L y M son entonces expresadas como productos matriciales y la fórmula de representación integral para la ecuación de Laplace se convierte en:

$$\frac{1}{2}\Phi + \mathbf{M}\Phi = \mathbf{L}\mathbf{q} \quad (2.11)$$

o

$$\left(\frac{1}{2}\mathbf{I} + \mathbf{M}\right) \Phi = \mathbf{L}\mathbf{q} \quad (2.12)$$

En cada caso particular de división del contorno, las integrales son calculadas utilizando diferentes subrutinas dependiendo de la ubicación del punto de colocación. Cuando el punto de colocación se encuentra fuera del elemento, las integrales serán todas regulares, y por lo tanto tratables mediante fórmulas de cuadratura estándar. Sin embargo, para las diagonales de las matrices \mathbf{L} y \mathbf{M} , o sea en el caso en que el punto de colocación está situado sobre el elemento, la evaluación de las integrales generalmente requiere un tratamiento especial, lo cual puede efectuarse, por ejemplo, dividiendo el triángulo en partes y efectuando la integración en coordenadas polares.

Al obtener la solución numérica por un método de integral de frontera directo, la principal ventaja es que no se necesita construir una malla sobre dicho dominio, sino solamente sobre el contorno, con la desventaja del costo computacional de evaluar las integrales de frontera sobre dicho contorno. Una alternativa frente a este enfoque es el Método de las Soluciones Fundamentales, donde la solución se aproxima como una sumatoria de fuentes ubicadas fuera del dominio, como se explicará en el capítulo 3. El actual grado de desarrollo de técnicas iterativas para la solución de sistemas de ecuaciones con matrices grandes y las técnicas para problemas de N -partículas en el área de física computacional, permite obtener de esta manera soluciones de la ecuación de Laplace para sistemas grandes, como se explicará en el capítulo 4.

2.5 Flujo en Medio Poroso No Confinado

El BEM en general tiene muchas ventajas para la solución de la ecuación de Laplace en 2 y 3 dimensiones. Las ecuaciones se complican por la presencia de la superficie libre o capa freática. Dado que parte de los valores en la frontera deben aplicarse sobre dicha

superficie, el problema no puede resolverse sin conocer la ubicación de la misma, y por otra parte dicha ubicación es parte de la solución del problema. La ubicación de la superficie libre es un problema desafiante en muchas áreas de la mecánica de fluidos, y recientemente el cálculo para régimen permanente ha sido planteado como un problema de optimización [51]. En este trabajo se obtiene la posición de la superficie libre a partir de las ecuaciones en flujo no permanente casi estático.

Al aplicar la solución de la ecuación de Laplace al estudio del flujo en medio poroso con superficie libre, se obtiene el potencial Φ en todo el dominio y la solución de $\partial\Phi/\partial n$ en los contornos. La magnitud de la velocidad real con la cual se desplaza el fluido es u/ϵ . El potencial en la superficie es $\Phi = \eta$, o sea la elevación de la superficie libre, y $\partial\eta/\partial t$ es la velocidad vertical de la misma. De esta manera, para estudiar el movimiento de la superficie, se expresa [52] la derivada de la elevación de la superficie libre con respecto al tiempo como función de la derivada normal del potencial y considerando el ángulo que forma la superficie con la horizontal. De esta manera se obtiene una condición de contorno mixta sobre la superficie libre. En un capítulo posterior se presenta la discretización de las ecuaciones y su solución por el método de las soluciones fundamentales.

Capítulo 3

El Método de las Soluciones Fundamentales

El Método de las Soluciones Fundamentales (MSF) constituye uno de los enfoques más intuitivos para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales elípticas. En este método se representa una solución aproximada en forma de una superposición lineal de funciones de fuente (soluciones fundamentales) ubicadas fuera del dominio del problema. Dado que la solución fundamental satisface la ecuación diferencial en todo punto excepto el punto de fuente, se infiere que esta representación satisface exactamente la ecuación que gobierna el campo y se desea entonces satisfacer aproximadamente las condiciones de contorno, impuestas sobre un conjunto de puntos del contorno.

3.1 Antecedentes sobre el MSF

Uno de los trabajos pioneros sobre el MSF es el de Kupradze y Aleksidze [48], el cual fue después expandido por Bogomolny [7]. Golberg y Chen [18] presentan una revisión del MSF, en la cual este método es relacionado con un método BEM indirecto cuya aproximación numérica para la representación de simple capa se reduce a una superposición lineal de soluciones fundamentales. En el enfoque de BEM indirecto regular de simple capa, la solución del problema se representa en términos de un potencial de simple capa, donde la incógnita es una densidad que se distribuye sobre una superficie auxiliar

\widehat{S} que encierra el dominio $\overline{\Omega}$, es decir, incluyendo el contorno de Ω (la superficie S). Dado que en dicha representación el núcleo del potencial de simple capa (la solución fundamental) es completamente regular sobre los puntos en la superficie S , se deduce que se pueden utilizar reglas estándares de cuadratura para aproximar el potencial de superficie cuando se evalúa sobre cualquier punto del contorno en S , cualquiera que sea la función de interpolación utilizada. Por lo tanto, la aproximación numérica de dicha representación de simple capa se reduce a una superposición lineal de soluciones fundamentales ubicadas fuera del dominio del problema, es decir, el MSF.

Aunque el método es útil para una amplia clase de problemas, la discusión en el presente trabajo se limita a la solución de la ecuación de Laplace. La solución del problema interior es aproximada por una combinación lineal de fuentes ubicadas fuera del dominio del problema [37]. Los coeficientes de las soluciones fundamentales con coordenadas preestablecidas son determinados en general resolviendo un sistema de ecuaciones que se obtiene imponiendo las correspondientes condiciones de contorno del problema. Esto puede efectuarse por medio de *colocación directa*, para el cual se resuelve un sistema con un número de ecuaciones lineales igual al número de incógnitas. En este enfoque, se han propuesto en la literatura reglas empíricas para las posiciones de los puntos del contorno y los puntos de fuente [45]. Alternativamente, las condiciones de contorno pueden satisfacerse *en el sentido de mínimos cuadrados* con un número de fuentes menor que el número de puntos donde se especifican las condiciones de contorno. Este es el enfoque adoptado por Bogomolny en [7] y existe cierta indicación numérica de que este enfoque puede ser el más eficiente [30].

La implementación del MSF es en apariencia bastante directa. Es necesario solamente especificar los puntos de fuente fuera del dominio del problema y los puntos de dato o puntos del contorno sobre los límites del dominio, y luego resolver el sistema de ecuaciones lineales resultante. Sin embargo, en su aplicación numérica hay varios

aspectos que requieren atención especial. De éstos, algunos de los más relevantes son la ubicación y número de las fuentes y puntos del contorno, además de la convergencia y estabilidad del esquema.

Generalmente, ha habido dos enfoques para escoger los puntos de fuente, fijo y adaptativo. A partir de experiencia práctica y ciertos trabajos analíticos, particularmente en dos dimensiones (ver [12], [43] y [44]), se ha observado que la precisión de la aproximación mejora a medida que las fuentes se alejan del contorno. Cuando se utiliza el enfoque de distribución fija, se recomienda distribuir uniformemente los puntos sobre una circunferencia grande que encierre el dominio original del problema, en \mathbb{R}^2 , o una esfera grande, en \mathbb{R}^3 (para más detalles ver [18]), donde R , el radio del círculo o de la esfera, se escoge como cinco veces la dimensión característica del dominio del problema, cuando se trabaja con condiciones de Dirichlet solamente, pudiendo ser menor cuando se trabaja con casos de Neumann. Este valor fijo de R se recomienda porque el sistema de ecuaciones resultante del MSF puede hacerse altamente mal condicionado al aumentar R ([19], [46] y [47]). Sin embargo se ha observado que a pesar del mal condicionamiento, la precisión de la solución numérica es altamente insensible ([19], [20] y [7]). Golberg y Chen [18] reportaron que en estos casos las rutinas de solución directas, como la eliminación Gaussiana, pueden usarse efectivamente, aun cuando el número de condición de la matriz sea muy grande, haciendo caso omiso de la advertencia de singularidad de la matriz en la rutina numérica.

Tradicionalmente en análisis numérico la estabilidad del esquema de solución se mide por el número de condición de la matriz (la relación entre el máximo y el mínimo de los valores singulares de la matriz). El mal condicionamiento, el cual resulta en la amplificación de errores en los datos, suele estar indicado por valores muy pequeños del mínimo valor singular. Se sabe que en algunos casos la consideración solamente del número de condición resulta en una subestimación de la estabilidad. En [9] se muestra

que una comprensión completa de la estabilidad numérica requiere el conocimiento del conjunto completo de valores singulares de la matriz, y no solamente de sus valores máximo y mínimo. Kitagawa ([46], [47]) demuestra que tal es el caso cuando se utiliza el MSF.

Análisis de convergencia del MSF para la solución de la ecuación de Laplace en dos dimensiones fueron considerados por Cheng [12], Katsurada y Okamoto [43] y Katsurada [44]. En dichos artículos se demuestra que cuando la superficie donde se colocan las fuentes es suave, y las condiciones de contorno son funciones suaves, el MSF converge exponencialmente a la solución del problema de la ecuación diferencial parcial. Aunque no existe un análisis teórico equivalente disponible para los problemas tridimensionales homólogos, Golberg y Chen [19] presentan un análisis heurístico, en el cual sugieren que se puede esperar un comportamiento convergente similar en problemas tridimensionales.

Dado que el Método de las Soluciones Fundamentales (MSF) tiene una formulación simple basada en la superposición de singularidades (fuentes) ubicadas fuera del dominio del problema, y no requiere la construcción de una malla para la distribución de los puntos, ofrece la posibilidad de soluciones más precisas y rápidas, con ventajas para problemas de flujo potencial con contornos móviles tales como el que nos ocupa en este trabajo. El planteamiento del problema interior de Laplace se presenta a continuación [37].

3.2 Planteamiento de la Solución numérica por medio del MSF

En esta sección se describe el método de las soluciones fundamentales (MSF) para problemas interiores de la ecuación de Laplace. Dado un dominio $\Omega \in \mathfrak{R}^3$, cuyo contorno S es una superficie cerrada simple, se debe encontrar una función armónica $\Phi(P)$ con

valores impuestos en la frontera S , es decir, se deben satisfacer las siguientes ecuaciones:
la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \Phi(P) = 0, P \in \Omega \quad (3.1)$$

y las condiciones de contorno sobre S , donde $S = S_1 \cup S_2$, las cuales pueden ser de dos tipos: las condiciones de contorno de Dirichlet, en las cuales se impone un potencial

$$\Phi(P) = f(P), P \in S_1. \quad (3.2)$$

y las condiciones de contorno de Neumann, donde se impone la derivada normal del potencial

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n}(P) = g(P), P \in S_2. \quad (3.3)$$

Sea $\Phi^*(x, \xi)$ la solución fundamental de la ecuación de Laplace. Esta solución fundamental o función de fuente se expresa para problemas tridimensionales como

$$\Phi^*(P, Q) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|P - Q|} \quad (3.4)$$

Para el problema homólogo en \mathfrak{R}^2 , la solución fundamental es

$$\Phi^*(P, Q) = -\frac{1}{2\pi} \ln |P - Q| \quad (3.5)$$

Al obtener la solución numérica por un método de integral de frontera directo, se tiene una ecuación integral para $\frac{\partial \Phi}{\partial n}$, la derivada normal desconocida sobre S_1 , y para el potencial desconocido Φ sobre S_2 . Se resuelve la ecuación integral calculando valores de las incógnitas sobre el contorno S y luego Φ puede evaluarse en el interior de Ω . La principal ventaja es que no se necesita construir una malla sobre Ω . Una desventaja importante es el costo computacional de evaluar las integrales de frontera requeridas sobre S .

Como alternativa frente al BEM directo, el enfoque indirecto regular del BEM representa la solución de un problema interior en términos del potencial de simple capa con densidad desconocida σ :

$$\Phi(P) = \int_{\widehat{S}} \Phi^*(P, Q) \sigma(Q) dS \quad (3.6)$$

donde \widehat{S} es el contorno de un dominio que contiene a $\overline{\Omega}$.

Representando la densidad incógnita σ en términos de un conjunto completo de funciones $\varphi_j(Q)$ sobre \widehat{S} , es decir

$$\sigma(Q) = \sum_{j=1}^n c_j \varphi_j(Q); \quad Q \in \widehat{S} \quad (3.7)$$

el potencial de simple capa anterior puede aproximarse como

$$\Phi(P) = \sum_{j=1}^n c_j \int_{\widehat{S}} \Phi^*(P, Q) \varphi_j(Q) dS \quad (3.8)$$

En general, se necesita evaluar numéricamente las integrales

$$\int_{\widehat{S}} \Phi^*(P, Q) \varphi_j(Q) dS \quad 1 \leq j \leq n \quad (3.9)$$

pero dado que en este enfoque los puntos de colocación P , son siempre diferentes de los puntos de fuente Q , donde $P \in \overline{\Omega}$ y $Q \in \widehat{S}$, las integrales anteriores son no-singulares y por lo tanto pueden evaluarse por medio de reglas estándares de cuadratura,

$$\int_{\widehat{S}} \Phi^*(P, Q) \varphi_j(Q) dS \approx \sum_{l=1}^N \varpi_l \Phi^*(P, Q_l) \varphi_j(Q_l) \quad (3.10)$$

En consecuencia, el potencial de simple capa anterior puede representarse como

$$\widehat{\Phi}(P) = \sum_{j=1}^n b_j \Phi^*(P, Q_j) \quad (3.11)$$

donde

$$b_l = \varpi_l \sum_{j=1}^n c_j \varphi_j(Q_l) \quad (3.12)$$

La superposición anterior de soluciones fundamentales fuera del dominio del problema, dada en la ecuación (3.11), se conoce como el método de las soluciones fundamentales, MSF, donde la solución $\Phi(P)$ se aproxima como la sumatoria de N fuentes ubicadas en puntos Q_j fuera del dominio Ω (ver figura 3.1). Esta ecuación se deduce en forma natural a partir de la ecuación (3.6); sin embargo suele ser necesario agregar un término constante en particular en el caso de dos dimensiones, en el cual este término se requiere para una representación completa.

$$\widehat{\Phi}(P) = b_0 + \sum_{j=1}^N b_j \Phi^*(P, Q_j) \quad (3.13)$$

Como puede observarse, un valor constante es siempre una solución de la ecuación de Laplace.

A partir de este análisis, podemos decir que el MSF es una técnica perteneciente a la clase de métodos de frontera, la cual es aplicable cuando se conoce una solución fundamental de la ecuación diferencial parcial que se desea resolver. En consecuencia el MSF es en cierto modo similar al BEM, con ventajas adicionales en lo que respecta a su simplicidad de formulación y el hecho de que la distribución de los puntos prácticamente no requiere la construcción de una malla de cálculo, por lo cual ofrece la posibilidad de soluciones precisas y rápidas. Estas ventajas hacen de este método un candidato ideal para la solución de problemas de contornos móviles [10].

Dado que la solución fundamental satisface la ecuación diferencial, $\widehat{\Phi}(P)$ automáticamente será armónica. Una buena aproximación para $\Phi(P)$ se obtendrá entonces imponiendo las condiciones de contorno en M puntos P_i sobre S . La expresión de $\widehat{\Phi}$ o de su derivada normal $\frac{\partial \widehat{\Phi}}{\partial n}$ se hacen entonces iguales a los valores dados por las condiciones de contorno correspondientes. De esta manera se obtiene un sistema de M ecuaciones lineales con N incógnitas b_j . Una vez resuelto el sistema de ecuaciones, se

puede calcular el potencial y sus derivadas direccionales en cualquier punto de $\bar{\Omega}$, sustituyendo las intensidades b_j en la expresión para el potencial $\hat{\Phi}(P)$ dada en la ecuación (3.13), evaluada en el punto deseado.

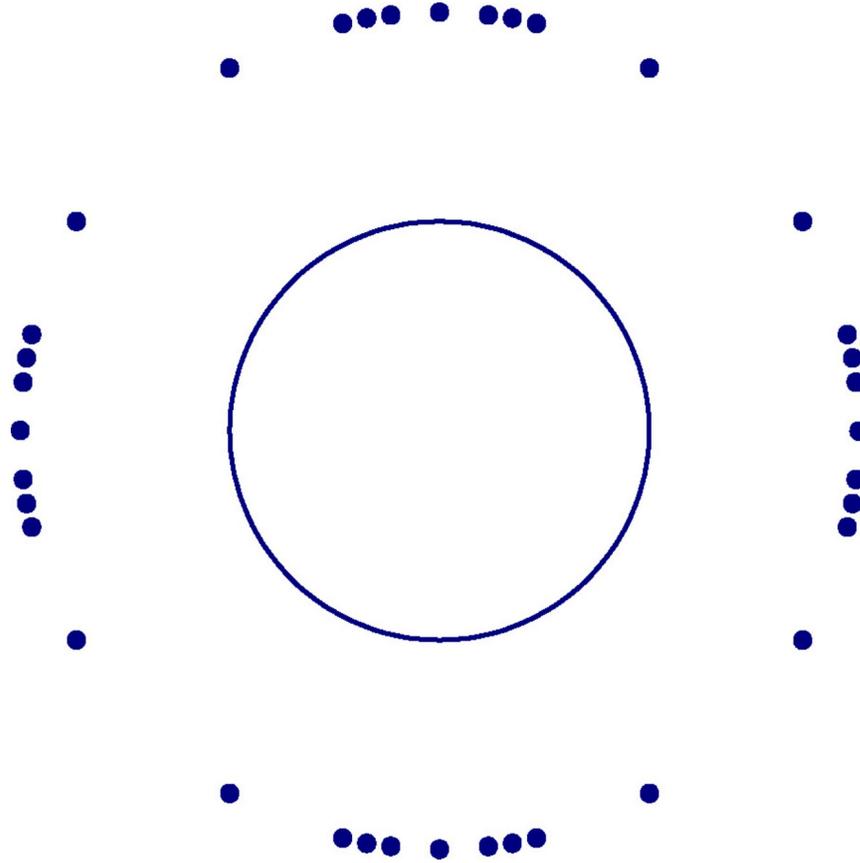


Figura 3.1: Representación bidimensional de la discretización en el método de las soluciones fundamentales.

3.3 Sistema de Ecuaciones Lineales del MSF

El sistema de ecuaciones lineales obtenido mediante la imposición de las condiciones de contorno se puede expresar en forma matricial como

$$\mathbf{X}\mathbf{b} = \mathbf{y} \tag{3.14}$$

donde \mathbf{y} es un vector de valores conocidos de los potenciales y derivadas normales en los puntos del contorno, y \mathbf{X} es la matriz de coeficientes de las intensidades de fuente desconocidas \mathbf{b} , es decir valores de $\Phi^*(P_i, Q_j)$ y $\frac{\partial \Phi^*(P_i, Q_j)}{\partial n}$. Los coeficientes de las soluciones fundamentales o intensidades de las fuentes b_j se determinan resolviendo el sistema de M ecuaciones lineales con N incógnitas. Para obtener el valor de la constante b_0 en el caso de condiciones de Dirichlet se agrega a la matriz \mathbf{X} un vector columna \mathbf{x}_0 con sus elementos iguales a 1. Para el caso de condiciones de Neumann, los elementos correspondientes en \mathbf{x}_0 son iguales a 0. Esta solución puede obtenerse mediante dos enfoques diferentes: el de *colocación directa* y el de *mínimos cuadrados*. El MSF por colocación directa corresponde al caso en el cual $M = N$, mientras que el caso sobredeterminado con $M > N$, da origen al MSF por mínimos cuadrados.

3.3.1 Enfoque de Colocación Directa

En el MSF por colocación directa el número de ecuaciones lineales es igual al número de incógnitas $M = N$. En el caso del problema interior de Laplace con condiciones de contorno de Dirichlet, en el método de colocación directa los potenciales sobre el contorno son forzados a satisfacerse en forma exacta, pero se hacen presente errores en los valores calculados para puntos internos, y las desviaciones con respecto a la solución exacta en el dominio son fácilmente identificables al calcular las derivadas normales sobre los puntos del contorno y compararlas con la solución analítica. Los errores ocurren de una manera inversa cuando se imponen las derivadas normales. Es importante hacer notar que para cualquier distribución de puntos del contorno y dado un número de incógnitas fijo, existe un número ilimitado de ubicaciones posibles para las fuentes. Algunas posiciones de los puntos de fuente pueden originar oscilaciones físicamente irreales en la solución numérica. El error debido a la solución del sistema lineal depende básicamente de la rutina usada, y puede suponerse insignificante con

respecto al error debido a la discretización, es decir el error producido por la incapacidad de las posiciones prefijadas de las fuentes para representar adecuadamente el campo.

3.3.2 Enfoque de Mínimos Cuadrados

Como alternativa frente a la solución anterior, el sistema de ecuaciones sobredeterminado con $M > N$, da origen al MSF por mínimos cuadrados. En este caso el número de fuentes es menor que el número de puntos del contorno y las condiciones impuestas no se satisfacen exactamente. Premultiplicando por la transpuesta de la matriz de coeficientes se obtiene un sistema de N ecuaciones lineales con N incógnitas llamadas *ecuaciones normales*:

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b} = \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (3.15)$$

En este caso aparecen errores tanto en los potenciales como en las derivadas normales, y hay un cierto grado de flexibilidad en el balance del error sobre los puntos del contorno, el cual puede mejorarse ajustando tanto las intensidades como las posiciones de las fuentes, lo cual juega un papel importante en la implementación de este enfoque, el cual se utiliza en el presente trabajo y se describirá con más detalle en un capítulo posterior.

3.4 Solución de los Sistemas de Ecuaciones

En años recientes se ha alcanzado un progreso sustancial en el desarrollo de métodos numéricos para solución de sistemas de ecuaciones lineales y para problemas de mínimos cuadrados. Debido al incremento de la capacidad de procesamiento de datos, se resuelven ahora problemas de gran tamaño en forma rutinaria. El vector de solución puede obtenerse con el cálculo de la matriz inversa en forma explícita o sin ella.

3.4.1 Solución Directa

La solución mediante el almacenamiento y transformaciones de la matriz de coeficientes \mathbf{X} , ya sea con el cálculo explícito de la matriz inversa o efectuando operaciones con el vector de términos independientes \mathbf{y} para obtener el vector de solución \mathbf{b} , puede efectuarse mediante variadas rutinas de computación matricial ([60], [24]), mediante métodos directos de solución tales como la descomposición LU o eliminación de Gauss–Jordan. Para la solución de las ecuaciones normales (3.15), en los problemas de mínimos cuadrados, suelen preferirse métodos específicamente diseñados para matrices simétricas positivas definidas tales como la descomposición de Cholesky. Una ventaja de este método es que si se tiene la factorización de una matriz, al agregar una incógnita, solamente se necesita trabajar con una fila adicional.

Sin embargo la solución de los problemas de mínimos cuadrados directamente a partir de las ecuaciones normales es más bien susceptible al error de redondeo. Uno de los problemas más importantes en la aplicación de las ecuaciones normales para obtener una aproximación de mínimos cuadrados de un sistema sobredeterminado de ecuaciones algebraicas lineales como el que resulta de la ecuación (3.14), es que al calcular el producto $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, la precisión de la solución se verá afectada por un número de condición muy alto, lo cual puede ser crítico para el tipo de problema considerado en este trabajo. Técnicas alternativas como la descomposición QR de la matriz \mathbf{X} no involucran el cálculo explícito del producto $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, reduciendo de esta manera el error en la solución. Los esquemas que involucran factorización o reflexión de la matriz \mathbf{X} pueden evitar la pérdida severa de precisión debida al mal condicionamiento de $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, con un costo de aproximadamente el doble de operaciones aritméticas y mucha más memoria. De estos enfoques alternativos, Golub [24] presenta el que probablemente es uno de los más precisos. Golub reconoció que por medio de aplicaciones de transformación de Householder, las matrices sucesivamente reducidas son calculadas con

suficiente precisión.

En álgebra computacional se sabe que la descomposición en valores singulares (SVD) nos da la manera probablemente más precisa para determinar numéricamente el rango de una matriz tal como las que resultan del sistema de ecuaciones (3.14). Este método descompone la matriz original como el producto de tres matrices, una de las cuales es una matriz diagonal cuyos elementos tienen valores no negativos, que son los valores singulares. El rango se determina como el número de valores singulares diferentes de cero. En la práctica será necesario descartar valores pequeños, lo cual puede parecer paradójico, dado que esto significa descartar una combinación lineal del sistema de ecuaciones que se está resolviendo, pero de hecho esta es una combinación que está contaminada por errores de redondeo. Si cualquier valor singular se acerca a cero, esto indica que hay poco error causado al omitir los modos asociados, pero debe tenerse cuidado al establecer el valor umbral debajo del cual los valores singulares se hacen iguales a cero. Por otra parte, los valores singulares grandes definirán aquellos modos que sean más dominantes. Además, las rutinas del SVD producen una solución que es la mejor aproximación, en el sentido de mínimos cuadrados, de sistemas sobredeterminados de ecuaciones, sin tener que tratar con las ecuaciones normales.

En muchos casos las ecuaciones normales son casi singulares, dando como resultado parámetros ajustados en un balance muy frágil, cuyos efectos se anulan entre sí casi exactamente, al evaluar la función ajustada. Además, el SVD arregla el problema del redondeo, de manera que se suele recomendar para problemas de mínimos cuadrados en general. Sin embargo, para sistemas grandes, el procedimiento de cálculo del SVD es computacionalmente costoso. En un capítulo posterior de este trabajo se estudia en más detalle el aspecto del condicionamiento de la matriz y se muestra un enfoque de solución diferente.

3.4.2 Solución Iterativa

Los esquemas indirectos de solución son principalmente utilizados para resolver sistemas con matrices grandes y dispersas en casos en que los métodos directos como la eliminación gaussiana son extremadamente costosos en memoria y tiempo de cálculo. A medida que se consideran problemas más grandes y el costo de la solución de la matriz empieza a dominar, se pueden obtener ciertas ventajas con el uso de técnicas de solución indirectas: la primera es un posible mejoramiento en el tiempo de solución en comparación con los métodos directos en el caso de que se logre una buena convergencia, y la segunda reside en el gran consumo de memoria que puede evitarse si el costo de calcular las funciones es menor que el de almacenar las matrices, es decir si se puede evitar la manipulación explícita de la matriz. Björck [4] examina varios métodos directos e iterativos para problemas de mínimos cuadrados. Entre estos, el método de los gradientes conjugados ha sido ampliamente aplicado en aplicaciones de los métodos de elementos finitos y de elementos de frontera con enfoque de mínimos cuadrados, pero su convergencia depende de la escogencia de un *precondicionador* adecuado. Si las matrices son mal condicionadas, el método LSQR [61] se espera que sea más confiable y estable, con un costo de más almacenamiento y cálculos en cada iteración.

Recientemente se ha ido reconociendo en forma creciente el atractivo del algoritmo GMRES (Generalised Minimal RESidual) [66] en el BEM donde las matrices que resultan de la discretización de la superficie son completamente llenas y no estructuradas, al contrario de las del método de elementos finitos. El algoritmo GMRES estándar, conocido como $GMRES_{\infty}$ calcula nuevos vectores base ortonormales del subespacio de Krylov en cada iteración, utilizando todos los vectores base ortonormales y se garantiza que no degenera. Sin embargo, para reducir el consumo de memoria, puede resultar más conveniente la aplicación de una versión con reinicio. El GMRES es particularmente útil si la matriz del sistema no puede construirse explícitamente, dado que solamente

involucra el uso de la misma a través del producto de la matriz por un vector. De hecho, con modificaciones adecuadas, el GMRES puede ser aplicado a grandes problemas tridimensionales. En el capítulo siguiente se muestra una aplicación del GMRES en la cual se efectúan dichos productos matriz–vector por medio de desarrollos multipolares, adaptando de esta manera el esquema de solución a sistemas con un gran número de puntos de fuente.

Capítulo 4

El Método de las Soluciones Fundamentales con Desarrollos Multipolares

Para resolver numéricamente la ecuación de Laplace en tres dimensiones, la solución se representa en la forma de una suma de soluciones fundamentales que se expresan como interacciones entre pares de singularidades o partículas. La representación puede mejorarse aumentando el número de dichas partículas. Para superar las dificultades en el manejo de las enormes matrices densas que resultan de las interacciones de las partículas, se utilizan métodos rápidos de acumulación. Estos métodos se basan en la consideración de una colección de dichas partículas vista de una distancia suficientemente grande que se puede considerar como una sola partícula. La pérdida de precisión en esta aproximación decae con la distancia. Por lo tanto las influencias más lejanas se pueden acumular para reducir el tiempo de cálculo del problema de N-partículas. De esta manera, los métodos rápidos para la solución del problema de N-partículas tienen implicaciones inmediatas en los métodos de integrales de frontera donde la representación discretizada está dada por la acumulación de interacciones de pares de fuentes.

En este trabajo el interés se centra en el MFS por mínimos cuadrados, el cual requiere un número menor de fuentes. Aunque dicho número sea menor, el número

de operaciones requeridas para la solución iterativa del sistema de ecuaciones es aún $O(K \times M \times N)$ donde K es el número de iteraciones, M es el número de puntos del contorno y N es el número de fuentes. Además, la capacidad de memoria requerida es $O(M \times N)$, limitando de esta manera el tamaño de problemas que se pueden resolver con el MSF. Por esta razón en el presente capítulo se investiga la manera de acelerar el MSF y reducir los requerimientos de memoria para problemas tridimensionales grandes por medio del método de desarrollos multipolares. El presente capítulo se centra en el enfoque directo del MSF por desarrollos multipolares, y más adelante se presentará la innovación desarrollada en este trabajo para el MSF al aplicar los desarrollos multipolares en el enfoque de mínimos cuadrados.

Los algoritmos de desarrollo multipolar han sido utilizados para simulaciones numéricas que implican el cálculo de potenciales y fuerzas de interacción entre un número muy grande de partículas. Los problemas de N -partículas son prácticamente omnipresentes en muchas ramas de la simulación numérica. El enfoque de solución más simple involucra el cálculo de todos los pares de interacciones y es de complejidad $O(N^2)$. Aunque el cálculo exacto por pares de las interacciones entre todos los N componentes de dicho sistema es de complejidad $O(N^2)$, pueden calcularse soluciones aproximadas con complejidad $O(N \log N)$ ú $O(N)$.

El Algoritmo Multipolar Rápido (AMR) de Greengard y Rokhlin [26] ha sido usado con éxito para el cálculo eficiente de problemas de N -cuerpos (interacciones de partículas). El método es más eficiente cuando el número de partículas es muy grande. La característica principal del AMR es que ante el problema tradicional de N -cuerpos, de complejidad $O(N^2)$, ofrece una solución que es lineal en N en muchos casos, tendiendo a $O(N \log N)$ en el peor de los casos, y manteniendo una precisión conocida acotada por límites de error rigurosamente deducidos. Muchas aplicaciones de puntos discretos han sacado provecho del rendimiento del AMR, especialmente en dinámica molecular

y mecánica celestial. Cuando este método se aplica a la mecánica del continuo como en el caso de la técnica numérica del BEM, el procedimiento de discretización usa una representación en la cual se escoge un conjunto de puntos del contorno y las integrales de los núcleos, en la fórmula de Green, se expresan en términos de una suma ponderada de singularidades las cuales se desarrollan por medio de acumulación rápida con el AMR. Esta operación tiene una interpretación inmediata en el MSF como el producto de un vector de intensidades de las fuentes premultiplicado por una matriz compuesta de soluciones fundamentales como aparece en el sistema de la ecuación (3.14). En un capítulo posterior del presente trabajo se introduce la aplicación del AMR para la premultiplicación por la matriz transpuesta que aparece en la ecuación (3.15) haciendo posible de esta manera la solución del MSF por mínimos cuadrados.

La aplicación del AMR a la solución de la ecuación de Laplace en un dominio continuo implica la implementación del cálculo de desarrollos multipolares dentro de un esquema de solución iterativa para las ecuaciones del método de soluciones fundamentales, lo cual permite aplicar el método a un dominio con un gran número de puntos de evaluación, pudiendo efectuarse este cálculo en un tiempo proporcional al número de partículas. Usando una técnica de agrupamiento y desarrollo, es posible efectuar una evaluación rápida de los productos matriz–vector. En este enfoque no es posible tener una forma explícita de la matriz, y por lo tanto se requiere el uso de técnicas iterativas de solución. Una descripción de la aplicación de este enfoque para obtener una solución rápida de la ecuación de Laplace es presentada por Rokhlin[65], quien sugiere el uso del algoritmo generalizado de residuos conjugados. Diferentes formulaciones llevan a diferentes preferencias de los métodos iterativos de solución. Recientemente se ha explorado el uso del método GMRES[66] para aplicaciones de esquemas de multipolos para variados problemas utilizando la solución iterativa de ecuaciones obtenidas del BEM ([25], [54], [59]).

4.1 División del Dominio Mediante Estructuras Arborescentes

Alrededor del año 1980 se reportaron varios algoritmos numéricos $O(N)$ y $O(N \log N)$ para calcular el potencial y fuerza resultantes de interacciones gravitacionales o electrostáticas de N partículas (problema de N -partículas), para el cual la solución típicamente lleva a una complejidad computacional de $O(N^2)$. Estos algoritmos estaban basados en el desarrollo del campo potencial generado por N fuentes en series multipolares o de Taylor y el agrupamiento de las influencias del campo lejano. Entre estos trabajos, el esquema arborescente de Barnes y Hut [1] y el algoritmo multipolar rápido de Greengard y Rokhlin [26] son dignos de atención especial. Barnes y Hut desarrollaron una buena parte del trabajo inicial con desarrollos multipolares truncados. Su algoritmo arborescente utiliza un *árbol octal* para subdividir jerárquicamente el dominio de simulación en áreas bien separadas que pueden interactuar por medio de los desarrollos truncados. Un árbol octal es una estructura de datos semejante a un árbol genealógico donde cada celda o elemento del árbol puede tener hasta 8 *hijos*, y permite detectar en forma rápida la cercanía de pares de elementos en el mismo. En la Figura 4.1 se muestra la división del dominio mediante un árbol en dos dimensiones. Se efectúa un agrupamiento de términos por medio del árbol de grupos o ramas con el cual se efectúa la descomposición jerárquica del espacio, dividiendo así el dominio en celdas. El agrupamiento empieza de las ramas menores, que suelen llamarse hojas, donde se agrupan las partículas, procediendo luego a formar las ramas más grandes donde se agrupan las ramas menores. El método de Barnes y Hut reduce la complejidad computacional del problema de orden $O(N^2)$ a $O(N \log N)$.

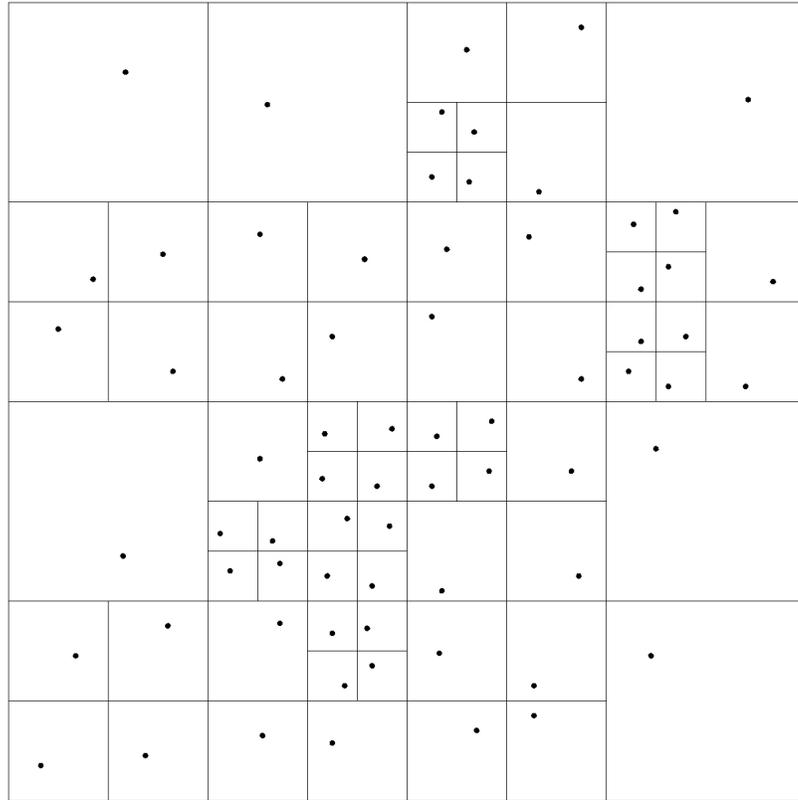


Figura 4.1: Representación bidimensional del árbol de celdas de Barnes y Hut

4.2 Ecuaciones Básicas del Método de Desarrollo Multipolar Rápido

Desde otro punto de vista, Greengard y Rokhlin introducen el concepto de *desarrollos locales* para trasladar y acumular los efectos de múltiples desarrollos multipolares remotos convertidos en un solo desarrollo local. Estos desarrollos locales combinados con la estructura de datos de árbol octal proveen una reducción adicional en la complejidad de la evaluación resultando en $O(N)$. Este algoritmo de alto rendimiento fue logrado expandiendo el núcleo en términos de series de armónicos esféricos, y usando el principio de dualidad entre los desarrollos interior y exterior de las funciones armónicas. El grupo de Board y colaboradores presenta implementaciones en paralelo de algoritmos

multipolares para el cálculo de interacciones de partículas con aplicación a simulaciones de dinámica molecular ([50], [6], [5], [13]). Estos algoritmos usan desarrollos multipolares y descomposición jerárquica del dominio para producir resultados con un error acotado para variadas plataformas de computación en paralelo.

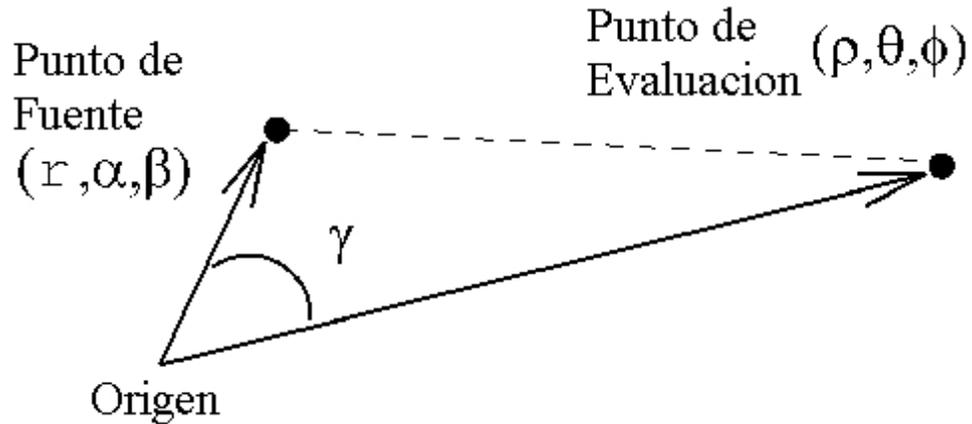


Figura 4.2: Notación usada para los puntos en las ecuaciones básicas del Algoritmo Multipolar Rápido

La discusión y notación en esta sección siguen de cerca la dada por Elliot [13]. La idea básica detrás del AMR es simple. El potencial en cierto punto debido a todas las interacciones entre fuentes puede dividirse en dos componentes: una debida a las fuentes cercanas, que puede calcularse directamente, y otra debida a fuentes distantes, dada en la forma de una serie de Taylor. Las representaciones del campo potencial existen en dos formas de series en el AMR. Una forma se conoce como *desarrollo multipolar*, obtenido mediante aplicación del teorema de adición para armónicos esféricos, la cual converge para puntos de evaluación distantes

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{n,m} \mathbf{M}_{n,m} \frac{\mathbf{Y}_n^m(\theta, \phi)}{r^{n+1}} \quad (4.1)$$

La otra forma es llamada *desarrollo local*, la cual converge dentro de una celda

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{n,m} \mathbf{L}_{n,m} r^n \mathbf{Y}_n^m(\theta, \phi) \quad (4.2)$$

En cada una de estas ecuaciones los coeficientes de desarrollo multipolar ($M_{n,m}$), o los coeficientes de desarrollo local, ($L_{n,m}$), determinan el potencial en un punto de evaluación (r, θ, ϕ) (ver Figura 4.2). $Y_n^m(\theta, \phi)$ son armónicos esféricos, expresados en términos de polinomios de Legendre. La serie de desarrollo multipolar se suma sobre el rango definido del orden n ($0 \leq n \leq \infty$) y el grado m ($-n \leq m \leq n$) de la función armónica esférica $Y_n^m(\theta, \phi)$. Fuera de este rango permitido de valores de n y m , Y_n^m es cero. Siguiendo la notación en [27] y [13], se omite el factor de normalización $\sqrt{(2n+1)/4\pi}$ para las funciones armónicas esféricas en las ecuaciones de los desarrollos multipolares mostradas aquí. El AMR sustituye la mayoría de las interacciones de pares de partículas por interacciones de pares de celdas para mejorar la eficiencia de los cálculos para el potencial y sus derivadas direccionales. Los cálculos de las interacciones de celda a celda utilizan series de desarrollos multipolares para representar potenciales de celdas. Aunque las ecuaciones matemáticas empleadas en el AMR son exactas cuando las series son infinitas, su aplicación práctica utiliza series truncadas, y por consiguiente la precisión global del algoritmo debe controlarse imponiendo parámetros que incluyen el nivel de descomposición espacial, el número de términos llevados en el desarrollo, y la separación mínima entre celdas interactuantes.

4.3 Traslaciones de Desarrollos Multipolares

En el AMR, hay varias traslaciones usadas para facilitar el cálculo del campo potencial. Usando estas traslaciones, los coeficientes de una celda dentro de una celda más grande, son pasados a la celda mayor, el potencial del campo lejano en el centro de una celda, debido a fuentes ubicadas en otra celda bien separada, se toma del desarrollo multipolar

de esta última, y se pasa al desarrollo local. Finalmente las celdas pequeñas dentro de una celda pasan a sus centros el desarrollo local de la celda mayor. Greengard [27] presenta la deducción de las tres traslaciones de series, basadas principalmente en desarrollos en series de Taylor. En las ecuaciones siguientes se sigue la notación usada en [13] para describir las traslaciones, llamadas respectivamente *Multipolar a Multipolar* (MAM), *Multipolar a Local* (MAL), y *Local a Local* (LAL). Las tres traslaciones (MAM, MAL, and LAL) pueden visualizarse como manipulaciones de los coeficientes de los desarrollos en series. El resultado de cada traslación es una matriz de coeficientes de salida la cual es calculada por medio de sumatoria ponderada de la matriz de entrada mediante una matriz de traslación \mathbf{T} , como se describe a continuación.

MAM:

$$\mathbf{M}_{n',m'} = \sum_{n,m} \mathbf{T}_{n,m,n',m'}^{MAM}(\vec{\rho}) \mathbf{M}_{n,m} \quad (4.3)$$

$$\mathbf{T}_{n,m,n',m'}^{MAM}(\vec{\rho}) = \begin{cases} \frac{(-1)^{n'-n} A_n^m A_{n'-n}^{m'-m}}{A_{n'}^{m'}} Y_{n'-n}^{*m'-m}(\alpha, \beta) \rho^{n'-n}, & \text{si } n \geq n' \text{ y} \\ & \text{si } |m - m'| \leq n - n' \\ 0, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (4.4)$$

MAL:

$$\mathbf{L}_{n',m'} = \sum_{n,m} \mathbf{T}_{n,m,n',m'}^{MAL}(\vec{\rho}) \mathbf{M}_{n,m} \quad (4.5)$$

$$\mathbf{T}_{n,m,n',m'}^{MAL}(\vec{\rho}) = \begin{cases} \frac{(-1)^{n'+m} A_n^m A_{n'}^{m'-m} Y_{n'+n}^{*m'-m}(\alpha, \beta)}{A_{n'+n}^{m'-m} \rho^{n'+n+1}}, & \text{si } n \geq n' \text{ y} \\ & \text{si } |m - m'| \leq n - n' \\ 0, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (4.6)$$

LAL:

$$\mathbf{L}_{n',m'} = \sum_{n,m} \mathbf{T}_{n,m,n',m'}^{LAL}(\vec{\rho}) \mathbf{L}_{n,m} \quad (4.7)$$

$$\mathbf{T}_{n,m,n',m'}^{LAL}(\vec{\rho}) = \begin{cases} \frac{A_{n'}^{m'} A_{n-n'}^{m-m'}}{A_n^m} \mathbf{Y}_{n-n'}^{m-m'}(\alpha, \beta) \rho^{n-n'}, & \text{si } n \geq n' \text{ y} \\ & \text{si } |m - m'| \leq n - n' \\ 0, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (4.8)$$

donde

$$A_n^m = \frac{1}{\sqrt{(n+m)!(n-m)!}} \quad (4.9)$$

Estas matrices de coeficientes de entrada ($\mathbf{M}_{n,m}, \mathbf{L}_{n,m}$), de salida ($\mathbf{M}_{n',m'}, \mathbf{L}_{n',m'}$), y de traslación (\mathbf{T}) tienen coeficientes iguales a cero fuera del rango permitido de n y m . En [13], se elimina un término de ponderación además del factor de normalización, a fines de hacer más eficientes los cálculos con las ecuaciones de desarrollo multipolar, y las traslaciones se presentan en una forma más concisa mediante la separación de cada término en el desarrollo de la serie en dos factores: $\mathbf{F}_{n,m}(\vec{r})$ el cual incluye potencias de r , y $\mathbf{G}_{n,m}(\vec{\rho})$ el cual incluye todas las derivadas parciales de $1/\rho$. La implementación de estos desarrollos usada en este trabajo se basa en las rutinas descritas en [6].

4.4 El Procedimiento de Desarrollo y Agrupamiento del AMR

El agrupamiento de términos se logra definiendo un árbol de grupos o ramas. En un sistema tridimensional de fuentes el AMR se inicia construyendo un árbol octal para la descomposición jerárquica del espacio, dividiendo así el dominio en celdas. Se calcula entonces un desarrollo mutipolar truncado, el cual expresa el efecto de todas las fuentes

en una celda, sobre puntos distantes, aplicando la ecuación (4.1) a cada celda del nivel más fino de descomposición espacial.

Después de la descomposición en el espacio, empezando con los coeficientes de desarrollo multipolar en las celdas hojas, los desarrollos son combinados en forma jerárquica para representar los efectos de grupos cada vez más grandes de fuentes en lo que se conoce como el *paso hacia arriba*. Las celdas hijas usan la traslación MAM en la ecuación (4.3) para pasar sus desarrollos multipolares al centro de la celda padre. De esta manera, el AMR calcula los coeficientes del desarrollo multipolar de todas las celdas mayores en el árbol octal, hasta que se llevan a cabo todos los desarrollos multipolares correspondientes a todas las celdas en todos los niveles.

Al producirse la interacción entre pares de celdas distantes, cada celda acumula los efectos del campo lejano dentro de su desarrollo local. En el *paso hacia abajo*, las celdas bien separadas interactúan creando un desarrollo local en el centro de cada celda usando la traslación MAL en la ecuación (4.5) y los desarrollos locales de cada celda padre son usados para transferir hacia abajo su interacción de campo lejano acumulada, a las celdas hijas, usando la traslación LAL en la ecuación (4.7). El procedimiento se efectúa en forma no redundante manteniendo una *lista de interacción* de celdas, la cual es pasada de padres a hijos y actualizada en cada nivel.

Al terminar el agrupamiento, las influencias del campo lejano completo, que fueron transferidas en el paso hacia abajo, son distribuidas sobre los puntos de colocación en cada rama mediante la sumatoria de la multiplicación de los términos de las series y sus momentos agrupados correspondientes. Finalmente, los efectos del campo lejano son combinados con evaluaciones directas de corto alcance, para dar como resultado el potencial en cada partícula. Para un número pequeño de partículas esto es de hecho más costoso que calcular las interacciones directas. Sin embargo, el costo computacional crece linealmente con N , y cuando el número de partículas es grande, este costo se hace

mucho más pequeño que el costo computacional de las interacciones directas que es $O(N^2)$.

4.5 Criterio de Separación

Las soluciones para problemas de N -partículas deben configurarse para buscar la máxima eficiencia con respecto al compromiso entre el tiempo de cálculo y la precisión. La eficiencia mejora cuando las partículas se agrupan de manera de minimizar el tiempo de cálculo permaneciendo a la vez dentro de cierta medida de precisión especificada. La interacción de celdas bien separadas se lleva a cabo con la traslación MAL al crear los desarrollos locales. Para usar la información del campo lejano, se debe establecer un criterio de *buena separación* para poder tomar decisiones sobre si las celdas están suficientemente lejos como para interactuar como celdas completas en vez de considerar sus componentes. El criterio propuesto en [13] puede deducirse de los límites de error relativo en el peor caso, usando una simple relación que incluye la geometría de las celdas involucradas en las interacciones de celdas bien separadas. Este criterio se basa solamente en el tamaño y la separación de las celdas involucradas y es significativo en la convergencia de las series del potencial y de sus derivadas direccionales. Se define como

$$\frac{(r_A + r_B)}{R} \leq \mathbf{PAM} \quad (4.10)$$

donde R es la distancia entre dos celdas involucradas en una interacción MAL, medida entre los centros de las celdas, r_A y r_B son los radios de las esferas circunscritas correspondientes a las dos celdas como se muestra en la Figura 4.3 (el radio es $\frac{\sqrt{3}}{2}$ veces la longitud de los lados si la celda es cúbica), y el **PAM** (Parámetro de Aceptación Multipolar) es un valor entre 0 y 1 seleccionado por el usuario, el cual se usa junto

con otros parámetros ajustables para optimizar el rendimiento en términos de costo computacional vs. precisión. El criterio de buena separación usado en el AMR original tal como se detalla en [27] es un mínimo de dos anchos de celda en cualquiera de las direcciones ortogonales, el cual corresponde aproximadamente a un valor de $\mathbf{PAM} = \frac{\sqrt{3}}{2}$, aunque éste da como resultado una región de interacción de forma cúbica. Utilizando un valor menor del \mathbf{PAM} , la precisión se mejora, y para una precisión prefijada, el orden de los desarrollos se reduce, con un costo de listas de interacción más grandes.

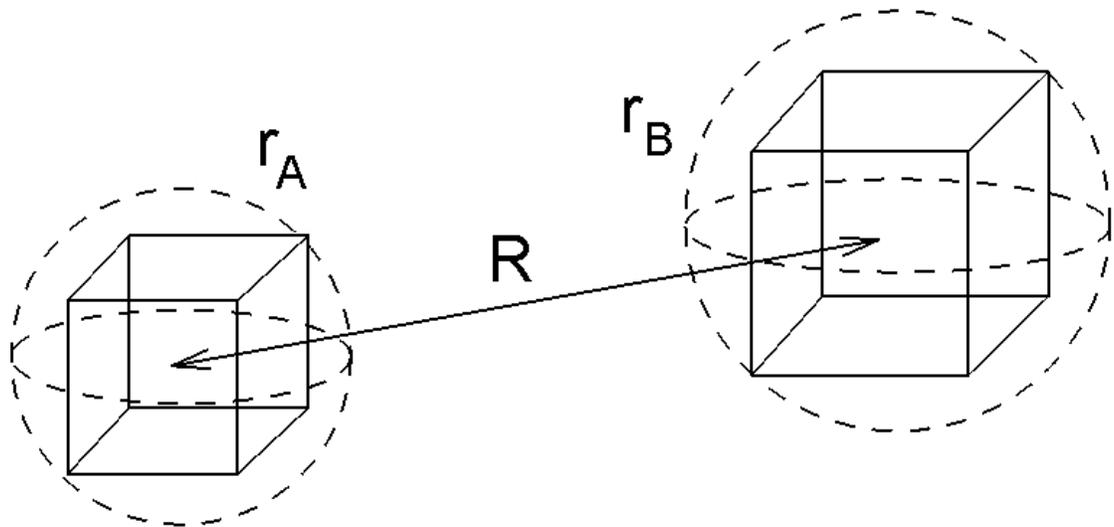


Figura 4.3: Variables en el criterio de buena separación de celdas

Aunque esta ecuación involucra una relación simple, su uso aparentemente no ha sido promovido en algoritmos multipolares o arborescentes, ya que ha sido reemplazada por otras verificaciones de relaciones generacionales en el árbol de celdas. Sin embargo, este criterio genera una región de interacción más parecida a una esfera, como se muestra en la Figura 4.4, mientras que la región de interacción en el AMR original tiene forma de cubo, de manera que las celdas en las esquinas de dicha región no contribuyen al error en el mismo grado que las celdas en los centros de los lados. Una región de interacción

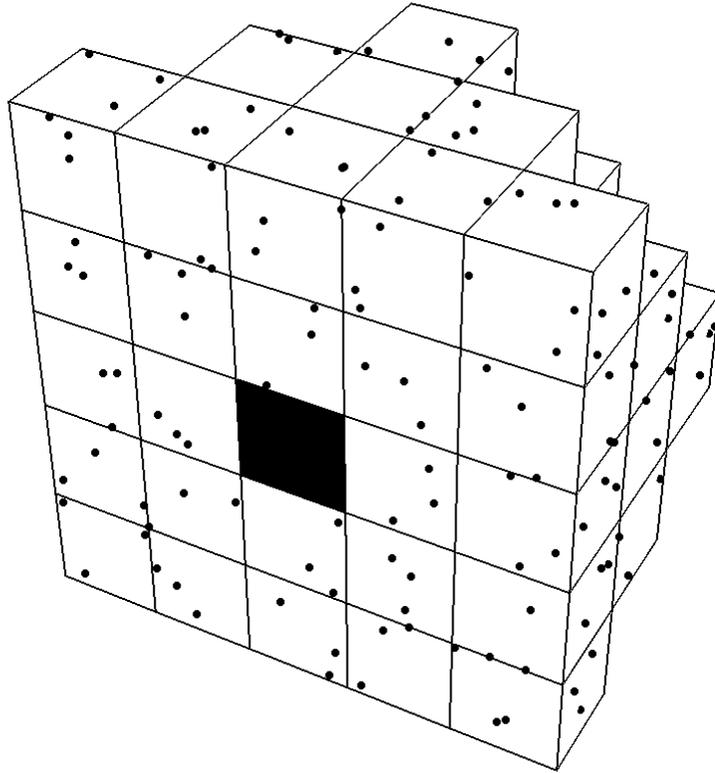


Figura 4.4: Región de interacción correspondiente al criterio de separación del PAM

con una forma más parecida a una esfera permitiendo celdas de diferentes niveles en la lista de interacción tiene un mayor volumen calculado por desarrollos en series y menos volumen calculado por interacciones de partícula a partícula. La división de las celdas en sus componentes solamente se efectúa la inclusión de las celdas como un todo en la lista de interacción se encuentra estrictamente imposibilitada. Si ese no es el caso, dichas celdas transmisoras pueden ser hasta más de un nivel mayores que la celda receptora de la traslación MAL. La sustitución de múltiples celdas en un nivel por una celda mayor es similar a la *conversión generacional* descrita en [50], pero con el presente criterio la reducción en el tamaño de la lista de interacción es más significativa, y el error es distribuido más gradualmente.

4.6 Solución de Problemas Armónicos en el MSF por Colocación Directa

El producto matriz–vector $\mathbf{v} = \mathbf{X}\mathbf{b}$ es necesario en cada iteración del procedimiento de solución iterativa del GMRES para la ecuación (3.14). La aplicación del AMR para obtener este producto se efectúa en forma inmediata, y éste es el único producto necesario para el MSF por colocación directa. En el cálculo del producto matriz–vector para un problema interior de Dirichlet, los puntos del contorno y los de fuente se distribuyen en dos capas. La capa externa corresponde a las fuentes, y en vez de premultiplicar el vector de intensidades \mathbf{b} por una matriz con elementos calculados como $x_{ij} = \Phi^*(P_i, Q_j)$, el potencial debido a las fuentes ubicadas en los puntos Q_j se calcula aplicando los pasos hacia arriba y hacia abajo del procedimiento del AMR. En el paso final las influencias del campo lejano tomado de las fuentes, que fue transferido en el paso hacia abajo, son distribuidas sobre los puntos de las hojas y combinados con las evaluaciones del campo cercano, para dar como resultado el potencial en cada punto del contorno P_i .

En el enfoque de colocación directa, para la solución del problema interior de Laplace con condiciones de contorno de Dirichlet, se obtiene la solución rápida utilizando el AMR con un número de fuentes y de puntos del contorno por encima de 4000. Al aplicar el procedimiento de desarrollo y agrupamiento con los puntos del contorno y de fuente en dos capas holomorfas muy cercanas con una distribución fija, la construcción del árbol octal con todos los puntos juntos se efectúa en forma directa. Aunque los *puntos de fuente* no son los mismos que los *puntos de evaluación*, esta aplicación presenta pocas diferencias con respecto al cálculo de todos los pares de interacciones en las aplicaciones originales del algoritmo a problemas de N –partículas, dado que la mayor parte de las celdas contienen ambas clases de puntos, y la rapidez del cálculo se ve beneficiada por los desarrollos multipolares y locales en todas las celdas. Ya que los

potenciales en el contorno se satisfacen exactamente dentro de los límites de la precisión de los desarrollos en series, aparecen errores más grandes en las derivadas normales, especialmente cuando la distancia entre la capa de puntos de fuente y la capa de puntos del contorno es pequeña.

Para lograr una precisión prefijada deseada, la rapidez del cálculo puede aumentarse reduciendo el orden p , y de igual manera el **PAM** debe hacerse menor, al costo de un número mayor de interacciones calculadas en forma directa. En consecuencia, hay un tiempo mínimo de ejecución que depende de estos dos parámetros en un problema dado y para una precisión deseada. La utilización de las cotas de error conocidas de acuerdo al peor de los casos, permite que se puedan calcular muchas partes del algoritmo previamente a una aplicación particular. Sin embargo, la ocurrencia del peor caso es estadísticamente muy poco probable, por lo cual para ciertas aplicaciones prácticas es preferible buscar la información estadística de medidas de error.

Como se indicó en la sección 3.1, la precisión del MSF mejora a medida que las fuentes son alejadas del contorno, pero es necesario imponer restricciones sobre el tamaño de la superficie exterior que contiene los puntos de fuente a fin de evitar que el sistema de ecuaciones del MSF se vuelva altamente mal condicionado. De acuerdo a esta observación y a los presentes resultados, en la aplicación posterior con el enfoque de mínimos cuadrados, la distribución de las fuentes se efectuará sobre una superficie suave ubicada a una distancia del contorno del problema del orden de una a dos veces el tamaño característico del cuerpo en la dirección correspondiente.

Cuando la separación entre las fuentes y los puntos del contorno aumenta, y llega a ser, en la mayoría de los casos, mayor que el tamaño de una celda hoja, la construcción del árbol octal con todos los puntos necesita de un indicador adicional para cada celda a fin de distinguir entre las *celdas de fuente* que poseen desarrollos multipolares no nulos, y las *celdas de evaluación* que necesitan acumular desarrollos locales. Una celda

en un nivel cercano a la raíz puede ser de ambos tipos, pero las celdas hojas serán normalmente de uno u otro tipo exclusivamente.

El esquema de agrupamiento y desarrollo multipolar facilita la acumulación de los efectos de fuentes distantes de una manera eficiente. Lo que se necesita en la práctica es resolver un sistema lineal de ecuaciones en el cual la matriz no puede representarse explícitamente, por lo cual los esquemas directos de solución están descartados y entran en juego los esquemas indirectos o iterativos. En el capítulo siguiente se introducirá la solución del sistema de ecuaciones lineales del enfoque de mínimos cuadrados mediante el AMR, el cual requiere efectuar el producto adicional con la matriz \mathbf{X}^T .

Capítulo 5

El Método de las Soluciones Fundamentales por Mínimos Cuadrados.

En este capítulo se presenta en detalle el enfoque de *mínimos cuadrados* y se introducen conceptos relevantes para el mejoramiento secuencial de la distribución de fuentes que se presentará más adelante. En dicho refinamiento se buscará la reducción del error a partir de un análisis de sensibilidad definido en términos de “parámetros significativos” en regresión lineal múltiple. El término “regresión” fue acuñado por Sir Francis Galton a fines del siglo XIX, para describir una tendencia de las alturas de varios individuos a uniformizarse acercándose al promedio del grupo, y consideró esta tendencia como un regreso hacia la mediocridad. Galton desarrolló una descripción matemática de esta tendencia de regresión. El término *regresión* persiste hasta el presente para describir las relaciones estadísticas entre pares de variables. El análisis de regresión múltiple investiga la relación entre varias variables independientes o variables de predicción, y una variable dependiente o de respuesta. En el caso que nos ocupa, estas variables son los potenciales correspondientes a las intensidades unitarias de las soluciones fundamentales, y los potenciales en los puntos especificados en el contorno, respectivamente.

La solución se da en términos de *coeficientes de regresión*, los cuales están relacionados con la *correlación* de cada variable de predicción con la variable dependiente,

después de eliminar el efecto de todas las demás variables independientes. La alta correlación entre dichas variables de predicción puede reflejarse como colinealidad y mal condicionamiento del problema de mínimos cuadrados. Por lo tanto la distribución de los puntos de fuente debe efectuarse de una manera que evite en lo posible los efectos desfavorables que dichas correlaciones pueden tener sobre la solución.

5.1 Formulación del Problema de Regresión Lineal Múltiple

En esta sección se resumen algunos conceptos de regresión lineal múltiple que son relevantes para la formulación del procedimiento de refinamiento que se presentará en un capítulo posterior de este trabajo. El propósito general de la regresión lineal múltiple [56] es el de ajustar un conjunto de M puntos de datos observados y_i a un modelo constituido por una combinación lineal de N funciones de base o *variables independientes*. Un modelo de regresión es una expresión formal de los dos ingredientes esenciales en una relación estadística: (1) una tendencia de la variable de respuesta Y a variar conjuntamente con las variables de predicción en una manera sistemática, y (2) una dispersión de los puntos alrededor de la curva de relación estadística. Para incorporar estas dos características en un modelo de regresión se postula que: (1) existe una distribución probabilística de Y correspondiente a cada conjunto de valores de las variables de predicción, y (2) las medias de dichas distribuciones de probabilidad varían en cierta forma sistemática con las variables de predicción. La relación sistemática entre las medias de las distribuciones de probabilidad de Y y las variables de predicción está dada por una *superficie de regresión*. En general un modelo de regresión puede considerar un tipo cualquiera de relación o *función de regresión* para predecir el valor de la variable dependiente, y la escogencia de la forma funcional de la superficie de regresión está vinculada a la escogencia de las variables de predicción. Suelen usarse

satisfactoriamente funciones de regresión lineales o cuadráticas como primeras aproximaciones a funciones de regresión de naturaleza desconocida. En otros casos, la teoría relevante para el problema puede indicar la forma adecuada de la función.

5.1.1 Estimación de Parámetros en el Modelo de Regresión Lineal

Para los fines del presente trabajo, consideramos un modelo básico de regresión lineal con N variables de predicción. La variable de respuesta Y se visualiza como una variable aleatoria, y el modelo puede plantearse como sigue:

$$Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^N \beta_j x_{ij} + \varepsilon_i \quad (5.1)$$

donde i es un índice para observaciones sucesivas o puntos en una muestra, $i = 1, \dots, M$, Y_i es la componente de la variable aleatoria Y correspondiente a la respuesta en el i -ésimo punto, x_{ij} son constantes conocidas, específicamente, las variables de predicción o funciones dadas evaluadas en el i -ésimo punto, los coeficientes β_j , $j = 0, \dots, N$, son los *parámetros* del modelo, ε_i es un término de error aleatorio con media $E\{\varepsilon_i\} = 0$ y varianza $\sigma^2\{\varepsilon_i\} = \sigma^2$, ε_i y ε_j son independientes de manera que su covarianza es cero en todos los pares $i, j; i \neq j$. De lo anterior se infiere que Y_i es una variable aleatoria con media

$$E\{Y_i\} = \beta_0 + \sum_{j=1}^N \beta_j x_{ij} \quad (5.2)$$

y varianza $\sigma^2\{Y_i\} = \sigma^2$. Este modelo supone que las distribuciones de probabilidad de las Y_i tienen la misma varianza σ^2 , sin importar los valores de las variables de predicción. Los errores se supone que son independientes, de ahí que el resultado en cualquier punto individual no tiene ningún efecto sobre el término de error en cualquier otro punto.

Los datos observados o experimentales a ser usados para estimar los parámetros de la función de regresión consisten en observaciones de las variables de predicción x_{ij} y

las observaciones correspondientes de la variable de respuesta Y_i , que se denotan como y_i . La función de regresión estimada es

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{j=1}^N b_j X_j \quad (5.3)$$

donde cada b_j es un *estimado* del parámetro correspondiente β_j . La ecuación (5.3) puede escribirse en notación matricial como

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X} \mathbf{b} \quad (5.4)$$

Como puede observarse, la solución del MSF presentada en la sección 3.2 puede interpretarse como un análisis de regresión para determinar los parámetros b_j , $j = 0, 1, 2, \dots, N$. En esta aplicación, b_0 toma en cuenta un término constante en la fórmula de representación de la ecuación (3.13) y x_{ij} son los coeficientes de la matriz obtenidos al evaluar las condiciones de contorno sobre los M puntos de colocación, utilizando la distribución de puntos de fuente dada, con los correspondientes valores constantes relacionados con b_0 .

Dado un conjunto particular de datos, se pueden evaluar los elementos de $\hat{\mathbf{Y}}$. El *valor ajustado* en el i -ésimo caso es

$$\hat{y}_i = b_0 + \sum_{j=1}^N b_j x_{ij} \quad (5.5)$$

y el i -ésimo *residuo* es la diferencia entre el valor observado y el valor ajustado correspondiente

$$r_i = y_i - \hat{y}_i \quad (5.6)$$

Para encontrar “buenos” estimados de los parámetros de regresión se utiliza el método de los mínimos cuadrados. Los estimados b_j de los parámetros β_j corresponden al punto

mínimo de una función objetivo que cuantifica el alejamiento del modelo con respecto a los datos, y se define como la suma de los cuadrados de los M residuos r_i

$$F(\mathbf{b}) = \sum_{i=1}^M r_i^2 \quad (5.7)$$

El proceso de ajuste resulta ser entonces un problema de minimización multidimensional. El punto mínimo se presenta cuando las derivadas $\frac{\partial F}{\partial b_j}$ con respecto a todos los N parámetros se anulan. Esta condición da como resultado las N ecuaciones lineales

$$\sum_{i=1}^M \left[y_i - \sum_{j=1}^N b_j x_{ij} \right] x_{ik} = 0; \quad k = 1 \dots N \quad (5.8)$$

con $N \leq M$, dado que debe haber más puntos observados que parámetros a ajustar. Los estimados b_j se obtienen entonces mediante la solución de dicho sistema de ecuaciones, llamadas *ecuaciones normales*, que se pueden expresar como

$$\mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b} = \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (5.9)$$

donde \mathbf{X} se denomina *matriz de diseño* de la regresión, cuyos $M \times N$ componentes se construyen a partir de las N funciones de base o variables de predicción evaluadas en los M puntos observados, \mathbf{y} es el vector de los M valores observados de la variable dependiente, y \mathbf{b} es el vector de solución del sistema constituido por los N estimados de los parámetros. Para despejar el vector de parámetros se expresa la solución en forma general premultiplicando la ecuación anterior por \mathbf{A}^{-1} , de donde resulta

$$\mathbf{b} = \mathbf{C}\mathbf{w} \quad (5.10)$$

donde $\mathbf{C} = \mathbf{A}^{-1}$ y $\mathbf{w} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$.

5.1.2 El Modelo de Regresión en el MSF

Como puede observarse a partir de la discusión anterior, una solución por mínimos cuadrados del sistema algebraico de ecuaciones que resulta del MSF, o sea la ecuación

(3.14), puede interpretarse como una regresión lineal. En el enfoque presentado en este trabajo para el problema de valores en la frontera, la solución del problema se visualiza como un esquema de estimación de parámetros, los valores de la variable de respuesta son los potenciales en los puntos de colocación dados sobre el contorno, la función de regresión es lineal, y las variables de predicción son los potenciales producidos por intensidades unitarias en los puntos de fuente, correspondientes a las soluciones fundamentales. El nivel de referencia de los potenciales es arbitrario, y al sumar una constante β_0 a la función potencial en el problema de Dirichlet siempre se satisface la ecuación de Laplace. La derivada de dicho potencial constante β_0 es cero y no aparece al imponer condiciones de Neumann.

En el caso del MSF, las columnas de la matriz de diseño \mathbf{X} se construyen a partir de las funciones de base dadas como potenciales de fuentes unitarias (o sus derivadas normales) evaluadas en los puntos donde se especifican las condiciones de contorno. Como se verá más adelante, el procedimiento numérico de solución para determinar las intensidades de las fuentes, visto como un problema de regresión, permitirá encontrar indicadores para un esquema de refinamiento adaptativo.

5.2 Análisis de la Variabilidad Alrededor de la Superficie de Regresión

En esta sección se discute la variabilidad de los parámetros estimados y de las predicciones obtenidas por regresión, de acuerdo al modelo de error normal. Los estimados puntuales b_j de los parámetros β_j se obtienen a partir de la solución de las ecuaciones normales, que corresponden a la minimización de la función $F(\mathbf{b})$ de la ecuación (5.7), es decir la suma de cuadrados de los residuos, que se suele denominar SSE (desviación alrededor de la función de regresión ajustada).

$$SSE = F(\mathbf{b}) = \sum_{i=1}^M (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (5.11)$$

Esta suma de cuadrados es una medida de la variación en las observaciones de Y_i presente cuando se han tomado en cuenta las variables de predicción. Si todas las observaciones y_i se encuentran sobre la superficie de regresión ajustada, se tiene que $SSE = 0$. A mayor variación de las observaciones y_i alrededor de la superficie de regresión ajustada, mayor es SSE .

Una vez efectuado el ajuste por mínimos cuadrados, se necesita estimar la varianza de los términos de error ε_i para obtener una indicación de la variabilidad en las distribuciones de probabilidad de Y . Un estimador insesgado de la varianza σ^2 (es decir un estimador cuyo valor esperado es igual al valor del parámetro real de la distribución) es

$$\hat{\sigma}^2 = MSE = \frac{SSE}{M - N} \quad (5.12)$$

En este tipo de análisis, el vector \mathbf{Y} de valores en una muestra de Y es considerado como un vector aleatorio, es decir un vector cuyos M elementos son variables aleatorias. El valor esperado de un vector aleatorio es un vector cuyos elementos son los valores esperados de dichas variables aleatorias. El estimado de la media o valor esperado de los Y_i está dada por el análisis de regresión en términos de las ecuaciones (5.4) y (5.10) como

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{H}\mathbf{Y} \quad (5.13)$$

donde \mathbf{H} es calculada como

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{X}^T \quad (5.14)$$

La matriz cuadrada \mathbf{H} de dimensiones $M \times M$ es simétrica y tiene la siguiente propiedad especial (llamada idempotencia)

$$\mathbf{H} \mathbf{H} = \mathbf{H} \quad (5.15)$$

5.2.1 Varianza–Covarianza de los Parámetros Estimados

Los estimados \mathbf{b} son entonces variables aleatorias y por consiguiente se necesita estimar sus varianzas. Las varianzas de estas N variables aleatorias y las covarianzas entre cualesquiera pares de ellas se ensamblan en la matriz de *varianza–covarianza* de \mathbf{b} , denominada $\sigma^2 \{\mathbf{b}\}$. Es necesario reconocer que cada b_j es una combinación lineal de las observaciones y_i correspondientes a las variables aleatorias Y_i . Los coeficientes en dicha combinación lineal son solamente funciones de los valores fijos x_{ij} . Una hipótesis adicional es que los términos de error ε_i son normalmente distribuidos. Un término de error normal simplifica grandemente la teoría del análisis de regresión, ya que se deduce inmediatamente la normalidad de la distribución muestral de b_j , basada en que una combinación lineal de variables aleatorias normales independientes es normalmente distribuida. Un importante teorema en estadística, llamado *teorema de Gauss–Markov*, establece que bajo las hipótesis anteriores del modelo de regresión, los estimados por mínimos cuadrados b_j son insesgados (es decir, $E\{b_j\} = \beta_j$) y tienen mínima varianza entre todos los estimadores lineales insesgados. La matriz estimada de varianza–covarianza de \mathbf{b} es entonces $\sigma^2 \{\mathbf{b}\} = \sigma^2 \mathbf{C}$, cuyos elementos son:

$$\sigma^2 \{\mathbf{b}\}_{ij} = Cov(b_i, b_j) = \sigma^2 c_{ij} \quad (5.16)$$

Dado que σ^2 también se estima a partir de los valores de la muestra, se puede estimar la varianza de la distribución de los estimados de los parámetros reemplazando la varianza

σ^2 por su estimador insesgado, el *MSE*. De esta manera, la solución directa del sistema de ecuaciones normales provee para cada parámetro estimado un indicador individual de redundancia de las variables de predicción, denominado *varianza del parámetro estimado*

$$\sigma^2(b_j) = \sigma^2 c_{jj} \quad (5.17)$$

Las pruebas del grado en que son significativos los β_j suelen plantearse en términos de la prueba *t* (selección de variables de predicción), es decir

$$t_j^* = \frac{b_j}{\widehat{\sigma}\{\mathbf{b}_j\}} = \frac{b_j}{\widehat{\sigma}\sqrt{\mathbf{c}_{jj}}} \quad (5.18)$$

y la regla de decisión con nivel de confianza $(1 - \alpha)$:

Si $ t_j^* \leq t(1 - \alpha/2; M - N)$	se concluye la alternativa $\beta_j = 0$
En caso contrario	se concluye $\beta_j \neq 0$

Se sabe que la prueba *t* es una prueba marginal desde la perspectiva del enfoque general de prueba para modelos lineales de regresión (ver [56]), ya que se pueden obtener resultados que lleven a conclusiones posiblemente erróneas cuando las variables de predicción están altamente correlacionadas.

5.2.2 Partición de la Suma de Cuadrados

Además de la prueba *t*, otra medida de la capacidad de la regresión para explicar la variabilidad de la variable dependiente, se obtiene realizando un análisis de varianza, conocido en la literatura estadística como *ANOVA*. El enfoque del análisis de varianza se basa en la partición de sumas de cuadrados y grados de libertad asociados con la variable de respuesta *Y*. Hay una variación en y_i la cual se mide convencionalmente en términos de las diferencias con respecto a la media \bar{y} . La medida de variación total o *suma de cuadrados total* denominada *SSTO*, es la suma de los cuadrados de las

diferencias

$$SSTO = \sum_{i=1}^M (y_i - \bar{y})^2 \quad (5.19)$$

Esta variación corresponde a un modelo en el cual solamente está presente la constante β_0 . Cuando se introducen en el modelo las variables de predicción, la variación restante que refleja la incertidumbre relacionada con la variable Y es la variación de las observaciones Y_i con respecto a la superficie de regresión ajustada. La medida de variación en las observaciones Y_i , presente cuando se han tomado en cuenta las variables de predicción, es la suma de los cuadrados de las diferencias con respecto a dicha superficie, denominada SSE

$$SSE = \sum_{i=1}^M (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (5.20)$$

La diferencia entre estas dos sumas de cuadrados es otra suma de cuadrados denominada SSR (desviación de los valores ajustados por regresión alrededor de la media)

$$SSTO - SSE = SSR = \sum_{i=1}^M (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (5.21)$$

La fórmula de partición de la suma de cuadrados anterior se deduce considerando que en un modelo de regresión lineal el producto

$$\sum_{i=1}^M (\hat{y}_i - \bar{y})(y_i - \hat{y}_i) \quad (5.22)$$

es idénticamente igual a cero (para más detalles consultar [56]). SSR puede considerarse como una medida de la parte de la variabilidad de Y_i que está asociada con la superficie de regresión. Mientras mayor es SSR en relación con $SSTO$, mayor es el efecto de la relación de regresión para tomar en cuenta la variación total en las observaciones y_i . $SSTO$ tiene asociados $M - 1$ grados de libertad. SSE tiene asociados $M - (N + 1)$ grados de libertad dado que se necesita estimar $N + 1$ parámetros en el modelo de regresión. Finalmente, SSR tiene asociados N grados de libertad.

Para fines computacionales, las sumas de cuadrados pueden expresarse en forma matricial (ver [56]) como

$$SSTO = \mathbf{Y}^T \left[\mathbf{I} - \left(\frac{1}{M} \right) \mathbf{J} \right] \mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T (\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}}) \quad (5.23)$$

$$SSE = \mathbf{Y}^T (\mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T (\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}) = \mathbf{Y}^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{b}) \quad (5.24)$$

$$SSR = = \mathbf{Y}^T \left[\mathbf{H} - \left(\frac{1}{M} \right) \mathbf{J} \right] \mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T (\hat{\mathbf{Y}} - \bar{\mathbf{Y}}) \quad (5.25)$$

donde $\hat{\mathbf{Y}}$ está dada por la ecuación (5.4) como $\mathbf{X}\mathbf{b}$, \mathbf{H} es la matriz definida por la ecuación (5.14). Para el caso en que el término independiente b_0 está presente en todos los puntos observados, \mathbf{J} es una matriz cuadrada con todos sus elementos iguales a 1 y $\bar{\mathbf{Y}}$ es un vector constante cuyos elementos son $\frac{1}{M} \sum y_i$. En las ecuaciones anteriores se han usado las siguientes relaciones matriciales

$$\left(\frac{1}{M} \right) \mathbf{J}\mathbf{Y} = \bar{\mathbf{Y}} \quad (5.26)$$

$$\mathbf{I}\mathbf{Y} = \mathbf{Y} \quad (5.27)$$

$$\mathbf{H}\mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} \quad (5.28)$$

$SSTO$ mide la variación en Y_i , o la incertidumbre en la predicción del valor de Y_i cuando no se han tomado en cuenta las variables de predicción. Similarmente, la SSE mide la variación en el valor de Y_i cuando se utiliza un modelo de regresión utilizando las variables de predicción. Una medida natural del efecto de las x_{ij} para reducir la

incertidumbre en la predicción de Y es la expresión de la reducción en la variación como una proporción de la variación total

$$R^2 = \frac{SSR}{SSTO} = 1 - \frac{SSE}{SSTO} = 1 - \frac{\mathbf{Y}^T(\mathbf{Y} - \mathbf{Xb})}{\mathbf{Y}^T(\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}})} \quad (5.29)$$

o

$$R^2 = 1 + \frac{\mathbf{Y}^T\mathbf{Xb}}{\mathbf{Y}^T(\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}})} - \frac{\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}}{\mathbf{Y}^T(\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}})} = 1 + \frac{\mathbf{b}^T\mathbf{w}}{\mathbf{Y}^T(\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}})} - \frac{\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}}{\mathbf{Y}^T(\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}})} \quad (5.30)$$

donde se han utilizado las relaciones $\mathbf{Y}^T\mathbf{Xb} = \mathbf{b}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y} = \mathbf{b}^T\mathbf{w}$, de acuerdo a la ecuación (5.10). R^2 se denomina *coeficiente de determinación*. Este valor es inmediatamente interpretable como la fracción de la variabilidad original que ha sido explicada por la regresión, y $1 - R^2$ es la fracción de variabilidad residual. Mientras menor sea la variabilidad de los residuos relativa a la variabilidad global, mejor será nuestra predicción. En otras palabras, este es un indicador de lo bien que el modelo se ajusta a los datos. Dado que se desea explicar, si no toda, la mayor parte de la variabilidad original, de dos modelos con diferentes variables de predicción se preferirá entonces aquel que tenga un mayor valor del coeficiente de determinación.

Al agregar variables al modelo de regresión solamente puede incrementarse R^2 y nunca reducirse, ya que SSE nunca puede hacerse mayor con más variables de predicción, y $SSTO$ es siempre la misma para un conjunto dado de respuestas (es decir los datos en los puntos de colocación sobre la superficie en el caso del MSF). Dado que R^2 puede con frecuencia hacerse mayor al incluir un gran número de variables de predicción, a veces se sugiere utilizar una medida modificada para tomar en cuenta el número de variables en el modelo. El coeficiente de determinación múltiple ajustado, que se denota como R_a^2 , ajusta el valor de R^2 dividiendo cada suma de cuadrados entre sus grados de libertad asociados

$$R_a^2 = \frac{SSR}{SSTO} = 1 - \left[\frac{M - 1}{M - (N + 1)} \right] \frac{SSE}{SSTO} \quad (5.31)$$

Este coeficiente de determinación múltiple ajustado puede de hecho hacerse menor cuando se introduce otra variable en el modelo, ya que cualquier reducción en SSE puede ser contrarrestada y sobrepasada por la pérdida de un grado de libertad en el denominador $M - (N + 1)$. De esta manera es posible estimar cuándo se están introduciendo puntos discrepantes en el análisis de regresión, es decir puntos cuya inclusión da como resultado una reducción en el valor de R_a^2 .

5.3 Solución de Problemas Armónicos por Mínimos Cuadrados con el Algoritmo Multipolar Rápido

En la discusión presentada en la sección 3.1 se mencionó que puede mejorarse significativamente la precisión del Método de las Soluciones Fundamentales aumentando la distancia entre la superficie sobre la cual se colocan las fuentes y aquella sobre la cual se colocan los puntos donde se especifican las condiciones de frontera. Sin embargo, este aumento de la separación conduce a un incremento del número de condición de la matriz y por consiguiente a un número de iteraciones mayor en el esquema de solución de las ecuaciones. Al aplicar el enfoque de mínimos cuadrados, el número de fuentes es pequeño en relación con el número de puntos de evaluación en el contorno y puede mantenerse una distancia razonable entre las dos superficies mencionadas anteriormente. Esto permitiría aplicar el método eficientemente a un dominio con un número de puntos en el contorno del orden de hasta 10 veces más que el número de fuentes del enfoque directo, obteniéndose además un mejor balance de los errores en el potencial y el flujo. En esta sección se introduce el producto matriz–vector adicional requerido por la solución del sistema de mínimos cuadrados y se explica cómo tratar con el balance entre rapidez y precisión del cálculo bajo las condiciones especiales del problema de mínimos cuadrados cuando la distancia entre los puntos del contorno y los puntos de fuente no es pequeña.

5.3.1 Consideraciones Preliminares sobre el Rendimiento del AMR

Como se explicó en 4.6, para la solución del problema interior de Laplace con condiciones de contorno de Dirichlet utilizando el enfoque de colocación directa del MSF, se obtiene un aceleramiento en problemas grandes utilizando el AMR, de manera bastante parecida al problema tradicional de desarrollos multipolares, en el cual se calculan todos los pares de interacciones. Sin embargo, cuando la separación entre la capa de puntos de fuente y la capa de puntos del contorno aumenta, no se obtiene el mismo rendimiento con la aplicación directa de los algoritmos de desarrollo multipolar en su forma original. En el presente trabajo, se ha implementado una modificación del AMR en la cual se distinguen las *celdas de fuente* que acumulan el efecto de puntos de fuente en forma de desarrollos multipolares, y *celdas de evaluación* que acumulan las traslaciones del campo lejano en forma de desarrollos locales. Al aplicar esta modificación, pueden encontrarse celdas que se clasifican en ambos tipos, ya sea cuando el nivel de la celda es muy cercano a la raíz o cuando la distancia entre las capas de fuente y de contorno es pequeña. Cuando la mayoría de las celdas cumplen con esta condición, se obtiene el mejor rendimiento del AMR en su forma original. De lo contrario, se impone la necesidad de efectuar ajustes importantes en los parámetros del algoritmo.

Dado que el rendimiento del AMR depende de muchos factores que van desde el nivel de descomposición espacial hasta las características particulares del compilador usado en el desarrollo del programa, las experiencias previas son útiles para dar un conocimiento de los balances entre la precisión y la rapidez de ejecución, aunque de hecho, el rendimiento en forma global es dependiente del problema. En la presente aplicación se utilizan como parámetros ajustables el orden p de las series truncadas en el desarrollo multipolar, y el parámetro de aceptación multipolar **PAM**. En esta aplicación, en lugar de suponer un tamaño de celda uniforme en el vecindario y efectuar

conversión generacional para reducir el número de celdas en la región de interacción, se toma la lista de interacción inicialmente igual a la del padre, y la subdivisión de celdas solamente se efectúa en aquellos casos en los cuales no se satisface el criterio de buena separación impuesto. De esta manera se logra un mejoramiento en la precisión al reducir el valor del **PAM**.

Cuando el valor del **PAM** es pequeño, la forma de la región de interacción es más suave y más parecida a una esfera, y los cambios en el error, correspondientes a variaciones en el parámetro, son relativamente suaves. Dado que se puede obtener una reducción en el error con mayores valores de p y menores de **PAM**, puede minimizarse el tiempo de ejecución para una precisión deseada dependiendo de estos dos parámetros. Para aplicaciones prácticas, una medida estadística del error como función de estas dos variables controlables por el usuario, es útil como un indicador global de la precisión. De acuerdo a experimentación preliminar en la aplicación del enfoque de colocación directa, descrita en la sección 4.6, en general se observa que para la configuración dada y dentro de los valores usados para los parámetros, el error medio es aproximadamente proporcional a $2.4^{-p}\mathbf{PAM}^{8.8}$. Esta relación, junto con estimados del costo computacional dependientes de ambos parámetros, puede usarse como una guía aproximada inicial para obtener un balance adecuado entre la rapidez y la precisión.

En el presente trabajo se explora el efecto del tamaño del problema sobre el rendimiento de la solución multipolar para el problema de mínimos cuadrados en el MSF. Teniendo en cuenta el conocimiento del balance de precisión vs. tiempo de ejecución, previo a la experimentación numérica con el esquema de mínimos cuadrados, y dado que en general se desea una mayor separación entre las fuentes y los puntos del contorno para mejorar la precisión del MSF, se prefiere utilizar un menor valor del **PAM**, dado que éste no produce un incremento significativo del costo computacional cuando aumenta la separación entre las celdas de fuente y las celdas de evaluación. En los resultados presentados más adelante se utiliza un valor fijo **PAM** = 0.45. La precisión en

la evaluación de los potenciales es muy importante para la convergencia del algoritmo de solución iterativa de las ecuaciones en el problema de mínimos cuadrados, por lo cual es necesario utilizar un valor mayor de p que el necesario para la convergencia en el enfoque de colocación directa. Como resultado de este alto valor de p y de la separación mayor entre las capas, el uso de memoria de las estructuras de datos correspondientes a los coeficientes multipolares es mucho más significativo que el de la lista de índices en la región de interacción.

5.3.2 Premultiplicación por la Matriz Transpuesta Utilizando el AMR

Una formulación de mínimos cuadrados permite más flexibilidad en el balance del error sobre el contorno, y además requiere un número menor de puntos de fuente. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, estas ventajas pueden ser contrarrestadas por el mal condicionamiento del sistema de ecuaciones. Por lo tanto la formulación de mínimos cuadrados no puede implementarse en una manera muy simple. Los productos matriz–vector $\mathbf{v} = \mathbf{X}\mathbf{b}$ y $\mathbf{u} = \mathbf{X}^T\mathbf{v}$ son necesarios en cada iteración del procedimiento de solución del GMRES para las ecuaciones (5.9). De aquí en adelante nos referiremos a dichos productos como el *producto directo* y el *producto transpuesto* respectivamente. La aplicación del AMR para obtener el producto directo se efectúa en forma directa y este es el único producto necesario para el enfoque de colocación directa del MSF. La solución del sistema de ecuaciones de mínimos cuadrados es importante para este trabajo, por lo cual en esta sección se explica el algoritmo desarrollado para la premultiplicación adicional por la matriz \mathbf{X}^T (ver [69])

Para el cálculo del producto transpuesto la operación puede describirse en una forma bien intuitiva cuando solamente se necesita calcular los potenciales en todos los puntos del contorno. Dado que el producto directo $\mathbf{v} = \mathbf{X}\mathbf{b}$ se efectúa calculando los potenciales \mathbf{v} sobre los puntos del contorno (filas de \mathbf{X}) debido a las intensidades dadas \mathbf{b} en los

puntos de fuente especificados (columnas de \mathbf{X}), la consecuencia inmediata de invertir la dirección de las influencias es el intercambio de las columnas por filas, es decir que el producto $\mathbf{u} = \mathbf{X}^T \mathbf{v}$ se obtiene para el problema de Dirichlet mediante el cálculo de los potenciales \mathbf{u} en los puntos de fuente (columnas de \mathbf{X}) debidos a las intensidades dadas \mathbf{v} de fuentes colocadas sobre los puntos de contorno especificados (filas de \mathbf{X}). Este producto matricial es de esta manera implementado en una forma directa.

El cálculo del producto transpuesto para el caso del problema de Neumann es en cierta manera más complicado. Los elementos de la matriz \mathbf{X} en este caso son $x_{ij} = \frac{\partial \Phi^*}{\partial n}(P_i, Q_j)$, en consecuencia el producto $x_{ij}v_i$ debe descomponerse como la suma de las derivadas direccionales en tres direcciones k , resultantes de las intensidades $v_i n_k$, y entonces es necesario un doble paso del AMR para efectuar la sumatoria de las contribuciones de todos los puntos del contorno para cada dirección k . En el caso de condiciones de contorno mixtas el producto debe obtenerse en cuatro pasos, uno para el potencial, y uno para la derivada en cada dirección espacial.

5.3.3 Pruebas Numéricas del Desarrollo Multipolar en Problemas de Mínimos Cuadrados

A fines de evaluar el rendimiento del algoritmo desarrollado para la acumulación multipolar en problemas de mínimos cuadrados, se realiza la aplicación en problemas de potenciales con solución analítica. Se comparan los tiempos de ejecución y consumos de memoria medidos al calcular las soluciones numéricas con ambos esquemas. Se efectúa el conteo de memoria usada para la matriz almacenada en el esquema de interacciones directas y para los coeficientes multipolares en el AMR, añadiendo en ambos casos la memoria utilizada por la rutina de solución iterativa del sistema de ecuaciones. Los tiempos de ejecución reportados son medidos sin incluir el tiempo utilizado en las operaciones de entrada y salida, en una computadora utilizada solamente para este proceso,

con un procesador Pentium III de 1000MHz, funcionando bajo el sistema operativo Windows 2000.

Se compara el rendimiento del esquema multipolar con el del esquema de interacciones directas, en la solución por el MSF del potencial dado en coordenadas cilíndricas como:

$$\Phi = I_1(2r) \sin \theta \cos 2z \quad (5.32)$$

donde I es la función de Bessel modificada del primer tipo. Este problema se resuelve dentro de un cilindro con radio $R = 1$, obteniéndose diferentes tamaños de problema al variar la altura H . Se imponen condiciones de Dirichlet sobre todos los contornos. En principio solamente es necesario definir una distribución de los puntos del contorno suficiente para describir la geometría y condiciones de contorno del problema. Se adopta para los problemas a estudiar un número total de puntos del contorno $M = 768 + 900H$. Se supone que la distribución de los puntos del contorno es adecuada y se hace variar la distribución de las fuentes en dos pruebas. Para las iteraciones de la solución del sistema de ecuaciones con el esquema multipolar, se utiliza $p = 8$. A fines de ajustar las intensidades de las fuentes con una reducción adicional del error, luego de obtenida la solución se efectúa un paso adicional del AMR para el cálculo de una regresión lineal con un solo término, utilizando $p = 12$.

Comparación del Esquema de Interacciones Directas y el Esquema Multipolar con un Número de Fuentes Pequeño

Como primera prueba, se calcula una solución por el MSF con una distribución aproximadamente uniforme de $N = 16H + 32$ fuentes sobre una superficie curva que encierra el cilindro, ubicada a una distancia de la superficie del cilindro entre 2 a los lados y $\frac{H}{4} + 3$ en los extremos del eje del cilindro. Con los parámetros dados del algoritmo multipolar, los errores relativos en los potenciales obtenidos a partir de la solución de

las ecuaciones, son del mismo orden de magnitud de los correspondientes al esquema de interacciones directas. En este caso, con un número de fuentes muy pequeño en comparación con el número de puntos del contorno, dichos errores relativos son del orden de 10^{-2} , y los errores relativos en las derivadas normales son aproximadamente tres veces mayores que en los potenciales. Se observa una tendencia a aumentar ligeramente el número de iteraciones en el esquema multipolar. La figura 5.1 muestra los tiempos de ejecución de corridas entre $H = 2$ y $H = 80$, correspondientes a un número de puntos en el contorno entre $M = 2568$ y $M = 72768$. Los tiempos en el esquema de interacciones directas son siempre menores que en el esquema multipolar, dentro de este rango de problemas, dado que la matriz se construye y almacena solamente una vez, y la dificultad computacional en cada iteración de la solución de las ecuaciones está en el cálculo de dos productos matriz–vector solamente. Sin embargo, dado que M y N son ambas funciones lineales de H , y el número de iteraciones K es aproximadamente proporcional a N , el tiempo en el esquema de interacciones directas crece en forma aproximadamente proporcional a N^3 , mientras que el tiempo en el esquema multipolar muestra una tendencia que se acerca más bien a una función cuadrática.

Aunque la comparación de los tiempos de ejecución en la figura 5.1 no muestra ventajas en el uso del esquema multipolar frente al esquema de interacciones directas con almacenamiento de la matriz, en este rango de problemas, la figura 5.2 muestra que la memoria usada es menor en el esquema multipolar, de manera que este último demuestra ser ventajoso para este tamaño de problemas si la memoria disponible es pequeña. Esta ventaja se hace más evidente considerando que al utilizar el esquema de interacciones directas sin almacenar la matriz, de forma que sus elementos deben recalcularse en cada producto matriz–vector, se encuentra que los tiempos de ambos esquemas se igualan cuando el tamaño de la matriz es de aproximadamente 43968×800 .

Al aplicar el esquema multipolar, si se compara el enfoque de mínimos cuadrados con el de colocación directa del MSF dentro del rango anterior, además de reducirse

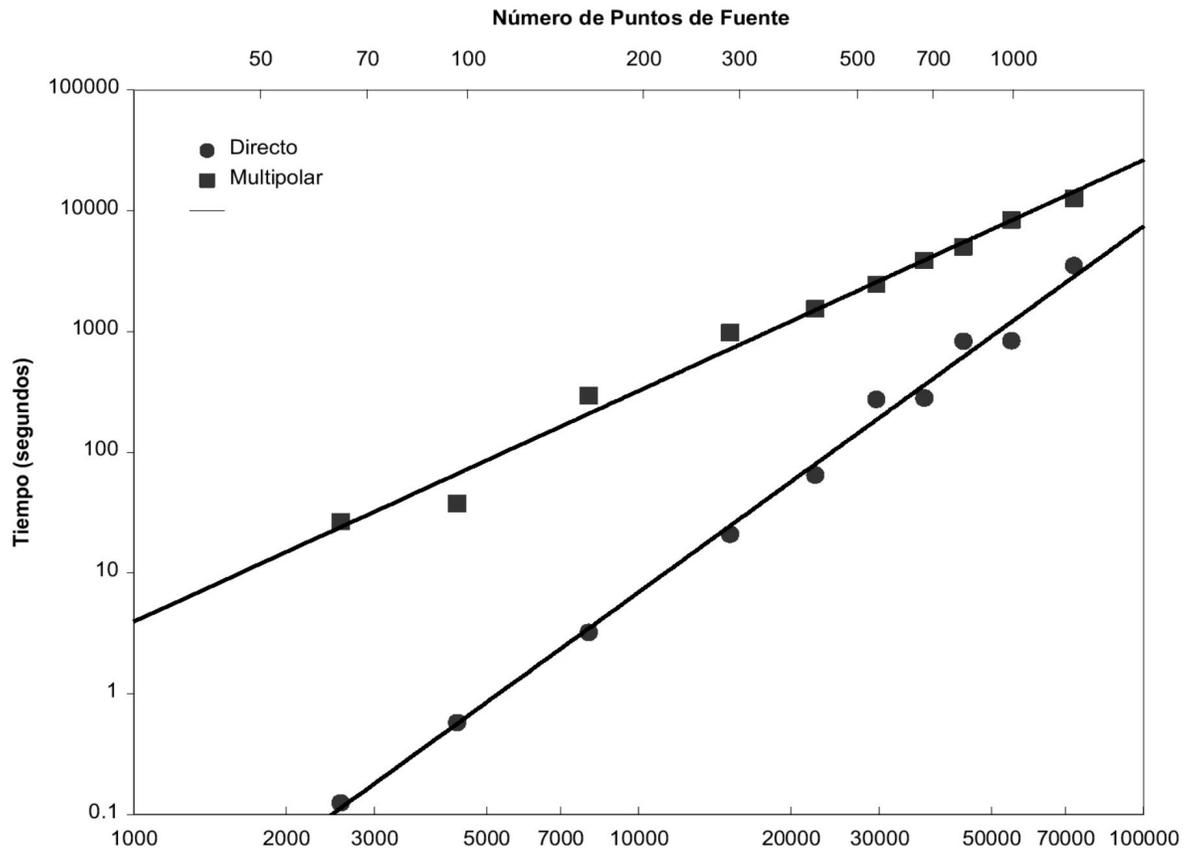


Figura 5.1: Tiempos de ejecución por los métodos directo y multipolar en problemas de diferentes tamaños.

el número de fuentes en la solución por mínimos cuadrados, se observa que el cálculo del producto transpuesto es más eficiente, dado que N es grande comparado con M y las celdas de fuente, las cuales en este producto están compuestas por los puntos del contorno, se agrupan al formar las regiones de interacción en menor número que en el caso del producto directo, debido a que los puntos del contorno están concentrados en una capa interior de menor tamaño.

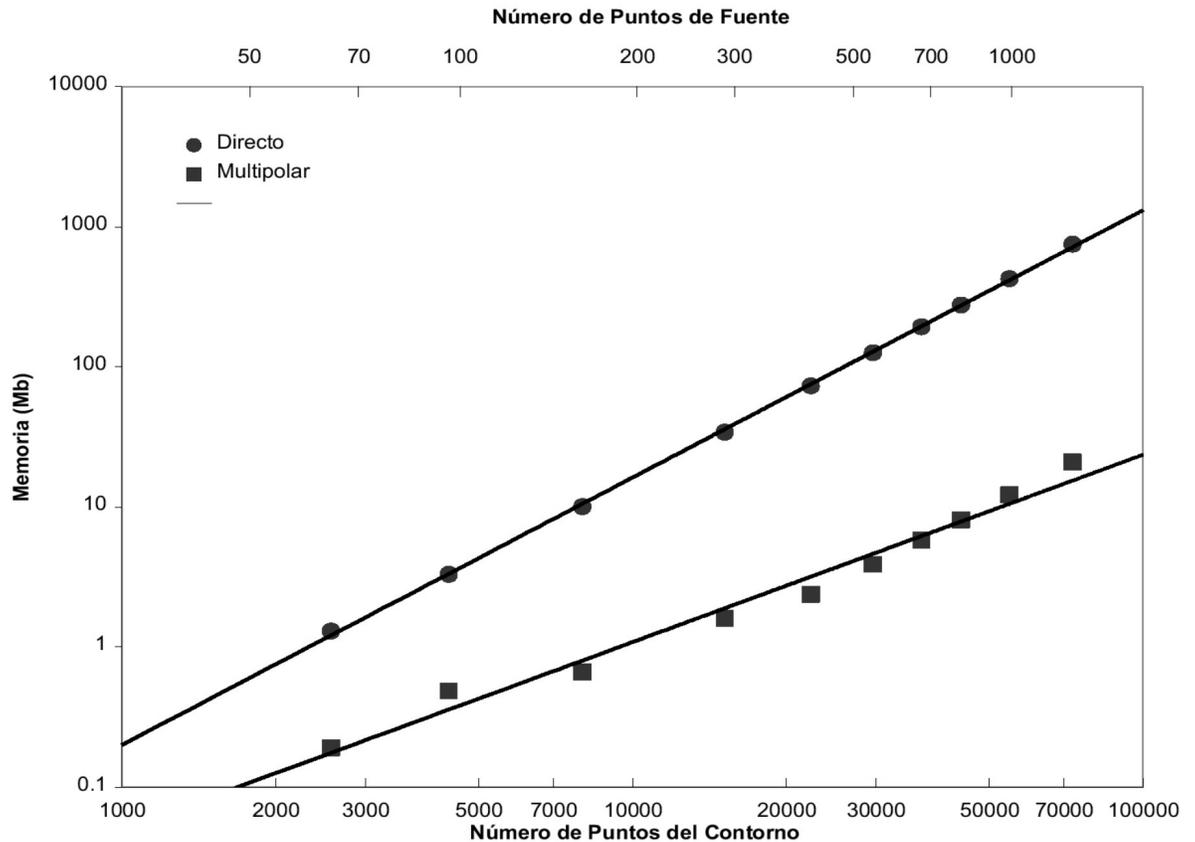


Figura 5.2: Consumo de memoria de los métodos directo y multipolar en problemas de diferentes tamaños.

Comparación del Esquema de Interacciones Directas y el Esquema Multipolar al Aumentar el Número de Fuentes

Debe esperarse obtener un mejor rendimiento del esquema multipolar al aplicarlo a problemas más grandes. De hecho es deseable obtener una solución de los problemas anteriormente presentados con un mayor número de fuentes, a fin de reducir el error. Sin embargo, debe tenerse cuidado al agregar puntos de fuente dado que el problema de mínimos cuadrados puede volverse muy mal condicionado. En este caso es de interés la reducción del error que puede lograrse al dividir las fuentes. En una segunda secuencia de experimentos numéricos, se investiga la reducción del error al agregar nuevas fuentes en la vecindad de las anteriores. Para esto, aunque estrictamente no se tiene construida

una malla sobre la capa de fuentes, ésta se considera dividida en áreas triangulares asociadas a cada punto de fuente. De esta manera, se agregan puntos de fuente ubicados en los puntos medios de los arcos que conectan la fuente original con los vértices de su triángulo asociado, obteniéndose así un número de fuentes $N = 64H + 128$. Para el esquema de interacciones directas, las columnas correspondientes de funciones de base son agregadas a la matriz \mathbf{X} , y se resuelve un nuevo problema de mínimos cuadrados utilizando como valores iniciales las intensidades de fuente obtenidas anteriormente. Explícitamente esto se efectúa reinicializando el esquema iterativo de solución para calcular los incrementos en las intensidades de las fuentes para el nuevo conjunto completo de fuentes, sustituyendo el vector \mathbf{y} por los residuos del ajuste anterior. En el esquema multipolar se realizan las mismas operaciones, sustituyendo los productos matriz–vector por pasos del AMR, y en este caso los residuos utilizados para el cálculo de los incrementos de intensidades de las fuentes tienen una precisión mejorada, ya que en el último paso de la solución anterior fueron calculados con $p = 12$.

La figura 5.3 muestra los tiempos de ejecución de las corridas correspondientes a los mismos problemas de la secuencia anterior con el nuevo número de fuentes, es decir el cuádruplo de los valores anteriores de N . Los errores relativos en este caso son del orden de 10^{-4} , siendo este valor más representativo del error deseable en una aplicación práctica de ingeniería. Se observa siempre que los tiempos son menores en el esquema de interacciones directas cuando el número de fuentes es más pequeño, y de igual manera son siempre aproximadamente proporcionales a N^3 . Por otra parte, los tiempos en el esquema multipolar muestran una tendencia aproximadamente proporcional a $N^{5/3}$, y las ventajas en el uso del esquema multipolar se hacen evidentes por encima del punto correspondiente a un tamaño de la matriz de 54768×3968 . En la figura 5.4 se observa que al aumentar el número de fuentes solamente se produce un incremento relativamente pequeño en el uso de memoria del esquema multipolar, mientras que la memoria correspondiente al esquema de interacciones directas aumenta considerablemente.

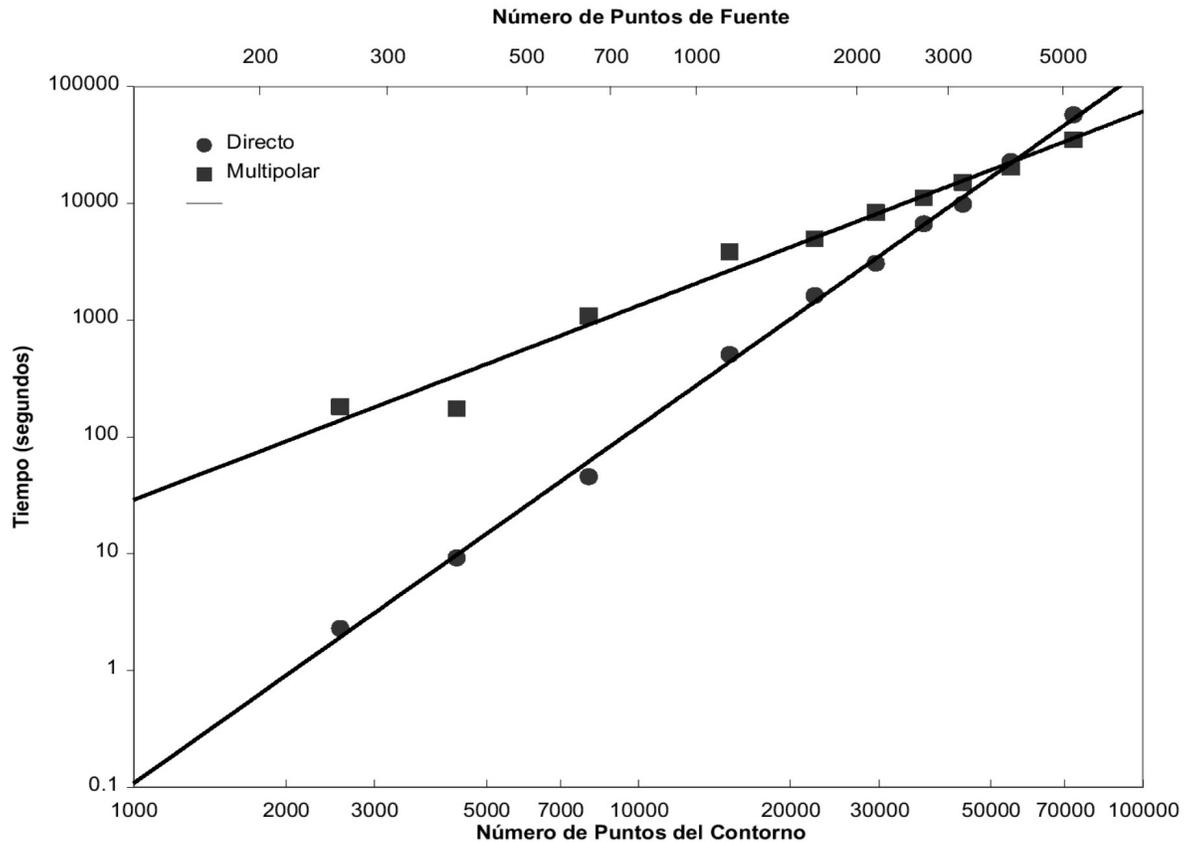


Figura 5.3: Tiempos de ejecución de los métodos directo y multipolar después de la división de las fuentes.

Al utilizar el esquema de interacciones directas sin almacenar la matriz, de forma que sus elementos deben recalcularse en cada producto matriz–vector, se encuentra que los tiempos de ambos esquemas se igualan cuando el tamaño de la matriz es de aproximadamente 15168×1152 , de manera que si no hay memoria disponible suficiente para almacenar la matriz, es recomendable el uso del esquema multipolar a partir de 1000 puntos de fuente. Aunque con el desarrollo tecnológico actual existe un aumento constante de la velocidad y memoria de los equipos de computación, la utilización de memoria superior a los 500Mb en arquitecturas de computadoras tipo PC es bastante reciente. Con la utilización del esquema multipolar, este problema numéricamente intensivo se hace entonces, en términos del uso de memoria, accesible a computadoras

de uso generalizado. De igual manera el esquema multipolar es recomendable a partir de los 1000 puntos de fuente para problemas no lineales de mínimos cuadrados u otros en los cuales sea necesario el cálculo de los elementos de la matriz en cada iteración.

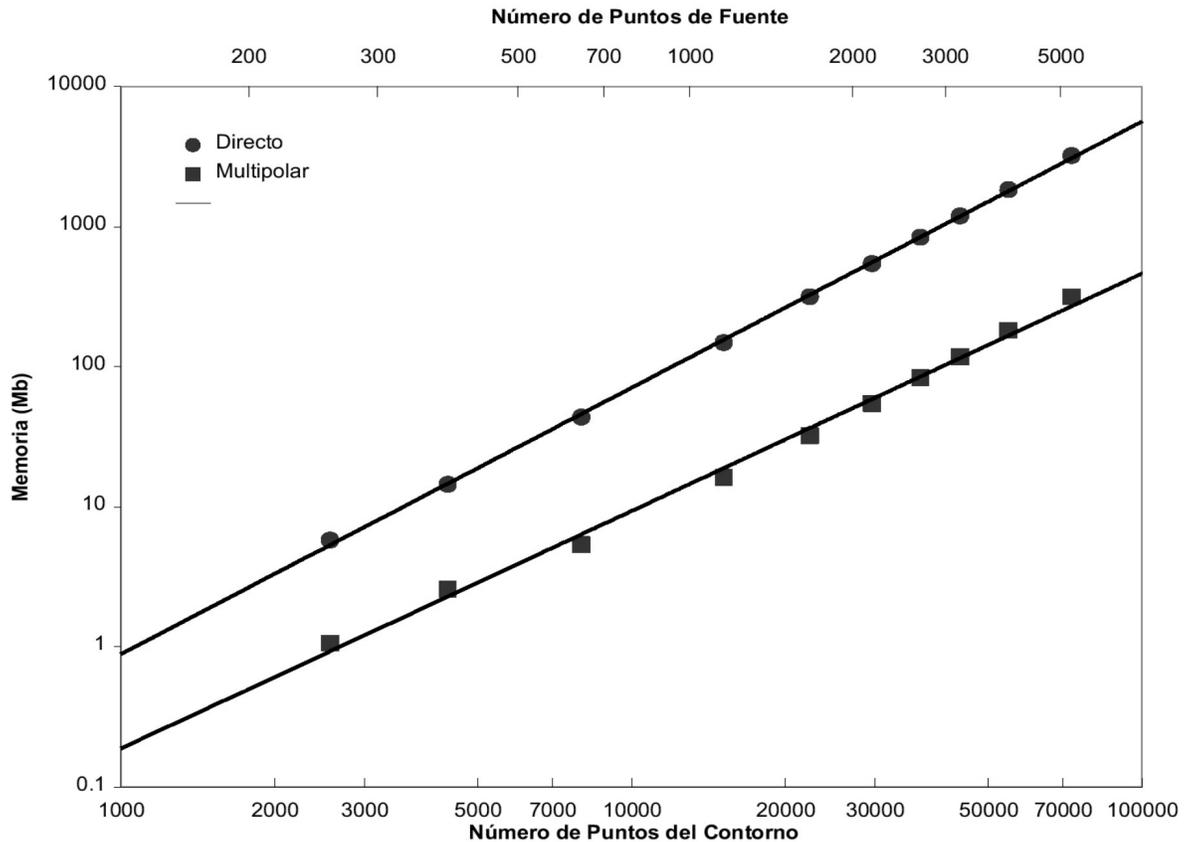


Figura 5.4: Consumo de memoria de los métodos directo y multipolar después de la división de las fuentes.

En el caso de condiciones de contorno de Neumann, el tiempo del producto transpuesto en el esquema multipolar aumenta apreciablemente. Los resultados de corridas adicionales en las cuales se imponen potenciales sobre las caras circulares y derivadas normales sobre las paredes cilíndricas, muestran un incremento en tiempo con respecto a los problemas anteriores, el cual está alrededor del 10% en el caso del esquema de interacciones directas, y en el caso del esquema multipolar el incremento está entre 21%

y 57%. Pese a la eficiencia reducida en problemas de Neumann, el esquema multipolar es siempre preferible cuando el número de fuentes es superior a 4000.

Como se mencionó en la sección 4.6, el AMR en el enfoque de colocación directa da también una solución acelerada cuando el número de fuentes y de puntos del contorno es mayor que 4000. Esta coincidencia en el umbral de aceleramiento se debe a la alta eficiencia en el producto transpuesto, lo cual hace que su influencia sobre el tiempo total en cada iteración sea relativamente pequeña. Se concluye entonces que este número de fuentes puede establecerse como un umbral en ambos enfoques del MSF para decidir entre la utilización del esquema de interacciones directas y el multipolar.

Capítulo 6

El Método de las Soluciones Fundamentales con Refinamiento Adaptativo

Una desventaja de métodos como el BEM es el costo computacional de evaluar las integrales de frontera. Por otra parte, el incremento en el número de puntos de integración necesario para las integrales de simple capa y doble capa en el Método de Elementos de Frontera solamente es importante en las interacciones de corto alcance, por lo cual no se obtiene todo el provecho que se podría esperar al utilizar métodos de acumulación rápida. De lo anterior se infiere que el Método de las Soluciones Fundamentales es preferible tanto por la reducción del costo computacional como por la sencillez en su formulación, siendo esta última ventaja importante para su adaptación a la solución de otros problemas de valores en la frontera. En vista de las ventajas y posibilidades de aplicación del método, se examina en este trabajo la forma de mejorar su precisión.

El error debido a la solución del sistema de ecuaciones lineales depende básicamente de la rutina de computación matricial usada, y puede considerarse despreciable con respecto al error de discretización, el cual es consecuencia de la incapacidad de las ubicaciones de las fuentes seleccionadas para representar adecuadamente el campo correspondiente a las condiciones de contorno impuestas. En este contexto, el refinamiento selectivo y localizado de la discretización se manifiesta como una propiedad natural y

deseable en contraposición con un enfoque de discretización fijada inicialmente.

La solución por mínimos cuadrados permite cierta flexibilidad en el balance del error sobre los puntos del contorno mediante el ajuste de las intensidades y posiciones de las fuentes. Esta flexibilidad representa un papel protagónico en el planteamiento del algoritmo de refinamiento que se presenta en el presente capítulo. En este trabajo se hace énfasis sobre la estrategia del refinamiento, dejando el campo abierto para el estudio más detallado de los indicadores y parámetros del algoritmo.

6.1 Antecedentes y Consideraciones Preliminares sobre el Refinamiento en el MSF

Al contrario de lo que sucede en un algoritmo fijo en el cual el número y ubicación de las fuentes están definidos al inicio del proceso, en un enfoque adaptativo estos parámetros se consideran parte de la solución del problema. Johnston, Fairweather y Karageorghis ([38] y [40]) propusieron un esquema adaptativo en el cual los coeficientes de la representación lineal del potencial, así como la posición de las fuentes, las cuales están dadas en un número fijo, son escogidas por medio de un algoritmo de mínimos cuadrados no lineal. Este esquema es un problema de optimización no lineal que solamente distribuye un número fijo de fuentes y cuya solución puede tomar un tiempo muy largo.

Los conceptos de estimados de error a posteriori y refinamiento adaptativo de mallas han sido utilizados con éxito en múltiples aplicaciones del método de elementos finitos. Rank y Werner [64] demuestran la efectividad del refinamiento para mejorar la precisión en el cálculo de flujo potencial bidimensional con superficie libre. Más recientemente, estos conceptos han sido adaptados en el método de elementos de frontera (BEM), el cual debería ser más efectivo para estos tipos de problemas. La efectividad en el uso de métodos de contorno como el BEM resulta de la reducción de la dimensionalidad del problema y la alta precisión. Esta última es altamente dependiente de la discretización

empleada, y no necesariamente se obtiene una alta precisión. Por esta razón se han desarrollado en la literatura criterios para la aceptación de soluciones del BEM que han sido usadas para determinar qué partes de la discretización del modelo deberían mejorarse para obtener una mejor precisión. Esto se logra mediante indicadores de corrección *a posteriori*, es decir cantidades calculadas después de obtener una solución inicial. La escogencia de un indicador de corrección confiable es por lo tanto crucial para el desarrollo de una estrategia de refinamiento adaptativo. Los procedimientos adaptativos basados en análisis de sensibilidad de las soluciones están ahora bien establecidos en el BEM, ver por ejemplo [28] y [29]. La investigación en la misma dirección enfocada al método de las soluciones fundamentales (MSF) ofrece la posibilidad de soluciones con mayor rapidez y precisión.

El trabajo sobre el MSF adaptativo presentado a continuación se centra sobre el mejoramiento de la distribución de fuentes. En el proceso de refinamiento se agregan nuevas fuentes utilizando un indicador de corrección que se relaciona con el análisis de sensibilidad de la solución. Sin embargo, debido a las características particulares del MSF, especialmente la ubicación de los puntos de fuente y los puntos del contorno sobre superficies separadas, se necesita un enfoque diferente. Por consiguiente el refinamiento que se presenta para la distribución de las fuentes utiliza un nuevo enfoque basado en conceptos tomados de la estadística, y no en los procedimientos clásicos adaptativos de reconstrucción de mallas utilizados en otras técnicas numéricas. A fines de introducir el método de refinamiento, el procedimiento de solución numérica para determinar las intensidades de las fuentes se presentó como un problema de mínimos cuadrados, en el cual las variables de predicción son dadas como funciones de base correspondientes a fuentes de intensidad unitaria o a sus derivadas normales. Se utiliza la idea básica de efectuar un análisis de sensibilidad de la solución previa para definir un posible estimador de error que pueda dar información sobre la precisión global de la solución

numérica. Sin embargo, el criterio de corrección se expresa en términos de “parámetros significativos” en regresión lineal múltiple.

La precisión en la solución de mínimos cuadrados depende del cuadrado del número de condición, lo cual puede ser perjudicial si se toman como variables el número y posición de las fuentes, dado que en tal caso la matriz resultante del MSF puede ser mal condicionada. En consecuencia, es necesario buscar la manera de mejorar el condicionamiento de la matriz o reducir el número de puntos de fuente, a fin de obtener un esquema más preciso sin el inconveniente del alto costo computacional relacionado con el incremento en el número de iteraciones. En vez de utilizar la SVD y eliminar fuentes redundantes, se efectúa un procedimiento de *refinamiento adaptativo*, constituido por un mejoramiento secuencial de la distribución de las fuentes por medio de división de las fuentes según un análisis de error *a posteriori* [29], utilizando un procedimiento de selección de subconjuntos de mejores variables de predicción en regresión lineal múltiple. En este procedimiento se considera que la alta correlación entre las variables de predicción puede reflejarse como colinealidad y mal condicionamiento del problema de mínimos cuadrados. Por consiguiente, la selección secuencial de variables de predicción se dirige en cierto sentido a minimizar los efectos de interacciones entre fuentes vecinas sobre la solución de las ecuaciones lineales, guiando de esta manera la reducción secuencial del error global a partir de una distribución gruesa inicial de las fuentes.

6.2 Determinación de las Mejores Variables de Predicción en Análisis de Regresión

En general en un análisis de regresión se desea saber cuántas variables independientes son adecuadas para incluirlas en el ajuste. La regresión múltiple es una técnica tentadora en la cual el efecto de introducir una variable adicional de predicción es el de reducir el error, por lo cual uno podría estar tentado a hacer una especie de apuesta in-

troduciendo muchas variables de predicción y esperando que por lo menos unas cuantas de ellas resulten ser significativas.

Como se mencionó en 3.4.1, las técnicas de la descomposición en valores singulares (SVD) suelen ser recomendables contra la multicolinealidad y el mal condicionamiento de la matriz como los que se presentan frecuentemente en análisis de regresión. La salida directa de las rutinas de la SVD dan un indicador de redundancia de las variables de predicción, el cual está relacionado con las incertidumbres probables en los estimados de los parámetros. Cuando hay un número prácticamente ilimitado de variables independientes involucradas, dicha redundancia puede manifestarse solamente después de que se han incluido muchas variables en la ecuación de regresión. La razón de esto es que, más bien frecuentemente, las observaciones no distinguen claramente entre dos o más de las funciones de base dadas. En este sentido, para introducir el esquema de refinamiento, nos basaremos en el concepto del MSF por mínimos cuadrados interpretado como un problema de regresión múltiple, en el cual se espera que la introducción de fuentes adicionales en forma gradual y controlada, reduzca el error en la solución.

A los fines de determinar cuáles son las fuentes más significativas en una distribución dada de fuentes en el MSF, consideraremos los siguientes criterios de análisis de regresión en vez de examinar los valores singulares (SV) del sistema correspondiente, debido al costo computacional involucrado en esa estimación. En este sentido, la ecuación de regresión expresa la mejor predicción de la variable dependiente \mathbf{y} , dadas las variables independientes \mathbf{X} . Los datos se ajustarán al modelo solamente en forma asintótica y suele haber una variación sustancial de los puntos observados alrededor de los puntos de la predicción \mathbf{Xb} . Más allá de encontrar los parámetros de mejor ajuste, se necesitan medidas para evaluar lo adecuado del ajuste, de donde se obtendrán criterios para el refinamiento selectivo.

6.2.1 Criterio Basado en la Desviación Estándar de los Parámetros Estimados

En un análisis de regresión, la bondad del ajuste está relacionada con la precisión que se puede lograr en la determinación de los parámetros por el conjunto de datos. En otras palabras, necesitamos estimar la incertidumbre probable en los parámetros de mejor ajuste, ya que obviamente los errores de medición en los datos deben introducir cierta incertidumbre en la determinación de esos parámetros. Si las observaciones son independientes, la consideración de la propagación de errores da una medida de los errores probables en los parámetros de mejor ajuste, la cual es llamada la varianza de los estimados de los parámetros $\sigma^2(b_j)$, como se indicó en 5.2.1. Sabemos que esta varianza es proporcional a los elementos de la diagonal de la matriz \mathbf{C} y de ahí que los valores c_{jj} pueden usarse para comparar la significancia de los parámetros estimados b_j . Un valor relativamente grande es un indicador de redundancia. Para caracterizar apropiadamente la incertidumbre de la estimación de parámetros, los elementos fuera de la diagonal dan la indicación inicial de la tendencia a la variación conjunta entre los errores de pares de parámetros. Para un análisis más detallado de los aspectos en la presente sección puede consultarse, por ejemplo, el libro de Neter y colaboradores [56].

Aunque las hipótesis de la estimación por máxima verosimilitud subyacentes en la definición de la varianza de parámetros rara vez se llevan a cabo, estos valores pueden usarse con bajo riesgo para identificar dichas redundancias en un sentido práctico, bajo el supuesto de que el tamaño de muestra M sea suficientemente grande. Dado que el ajuste por mínimos cuadrados evita los residuos grandes, puede ser que dicho ajuste acomode algunos puntos a expensas de otros en el conjunto de datos si dichos puntos tienen mayor “brazo de palanca”, es decir si estos datos corresponden a puntos que están en cierto sentido alejados de la masa de datos. Este brazo de palanca se refleja en valores relativamente pequeños de los c_{jj} , y está ligado completamente a las variables de

predicción y no a la variable dependiente o de respuesta. De aquí se infiere la necesidad de tomar un valor relativo, y por lo tanto la consideración más frecuente es que los parámetros más significativos son aquellos cuyo valor relativo b_j^2/c_{jj} es grande.

En aplicaciones estadísticas, las observaciones discrepantes pueden ser producidos por errores evidentes durante la recopilación de los datos, o pueden ser también observaciones genuinas. Bajo el supuesto de que el modelo refleje en cierta forma las variaciones en los datos, aquellos puntos que son calificados colectivamente como observaciones discrepantes al fallar una función de regresión reducida para acomodar dichos puntos, pueden volverse influyentes, es decir, pueden tener colectivamente una influencia grande sobre la función de regresión ajustada, en comparación con otras observaciones en el conjunto de datos. Una discusión detallada sobre los efectos de las observaciones discrepantes puede encontrarse, por ejemplo, en libros como el de Chatterjee y Hadi [11]

6.2.2 Criterio Basado en la Partición de Sumas de Cuadrados

Como se indicó en 5.2.2, el valor de R^2 se puede interpretar como la fracción de la variabilidad original que ha sido explicada por la regresión, siendo entonces un indicador de la bondad del ajuste. En general, al aumentar el número de variables de predicción, aumentará el valor de R^2 , pero llega un punto en el cual el incremento no es significativo. Dado que en la construcción de modelos, se intenta reducir la realidad a proporciones manejables, solamente es posible incluir un número limitado de variables de predicción en un modelo de regresión para cualquier situación de interés. Por lo tanto, un problema central en muchos estudios exploratorios es el de escoger, para un modelo de regresión, un conjunto de variables que sea “bueno” en cierto sentido para los propósitos del análisis. Una consideración importante al hacer esta escogencia es el punto hasta el cual contribuye una variable escogida a reducir la variación restante en Y después de permitir las contribuciones de otras variables de predicción que han sido tentativamente incluidas en el modelo de regresión. Una suma de cuadrados extra mide la reducción

marginal en la suma de cuadrados de errores SSE cuando una o varias variables de predicción son añadidas al modelo de regresión, dado que otras variables de predicción están ya presentes en el modelo. Dicho en forma equivalente, dado que la $SSTO$ no depende del modelo de regresión ajustado, se puede visualizar una suma de cuadrados extra como la medida del incremento marginal en la suma de cuadrados debida a la regresión SSR cuando una o varias variables de predicción son agregadas al modelo de regresión. En regresión múltiple, se pueden obtener variadas descomposiciones de la suma de cuadrados debida a la regresión SSR en sumas de cuadrados extra.

Las sumas de cuadrados extra son útiles para efectuar pruebas sobre los coeficientes de regresión y sobre la multicolinealidad, una condición en la cual las variables de predicción están altamente correlacionadas. La importancia relativa de los efectos de diferentes variables de predicción sobre la variable de respuesta se puede evaluar fácilmente si las variables de predicción no están correlacionadas entre sí ni con cualesquiera otras variables que están relacionadas con la variable de respuesta pero que no han sido incluidas en el modelo. Cuando las variables de predicción son correlacionadas entre ellas, se dice que existe *intercorrelación*. Cuando dicha intercorrelación es muy alta, puede verse como *multicolinealidad*, la cual da origen a una variedad de problemas. En primer lugar, hay muchas opciones de variables de predicción que se ajustan igualmente a los datos, y en segundo lugar, la interpretación común de un coeficiente de regresión como la medida del cambio en el valor esperado de la variable dependiente por unidad de incremento en la variable de predicción correspondiente, manteniendo constantes todas las demás variables de predicción, no se puede aplicar completamente, dado que no es posible en la práctica mantener constantes todas las demás variables de predicción si están correlacionadas con la variable que se está incrementando. Cuando las variables de predicción presentan correlación, no hay una suma de cuadrados única que pueda ser adscrita a una variable de predicción de manera que refleje un efecto sobre la reducción

de la variación total en Y , de ahí que cuando se agrega una de dichas variables de predicción, se obtiene relativamente poca información más allá de la dada por las otras. El intento de separar la contribución “individual” de cada b_i a la SSR en dichos casos puede llevar a que sus contribuciones presente valores negativos sin sentido.

6.2.3 Algoritmos para la selección de mejores subconjuntos de variables de predicción

La identificación de subconjuntos “buenos” de variables de predicción potencialmente útiles para ser incluidas en el modelo de regresión final, suele constituir uno de los problemas más difíciles en análisis de regresión. Si se incluyen demasiadas variables de predicción en el subconjunto, el modelo sobredimensionado generalmente da como resultado varianzas de los parámetros estimados que son mayores que las correspondientes a modelos más simples. Un alto grado de correlación entre las variables de predicción es responsable de una variabilidad exagerada de los coeficientes de regresión estimados.

Un procedimiento para la selección del mejor subconjunto podría ser el considerar todos los posibles subconjuntos de la disponibilidad de variables de predicción potenciales, y luego identificar para examinar en detalle unos pocos subconjuntos “buenos” de acuerdo a cierto criterio. Para el caso del problema que estamos considerando, con un número posiblemente ilimitado de fuentes, esta es ciertamente una tarea imposible de completar. Un procedimiento menos costoso computacionalmente podría ser ajustar un modelo sobredimensionado con todas las variables de predicción y luego realizar una eliminación hacia atrás de aquellas variables de predicción que muestren los efectos más pequeños sobre la variable de respuesta. Este procedimiento sería muy similar al de eliminación de los valores singulares menos significativos, y no es eficiente desde el punto de vista computacional. Para reducir la carga computacional en la selección de los mejores subconjuntos, han sido desarrollados en la práctica del análisis de regresión, algoritmos que requieren solamente el cálculo de una fracción muy pequeña de todos

los modelos de regresión posibles. Un procedimiento automático que construye secuencialmente el “mejor” subconjunto de variables de predicción es de mucha ayuda cuando la disponibilidad total de variables de predicción potenciales contiene más de unas 60 variables.

El procedimiento de *regresión por pasos* hacia adelante es probablemente el más usado de los métodos de búsqueda automática. Esencialmente, este método de búsqueda construye una secuencia de modelos de regresión, añadiendo o eliminando en cada paso una variable de predicción. El criterio para añadir o eliminar una variable puede plantearse, por ejemplo, en términos de la reducción de la *SSE*. Esto involucra el ajuste de un modelo de regresión lineal con cada una de las variables adicionales potenciales en cada paso, y la realización de una prueba estadística sobre la reducción de la suma de cuadrados. Una debilidad de estos procedimientos es que pueden errar a veces al identificar como “el mejor” un modelo de regresión pobre, es decir, un mínimo local, y además la identificación de un único modelo de regresión puede esconder el hecho de que varios otros modelos de regresión pueden ser también “buenos”.

En el presente trabajo se propone utilizar un procedimiento en el cual varias variables son añadidas simultáneamente, dado que existe una tendencia a la presencia de muchas variables que son igualmente significativas, y el procedimiento sucesivo de ajuste se estructura de manera que se saca el mejor provecho de los resultados del modelo correspondiente al último paso anterior. El procedimiento se basa intuitivamente en la consideración del efecto que producen sobre el ajuste las *observaciones discrepantes*, entendiéndose como tales aquellos puntos en los cuales se producen errores extremos. Los residuos de las observaciones discrepantes pueden identificarse en la manera tradicional del análisis de regresión mediante gráficos del error. Las observaciones discrepantes pueden crear gran dificultad, y cuando se encuentra uno, la primera sospecha es que este punto es el resultado de una equivocación u otro efecto extraño, y por lo tanto

debería descartarse. Una razón importante para descartarlo es que al aplicar el método de los mínimos cuadrados, la superficie de respuesta ajustada puede ser “estirada” en forma desproporcionada hacia una observación lejana. Desde otro punto de vista, las observaciones discrepantes pueden acarrear una información significativa, como es el caso en que una observación discrepante se presenta debido a la interacción con otra variable de predicción que no ha sido incluida en el modelo.

6.3 Estrategia de Refinamiento Adaptativo

Un método de refinamiento adaptativo puede describirse como un proceso en el cual se efectúa la construcción de una discretización casi-óptima en el transcurso de los cálculos, de acuerdo a un indicador de corrección obtenido de las discretizaciones anteriores. Un algoritmo de refinamiento adaptativo para el MSF está constituido por una serie de pasos, cada uno de los cuales efectúa un mejoramiento selectivo de la distribución de las fuentes. En el presente enfoque, el problema de la selección de fuentes es visualizado como un esquema de estimación de parámetros en el cual se desea seleccionar un subconjunto de mejores campos de intensidad unitaria o soluciones fundamentales como variables de predicción para ajustar los campos en los puntos de colocación del contorno dados.

En el problema de regresión correspondiente al MSF por mínimos cuadrados, las variables dependientes son los valores en el contorno, las variables independientes son las soluciones fundamentales

$$x_{ij} = \Phi^*(P_i, Q_j) \quad (6.1)$$

Bajo el supuesto de una distribución de los puntos del contorno suficiente para describir adecuadamente la geometría y condiciones de contorno del problema, este procedimiento se centra en un mejoramiento de la distribución de las fuentes. Para

evitar la inclusión prematura de variables de predicción, las fuentes se dividen gradualmente en un número local mayor de fuentes de acuerdo a un indicador de corrección. El algoritmo de repartición de las fuentes se inicia con una distribución relativamente gruesa de puntos de fuente, y se obtienen nuevas fuentes mediante subdivisión de celdas asociadas de forma triangular. Se seleccionan para repartición los parámetros cuyo valor del indicador es mayor que un cierto valor predefinido. Esto se basa en un razonamiento intuitivo de acuerdo al cual la incapacidad del modelo para ajustar algunos puntos se debe a la necesidad de nuevos parámetros, en otras palabras es necesario un modelo de un orden mayor cuyos parámetros están altamente relacionados con dichos puntos defectuosamente ajustados. Es decir que los puntos discrepantes o puntos P_i en el contorno con errores grandes presentan la influencia mayor sobre las intensidades de las fuentes Q_j más significativas.

En cada paso k , se necesita *esparcir* algunas de las N_{k-1} fuentes del paso anterior, de manera que se agregan fuentes adicionales en sus vecindades. Las $N_k - N_{k-1}$ columnas correspondientes de funciones de base son añadidas a la matriz de diseño \mathbf{X} , y se resuelve un nuevo problema de mínimos cuadrados, de manera similar a la explicada en el capítulo anterior. En lo que sigue se presentan los detalles sobre la selección de las fuentes a esparcir y la geometría usada en el refinamiento.

6.4 Indicadores de Refinamiento

Las soluciones numéricas aproximadas obtenidas por el MSF son sensibles a la selección de los puntos de colocación sobre el contorno y a la selección de los puntos de fuente. De hecho, conjuntos de puntos de fuente diferentes dan como resultado soluciones numéricas diferentes. Dichas soluciones numéricas se aproximarán solamente en forma asintótica a la solución exacta, la cual obviamente es insensible a las posiciones de los puntos. Dado que las ecuaciones del potencial y su derivada normal son identidades

matemáticas, solamente la influencia de cada fuente es sensible a su posición. El análisis de sensibilidad necesario para un refinamiento puede obtenerse por medio de cierto tipo de esquema de diferencias finitas que requeriría mover las fuentes una distancia finita con respecto a sus posiciones originales. En contraposición a dicho esquema numérico, un esquema analítico directo trataría de efectuar el análisis de sensibilidad para todos los puntos del contorno y puntos de fuente, utilizando valores tomados de la solución del sistema de ecuaciones lineales, en lugar de perturbar la solución cambiando las posiciones de las fuentes. Esto puede lograrse, por ejemplo, mediante la descomposición en valores singulares. Por otra parte, la solución por mínimos cuadrados nos da una forma directa de calcular la influencia de cada parámetro basada en la interpretación directa del grado relativo en que cada fuente o su correspondiente parámetro de regresión es *significativo* por medio del análisis de regresión, dando así como resultado un modo más razonable y menos costoso para obtener indicadores de refinamiento (ver [67],[68]).

La selección y esparcimiento de las fuentes en el procedimiento de ajuste y refinamiento debe encontrar una combinación de fuentes que incluya la menor cantidad de interacciones entre fuentes vecinas altamente correlacionadas que pudiera llevar a la colinealidad y mal condicionamiento del problema de mínimos cuadrados. En consecuencia, debe tenerse cuidado para evitar el colapso en el esquema de solución, producido por la inclusión prematura de variables de predicción. Esto se logra en este trabajo siguiendo lineamientos dados por los procedimientos de selección de subconjuntos de mejores variables de predicción en análisis de regresión, para guiar el refinamiento selectivo con reducción del error global. En otras palabras, los nuevos grupos de fuentes en cada paso de refinamiento se añaden sin aumentar significativamente el número de condición de la matriz resultante. En el enfoque de análisis utilizado en este trabajo para el MSF, la interacción que ocurre, en términos del análisis de regresión, entre observaciones y variables de predicción, se presenta en este caso entre los puntos del

contorno y las fuentes. La regresión por mínimos cuadrados mediante solución directa del sistema de ecuaciones, provee un indicador de refinamiento al calcular el grado relativo en que cada una de las fuentes es significativa, de acuerdo a la varianza de los parámetros dada en la ecuación (5.17). Si se desea utilizar esta información para el refinamiento es necesario notar que el refinamiento debe considerar los valores de los potenciales impuestos, no solamente la geometría de los puntos del contorno. Pueden entonces usarse como indicadores para guiar el proceso de refinamiento los valores relativos del grado en que las fuentes son significativas. Por lo tanto, de acuerdo a la prueba t y considerando que para un conjunto dado de datos la varianza σ^2 es constante, un posible criterio a examinar para la guía del proceso de refinamiento sería seleccionar como significativas aquellas intensidades de fuente cuyo valor indicador expresado como

$$s_j = \frac{|b_j|}{\sqrt{c_{jj}}} \quad (6.2)$$

es mayor que cierto valor prefijado, es decir los parámetros más significativos en el análisis de regresión (ver [56]). De esta manera sería posible refinar las fuentes sin incrementar sustancialmente el número de condición de la matriz resultante.

Como se comentó anteriormente, se sabe que la prueba t es una prueba marginal desde el punto de vista del enfoque general de pruebas para la regresión lineal. Por lo tanto no debe sorprender que la aplicación del criterio anterior no funcione en todos los casos. Un indicador alternativo para seleccionar las fuentes más significativas puede definirse en términos de la variabilidad explicada por la regresión, es decir en términos del ANOVA. Dado que el coeficiente de determinación R_a^2 se interpreta como una medida relativa de la reducción del error, se puede calcular un indicador local seleccionando la contribución de cada fuente a la suma total de reducciones de error que está representada en el coeficiente de determinación. Dado que para un conjunto de datos dado, los términos $\mathbf{Y}^T(\mathbf{Y} - \bar{\mathbf{Y}})$ y $\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}$ en las ecuaciones (5.30) y (5.31) son constantes, se

deduce que un incremento en R_a^2 se obtiene por los parámetros (fuentes en el caso del MSF) que producen los mayores valores de las componentes $b_j w_j$ (para valores fijos de j , es decir, no considerando en esta expresión el producto vectorial). En consecuencia, se escoge como criterio alternativo el siguiente término basado en el coeficiente de determinación

$$s_j = \frac{b_j w_j}{\mathbf{Y} \cdot \mathbf{Y}} \quad (6.3)$$

donde para fines de escalamiento se ha dividido el término entre el cuadrado de \mathbf{Y} . Nótese que el numerador de esta ecuación se refiere a los componentes individuales cuya suma se indica en la ecuación (5.30). En los ejemplos numéricos presentados más adelante se prueba la eficiencia de los dos indicadores, es decir los calculados utilizando la ecuación (6.2) o la ecuación (6.3), para la selección de las fuentes a ser refinadas.

La manera tradicional de afrontar la tarea de reducir el error en los métodos de elementos finitos y de elementos de contorno, es refinar la discretización en aquellas áreas en las cuales el error es mayor. Desde el punto de vista del ajuste por mínimos cuadrados, dichas áreas estarían indicadas por la presencia de puntos discrepantes. En el ajuste de las ecuaciones del MSF por mínimos cuadrados, dado que todas las condiciones de contorno impuestas son correctas, se infiere que todos los puntos de observación son genuinos. Por lo tanto se debe asumir que los puntos de contorno en los cuales el error es mayor y podrían ser catalogados inicialmente como *observaciones discrepantes*, indican que el modelo es inadecuadamente escaso en parámetros y por lo tanto se necesita un refinamiento. Una vez garantizado que el número de puntos de colocación en el contorno es suficientemente grande, y que la discretización inicial refleja, aunque en forma algo gruesa, las variaciones en el campo potencial, dichas observaciones discrepantes se convierten en observaciones *influyentes*. En consecuencia, el conjunto de variables de predicción debe ajustarse, y el error debe distribuirse utilizando el hecho

de que los puntos en el contorno P_i con errores grandes, tendrán las influencias mayores sobre las intensidades de las fuentes más significativas Q_j a través del correspondiente elemento x_{ij} de la matriz de soluciones fundamentales.

6.5 Criterio para la División de las Fuentes

Una solución del MSF secuencialmente refinada se inicia con una distribución definida arbitrariamente. En principio se necesita solamente definir una distribución de puntos del contorno suficiente para describir la geometría y condiciones de contorno del problema, y una distribución de fuentes que represente en líneas generales la forma del campo potencial. Suponemos que la distribución de los puntos del contorno se ha realizado en forma adecuada y nos centraremos en el refinamiento de las posiciones de las fuentes.

La idea básica es que la sensibilidad del error a cada una de las intensidades de fuente indicará cuáles de dichas fuentes puede ser dividida localmente en un número mayor de fuentes. A partir de la distribución gruesa inicial sobre una superficie dada, las nuevas intensidades se agregan por medio de la subdivisión de las fuentes en una estructura jerárquica. En cada paso, los indicadores de corrección s_j , dados por la ecuación (6.2) o la ecuación (6.3), se calculan sobre la distribución anterior, para seleccionar las áreas que deben refinarse. Los mismos indicadores pueden ser utilizados con diversas estrategias posibles para obtener una solución precisa en una forma eficiente.

En el proceso de repartición adoptado en este trabajo se utilizan los indicadores para dividir todas las fuentes con un valor $s_j \geq s_c$.

$$s_c = \alpha \bar{s} + (1 - \alpha) s_{\max} \quad (6.4)$$

donde s_{\max} es el valor máximo, \bar{s} es el valor promedio y α es una relación de refinamiento ajustable entre 0 y 1. Cabe hacer notar que con esta estrategia, cuando se utiliza $\alpha = 1$,

se refinarán todas las fuentes con un indicador mayor que el valor promedio \bar{s} , y con $\alpha = 0$ solamente se refinará la fuente con el valor máximo del indicador.

6.6 Solución de los Sistemas de Ecuaciones

En el presente trabajo el refinamiento se logra introduciendo nuevas fuentes. En cada paso del refinamiento puede efectuarse una partición de la matriz \mathbf{X} actualizada, a fin de obtener una solución en la cual se aprovechen los valores obtenidos en el paso anterior. Al aplicar la solución con cálculo directo y almacenamiento de la matriz de coeficientes, en cada paso k del refinamiento, se agregan $N_k - N_{k-1}$ columnas de funciones de base a la matriz de diseño \mathbf{X} . Se guardan \mathbf{C}_{k-1} y la factorización de Cholesky de \mathbf{A}_{k-1} , de manera que para actualizar el vector de parámetros y la matriz \mathbf{C}_k se requiere entonces solamente la inversión completa de una matriz pequeña. Las operaciones restantes son productos de matrices.

Para la solución con un método indirecto o iterativo, se puede utilizar GMRES con un tamaño del subespacio de Krylov que crece en cada iteración del procedimiento de refinamiento, pero se mantiene pequeño comparado con el número de puntos del contorno. De esta manera la memoria requerida para almacenar los vectores de base del esquema iterativo de solución crece en cada paso del refinamiento, pero es siempre menor que la requerida por la matriz \mathbf{X} completa. En vez de guardar una matriz cuadrada precalculada para las ecuaciones normales, el producto necesario en cada iteración se efectúa como dos productos matriz–vector, para reducir el efecto del error de redondeo. Si la matriz \mathbf{X} no se almacena, esta forma de realizar el producto es la única posible. Para el refinamiento con el método indirecto solamente es posible utilizar el indicador de la ecuación (6.3)

En los experimentos numéricos presentados más adelante se aplicaron ambos procedimientos de solución de las ecuaciones utilizando doble precisión en los cálculos, y

se observó que el uso del algoritmo de solución indirecta o iterativa fue siempre más eficiente que el directo. Además, se encontraron inestabilidades numéricas al utilizar el algoritmo directo con más de unas 250 fuentes en la discretización. En aquellos casos en que ambos algoritmos pudieron utilizarse, los valores del potencial en las soluciones numéricas correspondientes fueron idénticos.

6.7 Geometría de la División de las Fuentes

Para el esparcimiento de los puntos de fuente, se parte de una distribución gruesa inicial sobre una superficie dada y se efectúan divisiones subsiguientes de arcos sobre dicha superficie. La distribución de fuentes es entonces iterativamente repartida en regiones sucesivamente localizadas. Al contrario del BEM, el MSF es prácticamente libre de mallas de cálculo y correspondientemente en esta repartición en lugar de una estructura tradicional de malla se utiliza una estructura arborescente. Estas estructuras no tienen preferencia por una geometría dada, y son particularmente efectivas para discretizaciones en el MSF. Mediante la partición sucesiva de la distribución de fuentes en una jerarquía de regiones localizadas, se explora en detalle la región ramificada cerca de cada fuente a refinar, y las regiones más distantes se exploran en forma más gruesa.

De esta manera, dada una distribución inicial gruesa de puntos de fuente sobre una superficie que encierra el dominio original del problema, se utiliza una estructura con forma de árbol de ramificaciones triangulares sucesivamente generadas, para esparcir las fuentes sobre dicha superficie externa. En lo que sigue se introducirá la molécula computacional asociada con la construcción del árbol. Aunque estrictamente hablando la distribución no tiene una estructura de malla, para el propósito de automatizar el proceso de generación de puntos de fuente, a nivel local las áreas triangulares alrededor de las fuentes pueden considerarse como *celdas asociadas* que conectan los puntos de fuente vecinos.

En la solución del problema de mínimos cuadrados en una etapa dada del refinamiento, se desea aprovechar la reducción del error lograda con todas las generaciones previas de fuentes. Dado que se desea utilizar el algoritmo de refinamiento para crear y modificar las secuencias de distribuciones de fuentes, el enlace entre las generaciones y la creación de puntos *hijos* a ser añadidos a la secuencia, representa un papel importante en el procedimiento. En la secuencia de ramificaciones triangulares que se presenta en este trabajo, los puntos de fuente hijos son generados por medio de la simple bisección de los arcos que conectan el punto de fuente *padre* con los vértices del triángulo asociado. Las soluciones fundamentales correspondientes a los puntos hijos son agregadas a la matriz, y se mantiene el punto central o padre, de manera que el nuevo error obtenido al final de cada paso no puede ser mayor que el error ya obtenido con todas las fuentes previamente incluidas en la secuencia. De esta manera se realiza una partición iterativa de la distribución de fuentes, dando como resultado una jerarquía de regiones localizadas, y en la siguiente iteración, los hijos del nido formado por la celda asociada a cada padre, se convierten en nuevos padres. La construcción de un árbol de segundo orden, es decir, después de realizar el refinamiento en dos niveles, se muestra proyectado en el plano (ϕ, θ) en la figura 6.1.

Los algoritmos de refinamiento pueden aplicarse en diferentes contextos, por ejemplo para facilitar el desarrollo de generadores flexibles de estructuras arborescentes irregulares, o para refinar localmente un árbol dado. En estos casos no es necesario almacenar la secuencia completa de divisiones. Sin embargo, si más adelante se desea cambiar la configuración del árbol por medio de un desrefinamiento, es conveniente llevar nota de la conectividad o secuencia de ramificaciones. La modificación de la estructura ramificada en la contracción de fuentes para el desrefinamiento se explicará más adelante al tratar el problema no permanente. Aunque se pierde hasta cierto punto la libertad de no construir una malla, el procedimiento de construcción del árbol jerárquico presenta una gran flexibilidad y es relativamente simple, por lo cual se puede trabajar en

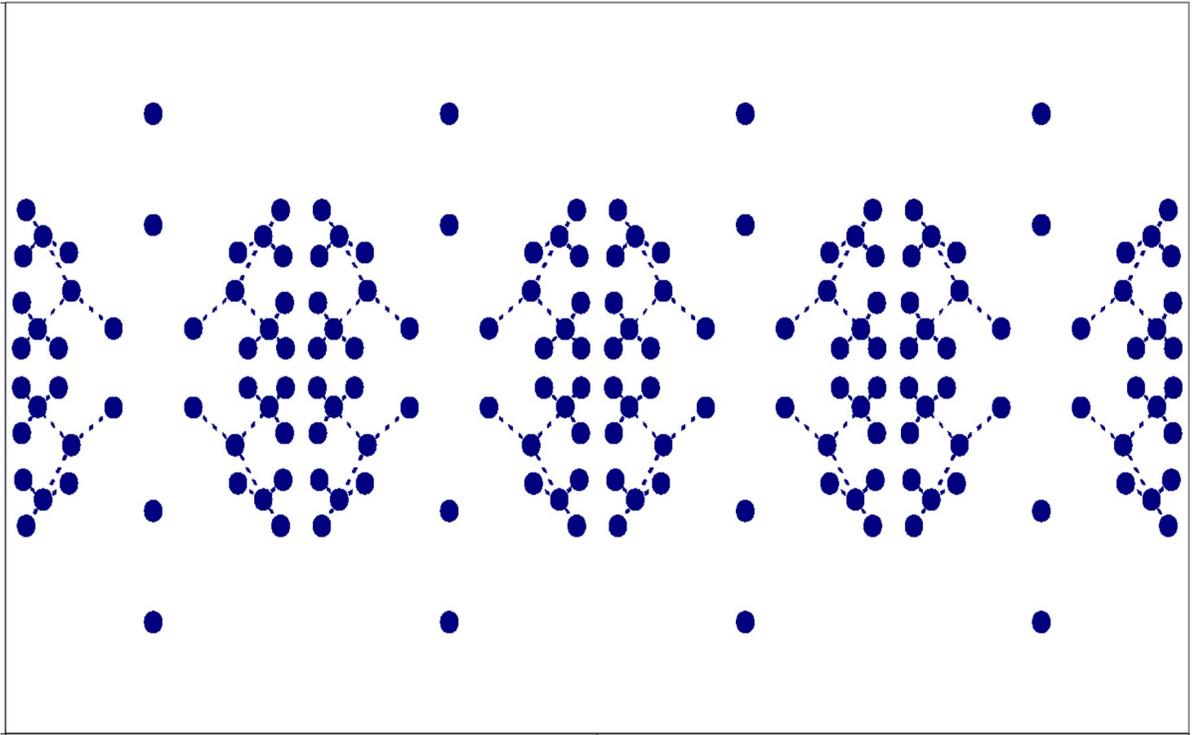


Figura 6.1: Estructura del árbol de refinamiento sobre la superficie de una esfera

un mejoramiento de la estructura molecular del algoritmo de refinamiento sin reducir la eficiencia del cálculo, ya que la carga computacional correspondiente al árbol tiene poca influencia sobre la totalidad de las operaciones necesarias para la solución de las ecuaciones en cada paso del refinamiento.

6.8 Terminación del Algoritmo de Refinamiento

Existen muchas formas posibles de definir un punto final para el proceso. Cuando el proceso termina debe cumplirse $N_k \leq M$. Antes de este límite absoluto, considerando el balance entre el costo computacional y la precisión, puede especificarse un máximo número de fuentes o una tolerancia de error fija. Para las pruebas en este trabajo se especificó inicialmente como límite un número máximo de fuentes fijado como $N_{\max} = M/4$. Sin embargo, las experiencias numéricas demuestran que se obtiene ge-

neralmente una precisión adecuada antes de este límite, cuando se usa un valor del parámetro de refinamiento α cercano al óptimo. En caso contrario, puede ocurrir una falla en el algoritmo de solución de las ecuaciones, generalmente como resultado de una discretización inicial inadecuada. En el presente trabajo se hace énfasis en la estrategia de refinamiento como una nueva técnica de solución para el MSF, dejando abierto el campo para futuros estudios en los cuales se puede entrar en mayores detalles sobre el cálculo específico del indicador de corrección o de la terminación del proceso adaptativo para aplicaciones particulares.

6.9 Pruebas Numéricas del Refinamiento

Dado que el esquema de refinamiento propuesto puede efectuarse en base a dos indicadores diferentes tomados de técnicas estadísticas de análisis, es necesario comparar la eficiencia de estos indicadores y evaluar la capacidad del refinamiento para mejorar la precisión del MSF, mediante pruebas en diferentes problemas. En esta sección se muestran los resultados del refinamiento adaptativo aplicado a fuentes distribuidas sobre superficies dadas. En los casos que se muestran a continuación, la reducción del error es notable en pocos pasos y con un número de fuentes pequeño, obteniéndose distribuciones gradualmente variadas de fuentes. A fin de observar el comportamiento del proceso adaptativo, la convergencia global de las soluciones numéricas obtenidas con dicho esquema se ilustra mediante el cálculo del error residual relativo $\sqrt{1 - R^2}$ en pasos secuenciales, el cual se muestra en una escala logarítmica en las figuras que se presentarán. En la mayoría de los casos, dos pasos de refinamiento son suficientes para obtener un error aceptable en aplicaciones prácticas de ingeniería, y con la aplicación continuada del refinamiento se obtiene en algunos casos una alta precisión que casi llega al orden de la precisión simple en la representación computacional de los números reales.

Se considera en primer lugar el problema en el cual el potencial está dado en coordenadas esféricas como

$$\Phi = r^2 \sin^2 \theta \cos 2\phi \quad (6.5)$$

dentro de una esfera. Se imponen condiciones de contorno de Dirichlet sobre $M = 2048$ puntos uniformemente distribuidos sobre la superficie de la esfera dada por $r = 1$. La distribución inicial de fuentes dada, es uniforme, con $N = 32$ fuentes ubicadas sobre una esfera de radio $a = 2$. En este primer ejemplo, el indicador de refinamiento s_j , está dado por la ecuación (6.2), es decir el indicador basado en la varianza de los parámetros estimados. La figura 6.2 muestra la reducción del error en el potencial y en la derivada normal sobre la superficie en 4 pasos.

Consideramos como ejemplo siguiente el mismo campo potencial, pero imponiendo esta vez las derivadas normales sobre el contorno en los mismos puntos de colocación que en el primer ejemplo, y se da el valor del potencial en el origen a fin de asegurar la unicidad de la solución. La figura 6.3 muestra el correspondiente comportamiento del error. En los dos primeros ejemplos presentados, el esquema de refinamiento muestra baja sensibilidad al parámetro de refinamiento α . Sin embargo, con distribuciones iniciales más gruesas, un refinamiento más lento (es decir, con un menor valor de α) da mejores resultados, y en general con este indicador mientras más lento es el refinamiento, mejor es la precisión obtenida. Dado que la reducción del valor de α induce un aumento en el número de pasos y representa un tiempo de cálculo exagerado, la aplicación de este indicador exige la escogencia de cierto balance entre la precisión del cálculo y el costo computacional. Adicionalmente, este indicador no es adecuado para la solución con métodos iterativos, dado que esto requeriría conocer los valores de los términos diagonales de la matriz invertida C .

Los dos ejemplos anteriores son ahora resueltos utilizando el indicador alterno dado por la ecuación (6.3), es decir el indicador basado en el coeficiente de determinación.

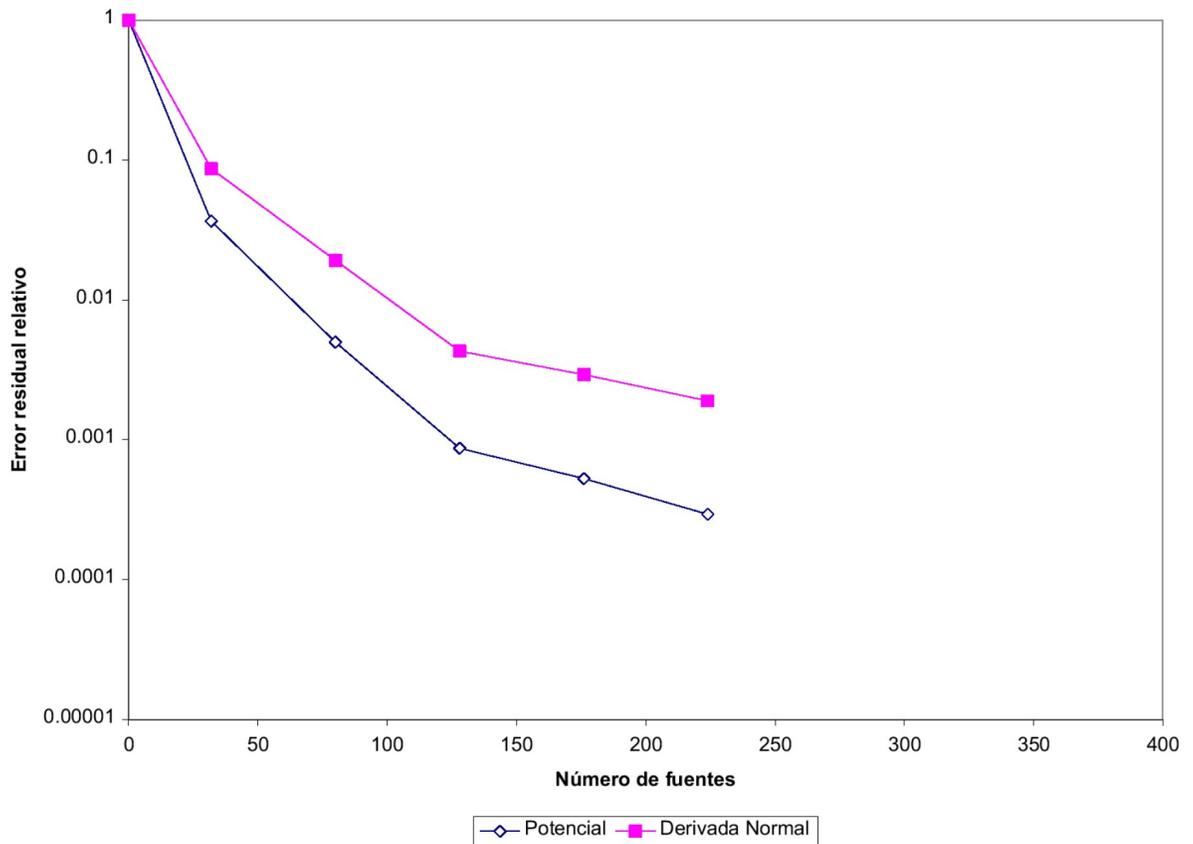


Figura 6.2: Reducción del error en el refinamiento basado en la varianza de los parámetros estimados con potenciales impuestos en 2048 puntos sobre una esfera.

Este indicador da una reducción más rápida del error que la que se obtiene con el indicador previo (indicador basado en la varianza de los parámetros estimados), como se muestra en la figura 6.4 (condiciones de Dirichlet) y la figura 6.5 (condiciones de Neumann).

En ambos ejemplos, de Dirichlet y Neumann, cuando se utiliza el indicador basado en la varianza de los parámetros estimados, ecuación (6.2), es necesario mantener el número de subdivisiones relativamente pequeño en cada paso, es decir, usar un valor pequeño de α , a fin de evitar la singularidad numérica en el sistema de ecuaciones algebraicas resultantes. Esta dificultad no se observa cuando se utiliza el indicador basado en el coeficiente de determinación, ecuación (6.3), que funciona siempre, aun

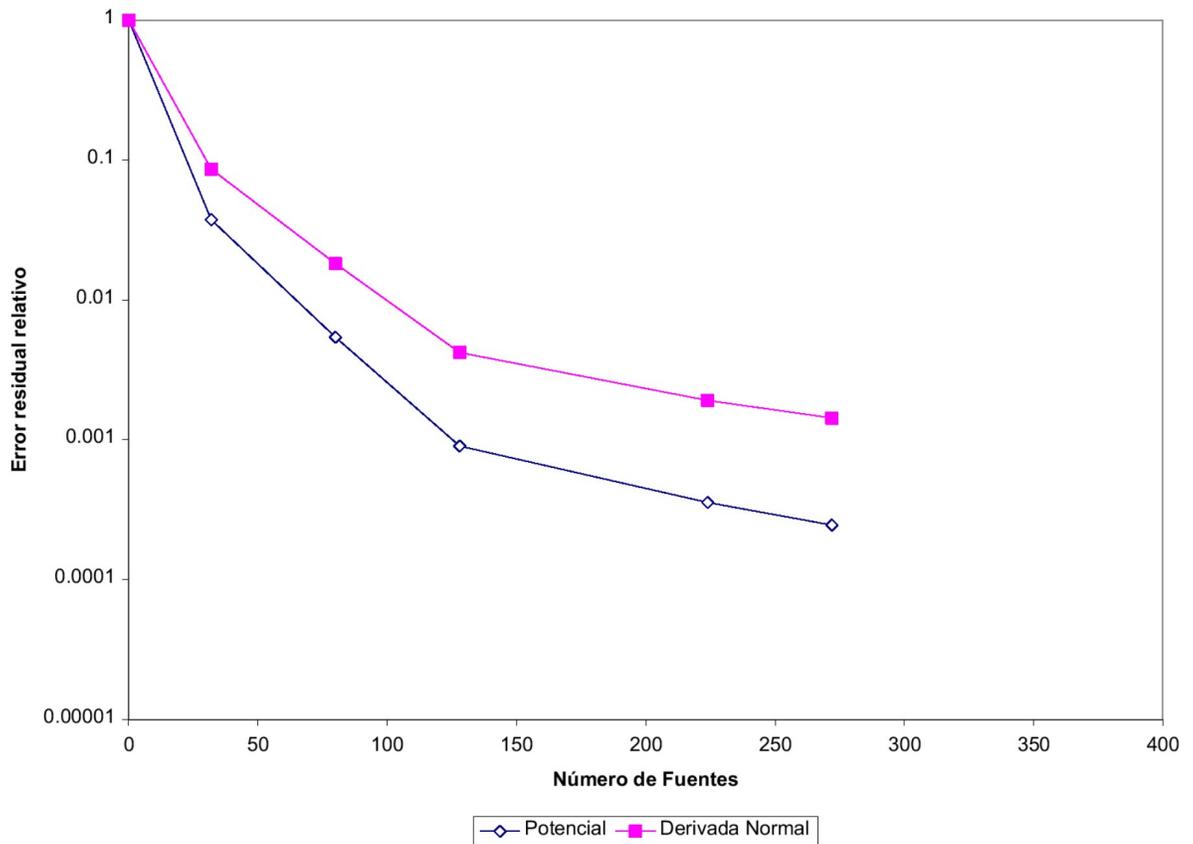


Figura 6.3: Reducción del error en el refinamiento basado en la varianza de los parámetros estimados con derivadas normales impuestas en 2048 puntos sobre una esfera.

con valores grandes de α .

Al efectuar una comparación del rendimiento de los esquemas de solución de las ecuaciones algebraicas en forma directa e iterativa, utilizando este último indicador, se observa que en todas las corridas que se completaron con éxito (es decir, con valores óptimos del parámetro de refinamiento α y una distribución de fuentes inicial adecuada) los resultados del esquema de iteración iterativo no muestran diferencias con respecto a los del esquema directo.

El esquema iterativo de solución es más rápido al efectuar la solución de problemas más grandes. Adicionalmente, cuando el esquema directo degenera debido al mal condicionamiento, el esquema iterativo es aún capaz de producir buenos resultados. En

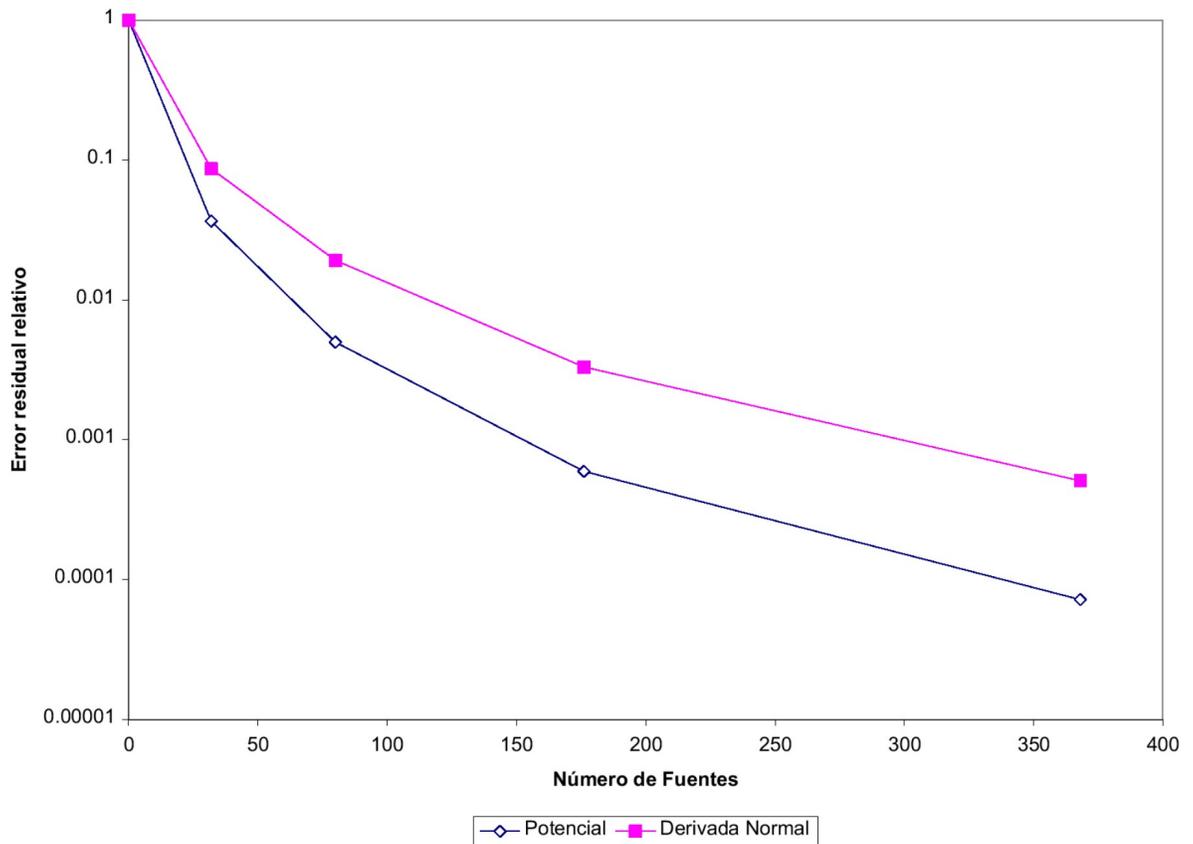


Figura 6.4: Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con potenciales impuestos en 2048 puntos sobre una esfera.

general un valor tentativo del parámetro de refinamiento en el rango $0.6 \leq \alpha \leq 0.8$ puede utilizarse con confianza como aproximación inicial.

Como prueba confirmativa de la combinación más recomendada de acuerdo a las experiencias previas, utilizando el esquema iterativo para la solución de las ecuaciones lineales y el indicador basado en el coeficiente de determinación para el refinamiento, se considera el problema del potencial dentro de un cilindro, dado en coordenadas cilíndricas como

$$\Phi = I_1(2r) \sin \theta \cos 2z \quad (6.6)$$

donde I es la función modificada de Bessel del primer tipo. Este problema se resuelve

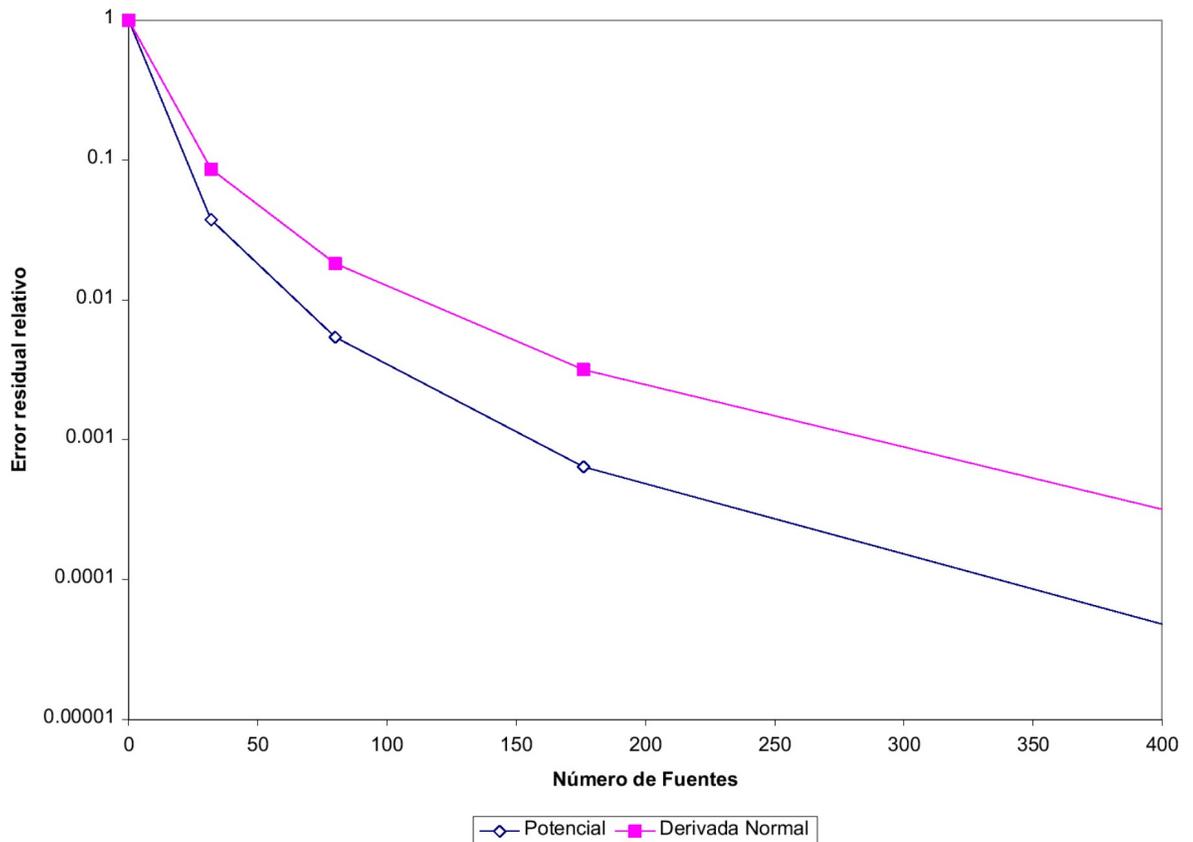


Figura 6.5: Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con derivadas normales impuestas en 2048 puntos sobre una esfera.

en un cilindro con radio 1 y altura 2, es decir en $r \leq 1$ y $-1 \leq z \leq 1$.

Se imponen potenciales sobre las caras circulares y derivadas normales sobre la pared cilíndrica. En este problema el número total de puntos dados en el contorno es $M = 2568$. Las fuentes son inicialmente distribuidas sobre un elipsoide con semiejes $a_r = 2$ y $a_z = 3.3$, la cual encierra el cilindro. La figura 6.6 muestra una reducción importante del error residual relativo en 4 pasos de refinamiento con $\alpha = 0.8$. En las figuras 6.7 a 6.10 se representa el potencial sobre una sección del cilindro en $r \cos \theta = 0$, calculado en cada paso de refinamiento. El potencial representado en la figura 6.10 con 296 fuentes es prácticamente idéntico a la solución analítica.

Como prueba adicional práctica utilizando la solución iterativa de las ecuaciones y el

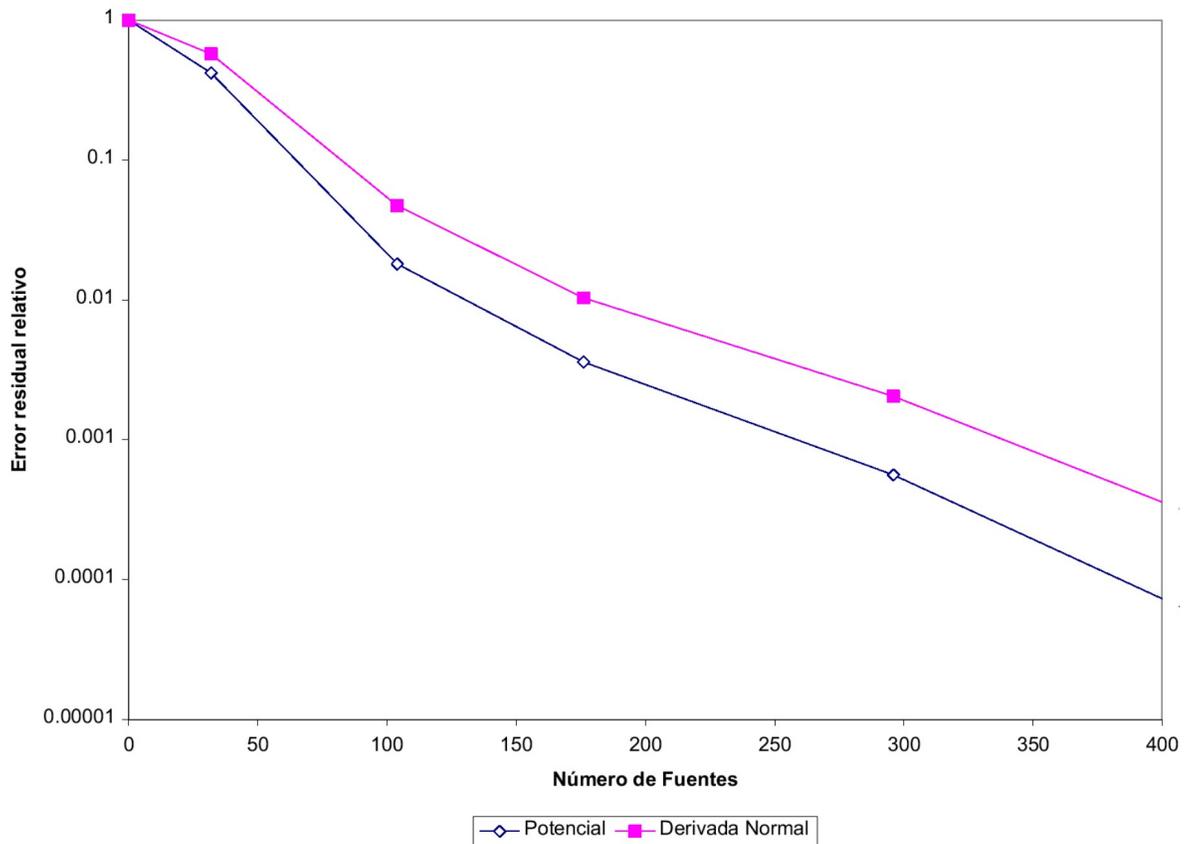


Figura 6.6: Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con potenciales impuestos en 768 puntos y derivadas normales impuestas en 1800 puntos sobre un cilindro.

indicador basado en el coeficiente de determinación, se considera el problema en régimen permanente de flujo de calor entre dos superficies cilíndricas coaxiales. La solución analítica del potencial (temperatura) se obtiene en una manera simple considerando la simetría axial del problema, y está dada en coordenadas cilíndricas como

$$\Phi = \Phi_1 + (\Phi_2 - \Phi_1) \frac{\ln(r/r_1)}{\ln(r_2/r_1)} \quad (6.7)$$

donde Φ_1 y Φ_2 son los potenciales sobre las superficies interior y exterior, con radios r_1 y r_2 , respectivamente. Se colocan tapas planas aisladas en $z = \pm h/2$.

Este problema se resuelve en el presente ejemplo con los valores $r_1 = 1$, $r_2 = 2$,

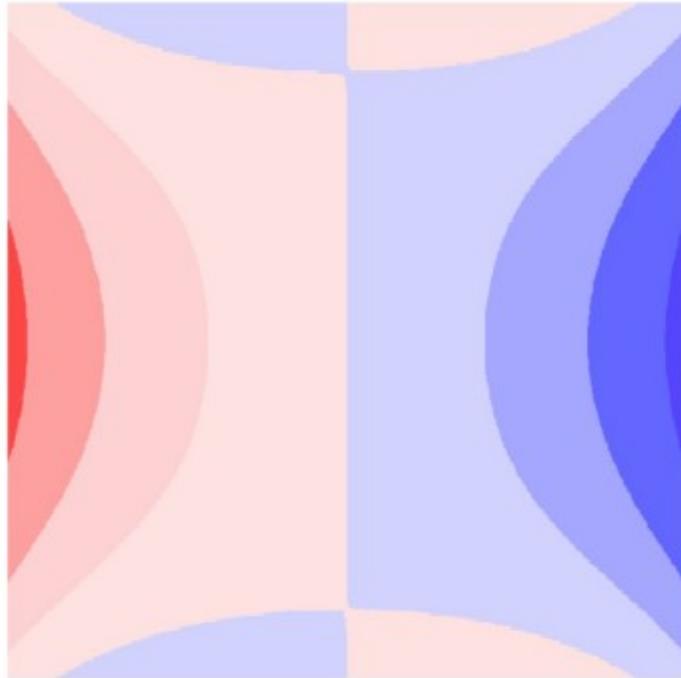


Figura 6.7: Isolneas del potencial calculado con 32 fuentes.

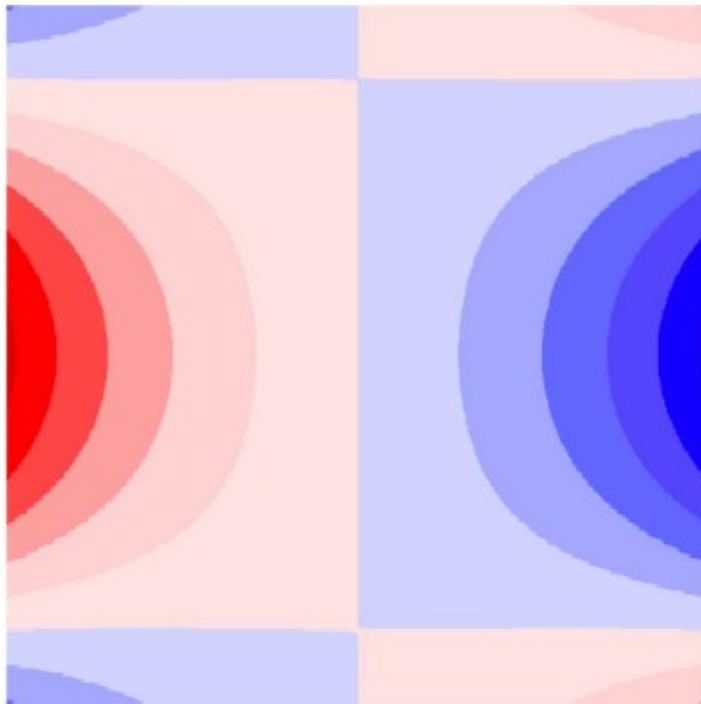


Figura 6.8: Isolneas del potencial calculado con 104 fuentes.

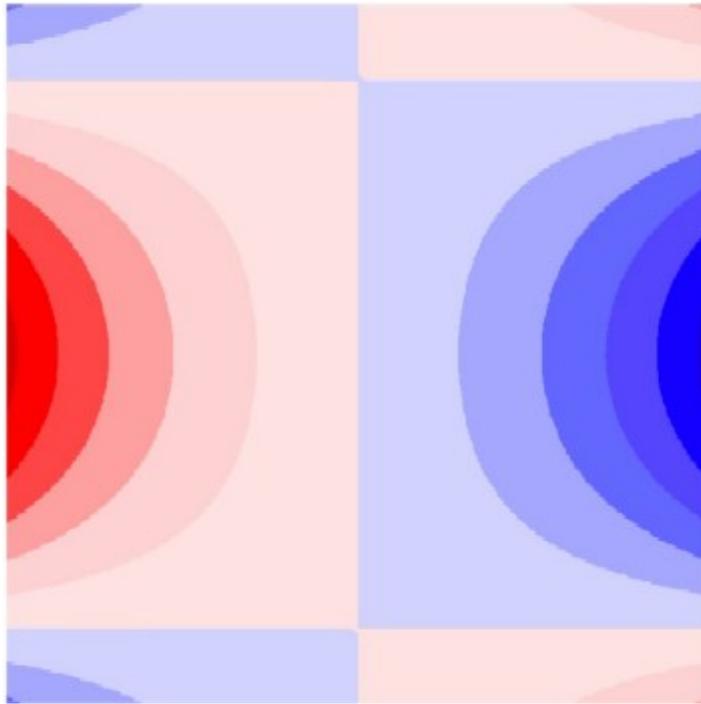


Figura 6.9: Isolíneas del potencial calculado con 176 fuentes.

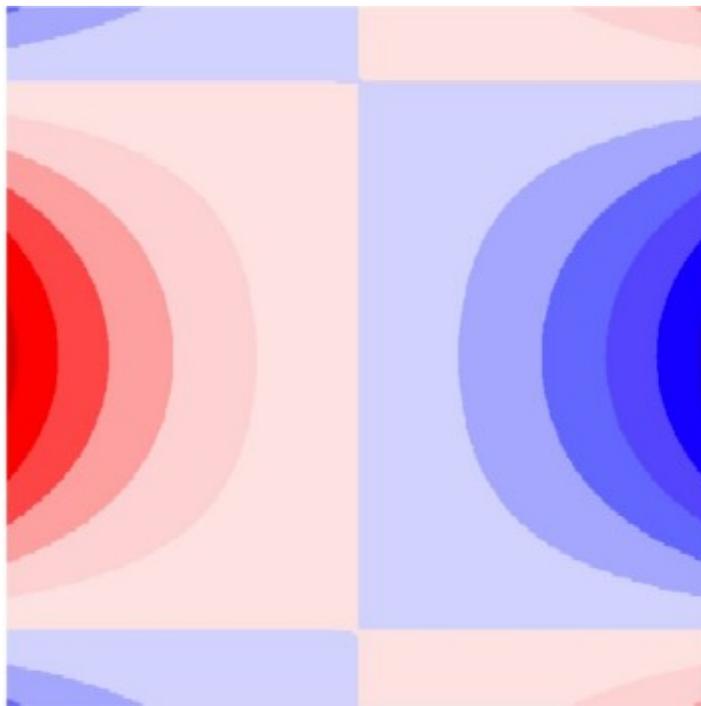


Figura 6.10: Isolíneas del potencial calculado con 296 fuentes.

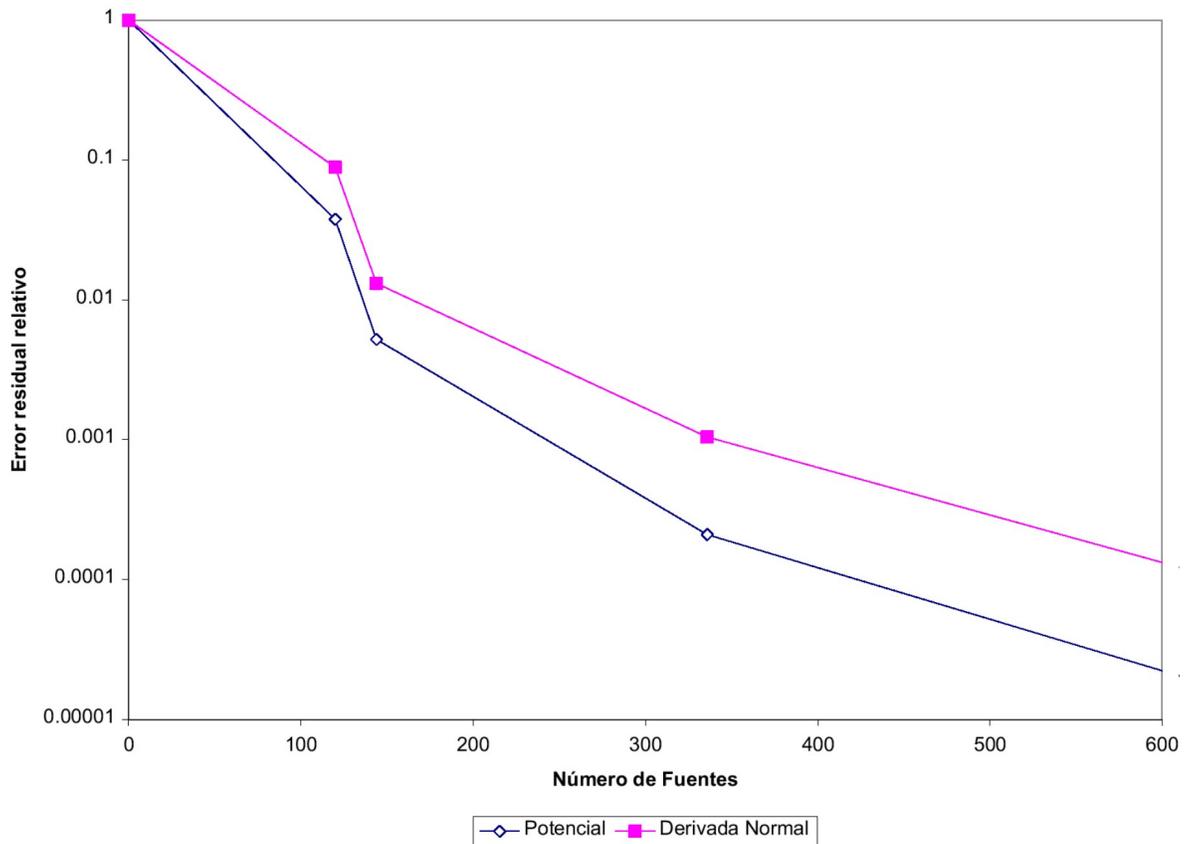


Figura 6.11: Reducción del error en el refinamiento basado en el coeficiente de determinación con potenciales impuestos en 1800 puntos y derivadas normales impuestas en 1800 puntos sobre un anillo de sección cuadrada.

$\Phi_1 = 1$, $\Phi_2 = 2$ y $h = 1$. Se imponen los potenciales correspondientes sobre las superficies cilíndricas y se hacen iguales a cero las derivadas normales sobre las tapas planas. Para ilustrar la solución con una discretización completamente tridimensional, se toma una distribución de los puntos del contorno fina y uniforme. El número total de puntos del contorno es $M = 3600$, con 600 de los mismos sobre el cilindro interior, 1200 sobre el cilindro externo, y 900 sobre cada una de las caras planas inferior y superior. Se distribuyen inicialmente 120 fuentes sobre una superficie toroidal generada por una elipse con semiejes $a_r = 1$ y $a_z = 2$, con radio de rotación de su centro $r_t = 1.5$ alrededor del eje z . La figura 6.11 muestra los resultados del refinamiento con

$\alpha = 0.8$. Se puede observar una profunda reducción del error residual relativo en el primer paso del refinamiento, el cual es indicativo de un número algo excesivo de puntos de fuente iniciales. Sin embargo, parte de las fuentes aparentemente redundantes en la distribución inicial, son refinadas en los pasos siguientes, llegando en una forma más lenta a una reducción del error relativo del orden de 10^{-4} .

Capítulo 7

Solución Numérica de Flujo con Superficie Libre

La aplicación de las técnicas computacionales desarrolladas, permite la aplicación eficiente del MSF directamente a problemas con condiciones de Dirichlet y Neumann. En base a las aplicaciones exitosas en la literatura de métodos de frontera para problemas de contornos móviles, en este trabajo se aplica el esquema desarrollado al problema de flujo en medio poroso con superficie libre. La discretización de la condición de contorno sobre la superficie libre se efectúa incorporando el cálculo de las derivadas normales en la superficie libre mediante un esquema de interpolación con funciones de base radiales. En la siguiente sección se introduce la condición mixta para el contorno móvil.

7.1 Discretización de la Condición de Contorno de Robin

La discretización de la condición de contorno mixta para la superficie móvil presentada en esta sección sigue de cerca la forma planteada por Liggett[52]. Como se indicó en la sección 2.5, la velocidad real \vec{u}' con la que se desplaza el fluido en el contorno libre es

$$\vec{u}' = K' \nabla \Phi = \frac{K}{\epsilon} \nabla \Phi \quad (7.1)$$

donde K es la conductividad hidráulica, ϵ es la porosidad efectiva y Φ es la altura piezométrica. En la superficie libre la presión es atmosférica, por lo cual el potencial

en la superficie es $\Phi = \eta$, donde η es la elevación de la superficie libre, y $\partial\eta/\partial t$ es la velocidad vertical en la misma. El vector de velocidad \vec{u}' forma un ángulo con la vertical cuya secante es

$$\gamma = \sqrt{1 + \left(\frac{\partial\eta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\eta}{\partial y}\right)^2} \quad (7.2)$$

El movimiento de la superficie libre se expresa en forma discretizada mediante un esquema de diferencias finitas en el tiempo como

$$\frac{\Phi_{k+1} - \Phi_k}{\Delta t} = -\gamma_k K' \left[\theta \left(\frac{\partial\Phi}{\partial n}\right)_{k+1} + (1 - \theta) \left(\frac{\partial\Phi}{\partial n}\right)_k \right] \quad (7.3)$$

donde Δt es el intervalo de tiempo, θ es un factor de peso para la integración en el tiempo, el subíndice k se refiere a los valores en el tiempo $k\Delta t$ y el subíndice $k + 1$ se refiere a los valores en el tiempo $(k + 1)\Delta t$. Dejando en el lado izquierdo de la ecuación (7.3) los valores del potencial y su derivada en el tiempo $(k + 1)\Delta t$ se obtiene la condición de contorno de Robin

$$\Phi_{k+1} + \gamma_k \Delta t K' \theta \left(\frac{\partial\Phi}{\partial n}\right)_{k+1} = \Phi_k - \gamma_k \Delta t K' (1 - \theta) \left(\frac{\partial\Phi}{\partial n}\right)_k \quad (7.4)$$

El cálculo del valor de γ requiere la evaluación numérica de las derivadas sobre la superficie. El contorno móvil está definido en forma discreta en el espacio. El procedimiento numérico de discretización de la superficie libre involucra la selección de un número finito de puntos P_i sobre el contorno. Esto significa que para determinar las derivadas parciales que aparecen en la ecuación (7.2), y la velocidad en el punto del contorno, a fin de calcular el desplazamiento de la superficie, es necesario interpolar a partir de los valores de η en los puntos dados. En este trabajo se utilizan para la interpolación métodos basados en funciones globales como son las Funciones de Base Radiales (FBR), que dan resultados más precisos aunque se requiere la solución de un sistema de ecuaciones lineales. En las secciones siguientes se presentan detalles sobre la interpolación.

7.2 Funciones de Interpolación

El procedimiento numérico de interpolación se aplica en general cuando se conoce el valor de una función en un conjunto de puntos, pero no se tiene una expresión analítica para la misma que permita calcular su valor en un punto arbitrario. Por ejemplo, el valor de la función puede ser resultado de una cierta medida física o de un cálculo numérico costoso que no se puede expresar en una forma funcional simple. Conceptualmente, el proceso de interpolación tiene dos etapas: (1) ajustar una función de interpolación a los puntos de referencia dados (2) evaluar la función de interpolación en un punto cualquiera. Sin embargo, en la práctica suele ser necesario un cálculo más eficiente y menos susceptible al redondeo, por lo cual en una rutina dada en la práctica estos dos pasos no necesariamente se efectúan separadamente. Los puntos suelen estar uniformemente espaciados, pero esto no necesariamente ocurre siempre.

El objetivo es entonces, en cierto sentido, estimar el valor de la función desconocida en un punto arbitrario mediante el trazado de una superficie suave. Los esquemas de interpolación deben modelar la función entre los puntos conocidos, mediante cierta función cuyo comportamiento se asemeje aceptablemente al de la función desconocida en el rango dado. La forma debe ser suficientemente general para poder aproximar amplias clases de funciones que pudieran presentarse en la práctica. A partir de un desarrollo en serie de Taylor se deduce que para este fin pueden usarse funciones polinómicas, y éstas se encuentran entre las más comunes. El aumento del orden de la interpolación no necesariamente aumenta la precisión, y se debe ser cauteloso con utilizar un orden alto, especialmente en la interpolación polinómica. En muchos casos se obtienen mejores resultados si se utilizan funciones racionales (cocientes de polinomios), exponenciales o trigonométricas. Existe una literatura matemática extensa dedicada a los teoremas sobre las clases de funciones que pueden ser bien aproximadas por medio de funciones de interpolación dadas. Cuando es de interés la continuidad en las derivadas, se pueden

utilizar *splines*, generalmente representados por polinomios cuyos coeficientes son determinados en una forma que se aparta del esquema local, diseñada para garantizar suavidad global en la función interpolada hasta un cierto orden de las derivadas. Los splines cúbicos son los más populares para interpolación en una dimensión, y tienden a ser más estables, con menos posibilidad de oscilaciones entre los puntos tabulados.

Cuando la tabla de valores contiene muchos más puntos que el orden deseable de la interpolación, se debe comenzar la interpolación de cada punto con una búsqueda para ubicar los extremos del conjunto de puntos a utilizar en el esquema de interpolación local. Al extender esta búsqueda a la interpolación en dos dimensiones, se hace necesario en general la construcción de una malla de cálculo, lo cual se efectúa en forma relativamente simple si los puntos son regularmente espaciados, pero en el caso de puntos espaciados irregularmente, en general los métodos de interpolación tradicionales necesitan de algoritmos auxiliares para agrupar los puntos, estableciendo la conectividad entre las celdas o subdominios sobre los cuales se aplica localmente el esquema de interpolación. En estos casos, el procedimiento de búsqueda para mallas grandes puede resultar lento.

La aplicación de métodos para interpolación de datos ubicados irregularmente se encuentra en varias disciplinas, por ejemplo en geofísica. Franke [16] evaluó una serie de algoritmos para interpolación con datos dispersos en el espacio, en relación con la precisión, costo computacional y otros criterios. Entre otros resultados, Franke encontró que los métodos ponderados con el inverso de la distancia son altamente dependientes de la función de peso y suelen producir zonas planas alrededor de los puntos dados. Debido a la presencia de jacobianos mal condicionados, cuando los elementos son muy alargados resultan insatisfactorios los métodos de mallas triangulares y los métodos basados en las funciones de interpolación de elementos finitos. Estos últimos requieren elementos con continuidad de las primeras derivadas para obtener interpolaciones acep-

tables. Entre todos los métodos considerados, Franke concluyó que los métodos basados en funciones globales dan los resultados más precisos, aunque requieren la solución de un sistema de ecuaciones lineales y en consecuencia, el número de operaciones requerido es proporcional al cubo del número de puntos dados al resolver el sistema por métodos directos.

7.3 Interpolación Mediante Funciones de Base Radiales

Entre los métodos de interpolación multidimensional en base a datos que no necesariamente se ubican en forma regular, se ha destacado recientemente el uso de las denominadas funciones de base radiales (FBR). Este método tiene muchas ventajas sobre los métodos de interpolación tradicionales, los cuales en general necesitan la construcción de una malla de cálculo y un procedimiento de búsqueda. En años recientes, la teoría de las FBR ha sido objeto de investigación intensiva y ha gozado de éxito considerable como técnica para interpolar datos y funciones multivariadas. Una función de base radial, $\Phi(\mathbf{x} - \mathbf{y}_j) = \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}_j\|)$, es un spline continuo que depende de la distancia de separación de un subconjunto de centros de los datos, $X \subset \Re^n, \{\mathbf{x}, \mathbf{y}_j \in X, j = 1, 2, \dots, N\}$. Debido a la simetría esférica de estas funciones alrededor de los centros \mathbf{y}_j (puntos nodales o de colocación), son llamadas radiales. Las distancias, $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}_j\|$, se suelen tomar como la norma Euclidiana, aunque otras normas son posibles ([21], [22]). Las FBR más populares son los splines de placa delgada $r^2 \log r$, la multicuadrática $(r^2 + c^2)^{1/2}$ y la gaussiana $e^{-\beta r}$, donde $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}_j\|$. Hardy [32] fue el primero en deducir un esquema de interpolación en base a funciones radiales multicuadráticas y lo aplicó para aproximar superficies geográficas. El esquema básico de Hardy es muy simple y se basa en un desarrollo de la función desconocida f en M funciones de base

\mathbf{g} , como

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^M \alpha_j \mathbf{g}_j(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad (7.5)$$

donde α_j son constantes, \mathbf{x} es la coordenada donde se desea la interpolación, \mathbf{x}_j la coordenada del punto donde se conoce el dato y \mathbf{g} es una función de base radial que depende únicamente de la ubicación de los puntos en el espacio. Para efectuar la interpolación con un conjunto de puntos dados, se igualan los valores de los datos con el desarrollo de las funciones $f(\mathbf{x}_j)$ evaluadas en cada uno de los puntos. Se obtiene de esta manera un sistema de ecuaciones algebraicas lineales cuya solución es el vector de coeficientes α . Una vez resuelto este sistema, la interpolación en un punto cualquiera se realiza mediante la fórmula (7.5) con un número de operaciones de orden $O(M)$.

De acuerdo al estudio de Franke[16] las FBR demostraron superioridad en rendimiento sobre todos los otros métodos en lo relativo a precisión, estabilidad, eficiencia, requerimientos de memoria y facilidad de implementación. La utilización de funciones de base radial tiene aplicaciones mucho más generales, como la solución de ecuaciones diferenciales parciales sin utilización de malla de cálculo ([14], [72], [17], [35]). Aparentemente el uso de estas funciones se originó en el trabajo de Duchon[15] quien consideró el problema de la interpolación óptima en cierto espacio de Hilbert, minimizando el funcional

$$I(S) = \int_{\mathbb{R}^2} \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^2 \left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right]^2 dx < \infty \quad (7.6)$$

cuya solución se construye utilizando las funciones

$$\mathbf{g}(r) = r^2 \log r \quad (7.7)$$

donde r es la distancia entre dos puntos. Las funciones de la ecuación (7.7) son usualmente llamadas *splines de placa delgada* y han sido ampliamente investigados tanto

desde el punto de vista computacional como el teórico ([23], [22] y [42]). Estas funciones constituyen la generalización natural en $n > 1$ dimensiones, del problema de encontrar una interpolación f_I en $n = 1$, que minimice el funcional $\int_{-\infty}^{\infty} [f''(x)]^2 dx$, el cual es una medida de la curvatura de f , y cuya solución es un spline cúbico. Aunque los splines de placa delgada se han considerado óptimas para interpolar funciones multivariadas, su convergencia es solamente lineal [63].

Hardy [32] introdujo otra clase de funciones radiales llamadas multicuadráticas

$$g(r) = (r^2 + c^2)^{1/2} \quad (7.8)$$

donde r es la distancia entre dos puntos, y c es un *parámetro de forma* que generalmente debe determinarse a partir de los datos. Las funciones multicuadráticas convergen exponencialmente y siempre producen una seminorma de error mínima tal como lo han demostrado Madych y Nelson [53]. Sin embargo, pese al rendimiento excelente de las multicuadráticas, la escogencia del parámetro libre c puede afectar en gran medida la precisión de la aproximación. Este es un problema que ha recibido la atención de muchos investigadores, pero hasta el momento no se ha desarrollado una teoría matemática para determinar el valor óptimo del parámetro de forma c .

Luego de la publicación del trabajo de Franke, la teoría de funciones de base radial se ha desarrollado y aplicado extensamente. Sin embargo la explicación teórica de la bondad de sus resultados es muy reciente [39]. De las FBR probadas por Franke, las multicuadráticas de Hardy[32] fueron clasificadas como las mejores en precisión, seguidas por los splines de placa delgada de Duchon[15]. En un estudio similar al de Franke, Stead [73] examinó la precisión de las aproximaciones de las derivadas parciales sobre conjuntos de datos dispersos, y también llegó a la conclusión de que las FBR rinden resultados más precisos comparadas con otros métodos considerados.

Para encontrar el valor de los coeficientes de interpolación, la ecuación (7.5) puede aplicarse en cada uno de los N puntos de colocación escogidos. Una generalización

puede escribirse en la forma siguiente [23]

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^M \alpha_j \mathbf{g}_j(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) + P_m \quad (7.9)$$

donde P_m es un polinomio de grado m . Los coeficientes α_j satisfacen las restricciones

$$\sum_{j=1}^M \alpha_j = \sum_{j=1}^M \alpha_j x_{j1} = \sum_{j=1}^M \alpha_j x_{j2} = 0 \quad (7.10)$$

Este enfoque fue presentado por Harder y Desmarais[31] usando

$$\mathbf{g}(r) = r^2 \log r \quad (7.11)$$

donde r es la distancia entre dos puntos, y el polinomio de grado 1 tiene la forma

$$P_1 = ax_1 + bx_2 + c \quad (7.12)$$

donde a , b y c son constantes. Las interpolaciones con FBR son flexibles ya que pueden ser calculadas con datos regularmente espaciados o dispersos. Además, este tipo de interpolación puede interpretarse como un algoritmo de minimización de la rugosidad o del ruido, en el cual la interpolación se lleva a cabo en una manera tal que los ruidos o errores de interpolación se suavizan [35]. Esta característica de suavidad es fácilmente observable en el caso de los splines de placa delgada, las cuales se sabe que minimizan la relación integral dada por la ecuación (7.6). La reducción del ruido en un algoritmo de interpolación garantiza alta precisión en la evaluación de las primeras derivadas de la función estimada por la interpolante.

Micchelli [55] demostró que para un caso donde los puntos nodales son todos distintos, la matriz resultante de cualquiera de las interpolaciones por FBR antes dadas es siempre no-singular. Según los experimentos numéricos en estudios como el de Schaback[70], los números de condición de la matriz de interpolación para las funciones suaves como la gaussiana o multicuadrática son extremadamente grandes comparados con los que resultan de las funciones no-suaves como los splines de placa delgada.

Aunque estas funciones proveen excelentes interpolantes para interpolación multidimensional cuando el tamaño de los conjuntos de datos es moderado, pueden aparecer dificultades con conjuntos más grandes, ya que las matrices de interpolación no son dispersas y la solución de las ecuaciones puede ser costosa. Mientras mejores son las propiedades de aproximación, suele ser peor el condicionamiento de la matriz. Además, dado que la condición de estas matrices tiende a deteriorarse al disminuir el espacio entre los puntos dados, pueden presentarse problemas serios causados por el redondeo. En vista de estas dificultades, Schaback y Wendland [71] han considerado las ventajas de utilizar métodos iterativos para la solución de las ecuaciones.

7.4 Aplicación de los Splines de Placa Delgada a la Interpolación sobre la Superficie Libre

Dados los excelentes resultados reportados en la literatura, en este trabajo se utilizan como funciones de interpolación los splines de placa delgada aumentados. Se expresa entonces la elevación de la superficie libre η como un desarrollo en M funciones de base radiales \mathbf{g} y un polinomio

$$\eta(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^M \alpha_j \mathbf{g}_j(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) + P_1 \quad (7.13)$$

donde

$$P_1 = \alpha_{M+1}x_1 + \alpha_{M+2}x_2 + \alpha_{M+3} \quad (7.14)$$

los coeficientes α_j son constantes, \mathbf{x} es la coordenada donde se desea la interpolación, \mathbf{x}_j la coordenada del punto donde se conoce el dato y \mathbf{g} es una función de base radial

$$\mathbf{g}(r) = r^2 \log r \quad (7.15)$$

donde r es la distancia entre dos puntos. Considerando las restricciones dadas en la ecuación (7.10) se obtiene un sistema cerrado de ecuaciones de matriz simétrica con la

estructura siguiente

$$\begin{pmatrix} \mathbf{g}_1(\mathbf{0}) & \dots & \mathbf{g}_M(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_M) & x_{11} & x_{12} & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{g}_1(\mathbf{x}_M - \mathbf{x}_1) & \dots & \mathbf{g}_M(\mathbf{0}) & x_{M1} & x_{M2} & 1 \\ x_{11} & \dots & x_{M1} & 0 & 0 & 0 \\ x_{12} & \dots & x_{M2} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_M \\ \alpha_{M+1} \\ \alpha_{M+2} \\ \alpha_{M+3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_M \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

el cual puede invertirse para encontrar el vector de coeficientes α . Las derivadas de la función de base dada en la ecuación (7.15) se expresan como

$$\nabla \mathbf{g} = (2 \log r + 1) \mathbf{x} \quad (7.17)$$

de donde se obtienen las derivadas de la elevación de la superficie libre dada en la ecuación (7.13), las cuales se sustituyen directamente en la ecuación (7.2). Sustituyendo los valores de los coeficientes α se obtienen estimados de γ .

7.5 Aplicación del Esquema de Solución de Flujo Potencial con Superficie Libre

En el presente trabajo se aplica la interpolación con el esquema presentado resolviendo iterativamente el sistema de ecuaciones de la interpolación con el algoritmo GMRES. En el problema de ejemplo que se describe más adelante, se encuentra que al cambiar la posición de los puntos sobre la superficie libre se necesitan muy pocas iteraciones adicionales para obtener los nuevos valores de los coeficientes para la interpolación.

Dado que el MSF permite una gran flexibilidad en la forma de llevar a cabo la discretización, se pueden utilizar formas más simples que la presentada en la sección 6.3, pero en el caso de contornos móviles es de esperarse que, al cambiar la configuración geométrica de las condiciones de contorno, algunas fuentes se hagan menos significativas o en general la distribución de las fuentes llegue a alejarse de la óptima. Por esta razón el registro de la estructura de los refinamientos se utiliza para efectuar la contracción

de fuentes. Para esto se toma el desarrollo multipolar correspondiente a los 4 puntos de fuente a contraer, calculado mediante la ecuación (4.1), efectuándose una traslación MAL según la ecuación (4.5) para crear un desarrollo local en el centro del dominio. De igual manera se efectúa el desarrollo y traslación correspondiente a un punto de fuente *padre* con intensidad igual a 1. En esta forma se obtiene la intensidad del nuevo punto de fuente contraído, que en el caso de una expansión de orden 1 es simplemente el cociente de los primeros términos de las expansiones respectivas.

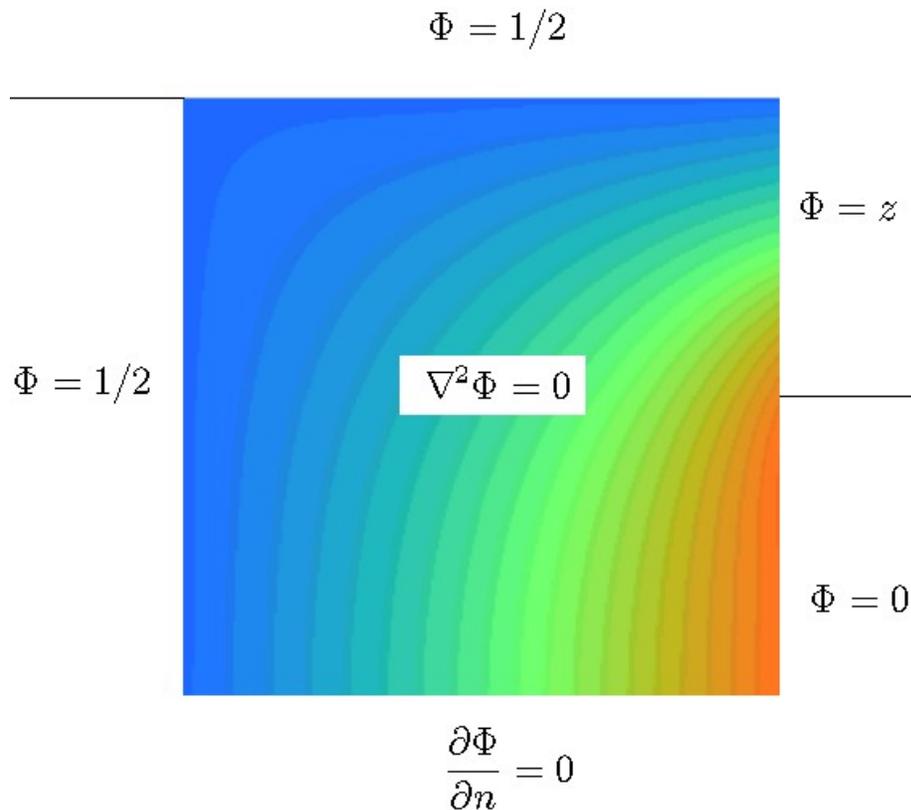


Figura 7.1: Condiciones de contorno del problema de flujo a través de una presa.

7.5.1 Flujo a Través de una Presa

Para observar el comportamiento del esquema de solución, en esta sección se estudia en forma simplificada el caso de flujo potencial con $K' = 0.002$. Como ejemplo de

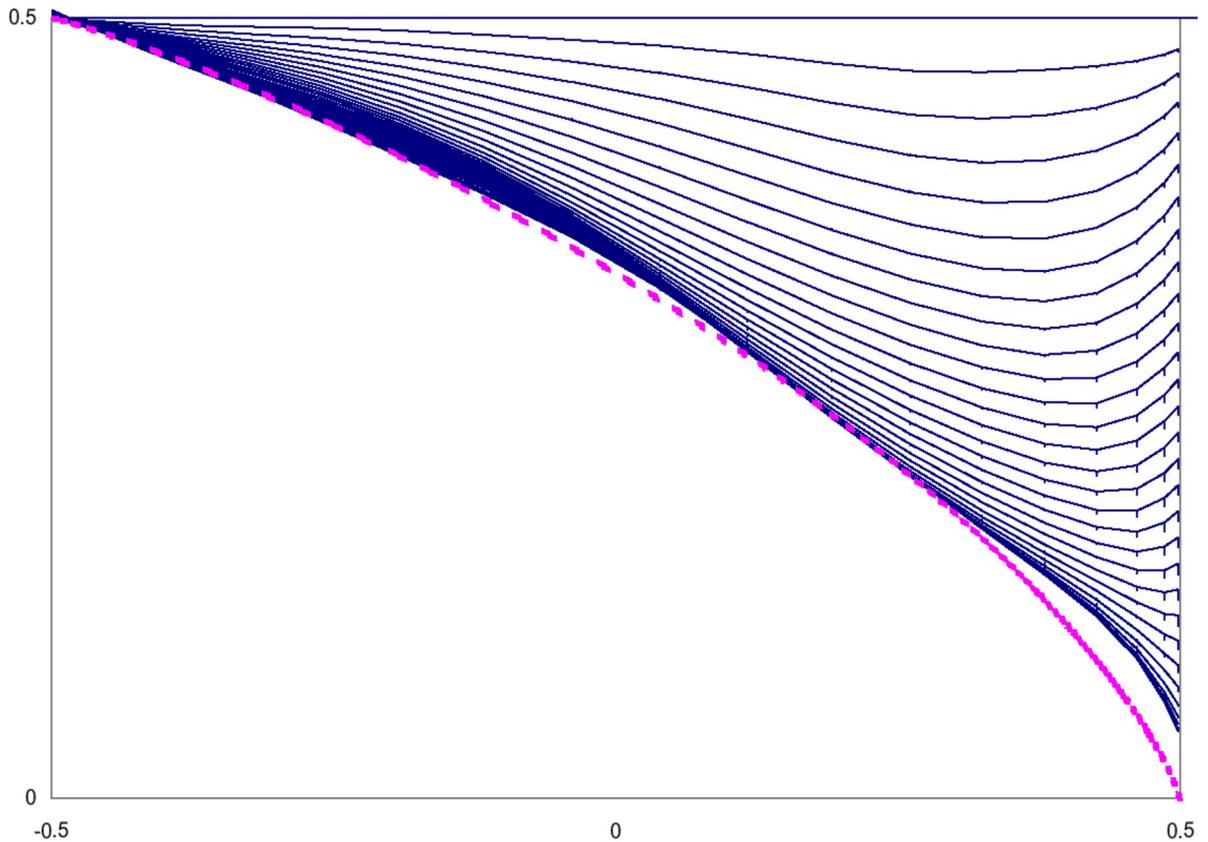


Figura 7.2: Evolución del perfil de la superficie libre en el tiempo.

prueba correspondiente a la aplicación directa de la método descrito para el cálculo del movimiento de la superficie libre, se considera el problema clásico de flujo a través de una presa de sección rectangular entre dos embalses. La superficie de uno de los embalses desciende instantáneamente. Las condiciones de contorno del problema planteado en dos dimensiones se muestran en la figura 7.1. En este caso al descender el nivel del embalse aguas abajo, se presenta una pared de filtración, al ser más lento el descenso del nivel freático dentro de la presa que el vaciado del embalse. Al mantenerse estático el nivel del embalse aguas abajo después del descenso, se obtiene la ubicación de la superficie freática en régimen permanente. En la figura 7.2 se muestra la evolución inicial del perfil de la superficie libre en intervalos de 50 segundos, y en la figura 7.3

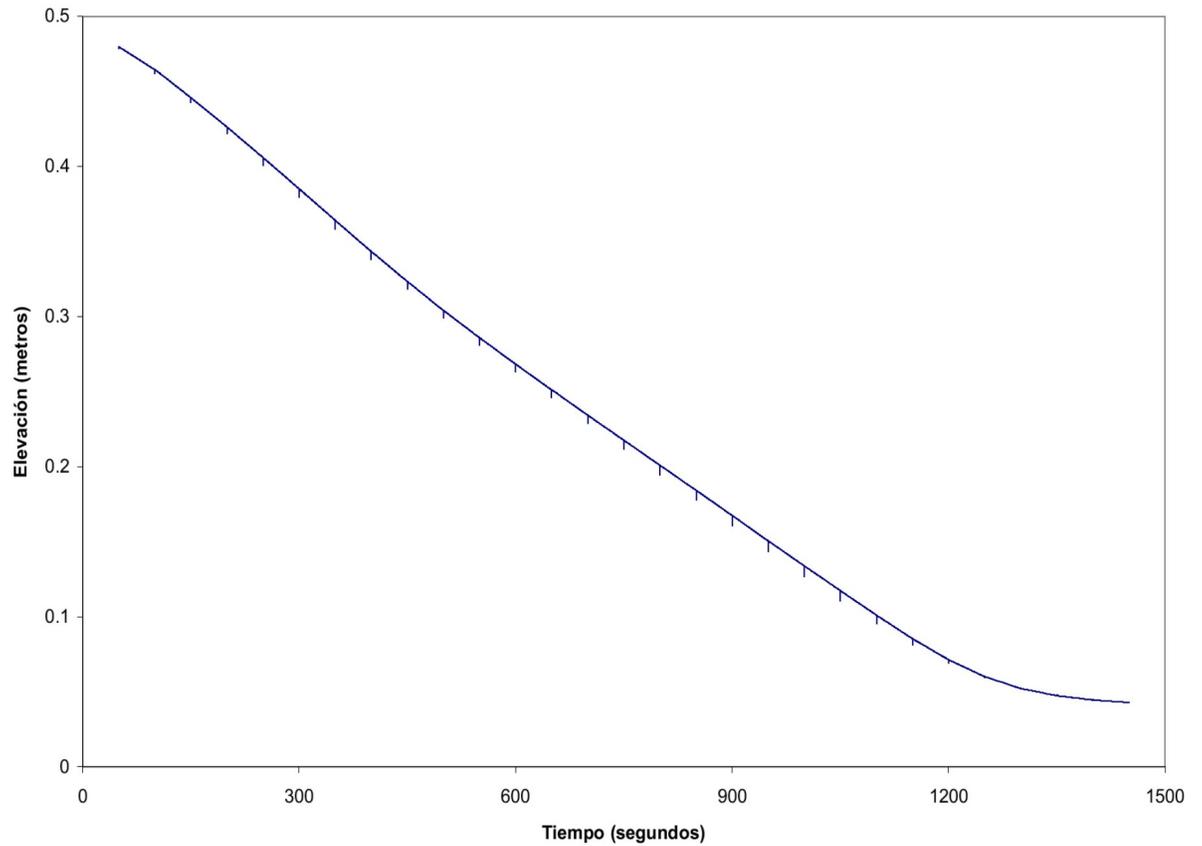


Figura 7.3: Variación en el tiempo del nivel de la superficie libre en el extremo aguas abajo.

se observa la convergencia de la pared de filtración al nivel de la superficie del embalse aguas abajo.

Capítulo 8

Conclusiones y Recomendaciones

Las experiencias numéricas realizadas en este trabajo con el Método del las Soluciones Fundamentales (MSF) demuestran que el cálculo de soluciones aproximadas para problemas de potenciales por medio del enfoque de mínimos cuadrados produce resultados con una reducción notable en el número de puntos de fuente en relación con los requeridos por el enfoque de colocación directa. Adicionalmente, se puede lograr una distribución global más razonable del error en la solución.

Se ha introducido una modificación de la técnica básica del algoritmo multipolar rápido para la aplicación al MSF por mínimos cuadrados. Las pruebas efectuadas con el algoritmo multipolar rápido para acelerar el cálculo en el MSF para problemas de Dirichlet grandes muestran que este aceleramiento es muy efectivo cuando el número de fuentes está por encima de 4000, pese a cierta reducción de la eficiencia cuando se aplica a problemas de Neumann. En problemas de menor tamaño, aunque el tiempo de cálculo es mayor en el algoritmo multipolar que cuando se almacena la matriz, los ahorros en memoria con el esquema multipolar son siempre significativos. Al aumentar el número de fuentes en dichas pruebas, se observa que el esquema de solución iterativa de las ecuaciones permite obtener una reducción gradual del error, y se obtiene una precisión muy buena para aplicaciones prácticas de ingeniería con un número de puntos del contorno que puede ser hasta unas 10 veces mayor que el número de puntos de

fuente. La combinación del algoritmo multipolar rápido con el algoritmo GMRES para la solución iterativa del sistema de ecuaciones lineales convierte el esquema presentado para el MSF en una herramienta poderosa para problemas tridimensionales grandes.

En este trabajo se hace énfasis en la estrategia para la combinación de la técnica de aceleramiento con la solución de las ecuaciones de mínimos cuadrados, dejando el campo abierto para investigaciones sobre los valores más adecuados del criterio de separación de celdas, el orden de los desarrollos multipolares, y la interacción de los mismos con los parámetros del algoritmo iterativo para el sistema de ecuaciones, todos los cuales pueden ser afectados por las características del problema a resolver, así como por las implementaciones con procesadores, ambientes operativos y compiladores específicos. Las investigaciones futuras para mejorar la eficiencia del esquema presentado pueden estar también dirigidas al estudio de preconditionadores adecuados para la solución iterativa de los sistemas de ecuaciones de mínimos cuadrados en el MSF. Aunque en este trabajo se muestra solamente la implementación del esquema de solución con el algoritmo multipolar para las ecuaciones del MSF por mínimos cuadrados, la extensión de los procedimientos para la aplicación en otros métodos de frontera como el BEM puede efectuarse en forma bastante directa.

Se ha introducido un procedimiento de refinamiento adaptativo para el Método de las Soluciones Fundamentales (MSF), basado en conceptos tomados del análisis de regresión lineal múltiple. Los experimentos numéricos llevados a cabo en este trabajo muestran que el indicador basado en el coeficiente de determinación suministra información útil para guiar el refinamiento selectivo de la distribución de fuentes. Se alcanza una reducción importante del error global en relativamente pocos pasos, aun con una distribución inicial de fuentes muy gruesa.

En la estrategia de refinamiento presentada, basada en la distribución de fuentes sobre una superficie prefijada, es obvio que la reducción alcanzable del error es altamente

dependiente de la selección de la superficie, así como de la distribución inicial de los puntos. Se puede garantizar una precisión adecuada asegurándose de que la distribución inicial de los puntos de fuente refleje en cierta manera las tendencias del campo de flujo, y que la posición de la superficie auxiliar para la distribución de las fuentes se establezca siguiendo un balance entre la mayor precisión, que se obtiene con una superficie más lejana, y la mejor condición de la matriz, que se obtiene con una superficie más cercana al contorno del dominio. Mejoramientos futuros basados en el procedimiento presentado pueden estar dirigidos a refinar la forma de la superficie auxiliar.

Aunque la estrategia de refinamiento presentada se basa en la distribución de nuevas fuentes sobre una superficie auxiliar dada que encierra el dominio original del problema, simulando el efecto de un potencial de simple capa externo, es también posible extender esta idea a la distribución sobre más de una superficie auxiliar permitiendo que los árboles jerárquicos extiendan sus ramas perpendicularmente a la superficie, y no solamente en forma tangencial. En esta forma es también posible representar el efecto de dos o más capas de potenciales, es decir potenciales de doble capa externos y más.

El esquema de refinamiento es una herramienta poderosa para obtener soluciones de alta precisión en problemas tridimensionales. La combinación de las técnicas desarrolladas con la interpolación mediante funciones de base radial demuestra ser efectiva para problemas de flujo con superficie libre en medio poroso y puede ser adaptada a otros problemas con contornos móviles. El indicador propuesto y la estrategia de refinamiento introducidos en este trabajo para problemas armónicos podría ser adaptado a otros problemas elípticos. El enfoque adoptado en este trabajo tiene posibilidad de más ventajas y amerita la investigación más profunda en esta dirección para su aplicación a problemas prácticos más complejos, tales como en multidominios.

Referencias

- [1] J.E. Barnes y P. Hut. A hierarchical $O(N \log N)$ force calculation algorithm. *Nature*, 324(4):446-449, December 1986.
- [2] Bear, J. (1972) *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Elsevier, New York.
- [3] Bear, J. (1979) *Hydraulics of Groundwater*, McGraw–Hill, U.S.A..
- [4] Björck, Å. (1996), *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM Society for Industrial & Applied Mathematics.
- [5] J.A. Board y W.S. Elliot (1994). Fast fourier transform accelerated fast multipole algorithm. Technical Report 94-001, Duke University Dept of Electrical Engineering.
- [6] J.A. Board, Z.S. Hakura, W.S. Elliot, y W.T. Rankin (1994) Scalable variants of multipole-accelerated algorithms for molecular dynamics. Technical Report 94-006, Duke University Dept of Electrical Engineering.
- [7] Bogomolny A. (1985), Fundamental solutions method for elliptic boundary value problems, *SIAM journal on Numerical Analysis*, 22, 644-669.
- [8] Bridges, T.R. y Wrobel, L.C., A DRM formulation for elasticity problems with body forces using augmented thin plate splines, *Communications in Numerical Methods in engineering*, **12**, (3), 209–220, 1996.

- [9] Chan T.F. y Foulser D. (1988), Effectively well-conditioned linear systems, *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, 9, 963-969.
- [10] Chandler, G. A. y Forbes, L.K. (1994), The fundamental solutions method for a free boundary problem, *Computational Techniques and Applications: CTAC-93*, World Scientific, Singapore, 122-130.
- [11] Chatterjee, S. y Hadi, A. S. (1988), *Sensitivity analysis in linear regression*, John Wiley & Sons, Inc, N.Y, Chap. 3, 4.
- [12] Cheng R.S.C. (1987), Delta-Trigonometric and spline methods using the single layer potential representation, Ph.D. dissertation, University of Maryland.
- [13] Elliott, W.D. (1995) Multipole Algorithms for Molecular Dynamics Simulation on High Performance Computers, Technical Report 95-003, Duke University Department of Electrical Eng.
- [14] Coleman, C.J. On the use of radial basis functions in the solution of elliptic boundary value problems. *Computational Mechanics*, 17, pp. 418-422, 1996.
- [15] Duchon J., Spline minimizing rotation - invariant seminorms in Sobolev spaces, in Constructive Theory of Functions of Several Variables, *Lecture Notes in Mathematics*, eds. W. Schempp y K. Zeller, Springer-Verlag, Berlin, **571**, 85-100, 1977.
- [16] Franke, R., Scattered data interpolation: Tests of some methods, *Math. Comp*, **48**, 181-200, 1982.
- [17] Franke, C. & Schaback, R., Solving Partial differential equations by collocation using radial basis functions, *Appl. Math. Comp.* 93 (1998), 73-82.
- [18] Golberg M.A. y Chen C.S. (1999), The method of fundamental solutions for potential, Helmholtz and diffusion problems, in *Boundary Integral Methods Numerical*

and Mathematical Aspects (editor M. Colberg), WITpress Computational Mechanics Publications, Southampton.

- [19] Golberg M.A., Chen C.S. (1996), Discrete projection methods for integral equations, Computational Mechanics Publications, Southampton.
- [20] Golberg M.A., Chen C.S. y Karur S.R. (1996), Improved multiquadric approximation for partial differential equations, Engineering Analysis with Boundary Elements, 18, 9-17.
- [21] Golberg, M.A. y Chen, C.S., A bibliography on radial basis function approximation. *Boundary Elements Communications*, **7** (4), 155–164, 1996.
- [22] Golberg, M.A.,& Chen, C.S., The theory of radial basis functions applied to the BEM for in-homogeneous partial differential equations. *Boundary Elements Communications*, 5, pp. 57-61, 1994.
- [23] Golberg, M.A., The numerical evaluation of particular solutions in the BEM – a review. *Boundary Elements Communications*, 6, pp. 99-106, 1995.
- [24] Golub G. H., Van Loan, C.F., (1996), *Matrix Computations* 3rd ed., Johns Hopkins Series in the Mathematical Sciences, Johns Hopkins University Press.
- [25] Gomez, J.E., Power, H. (1997) A multipole direct and indirect BEM for 2D cavity flow at low Reynolds number. *Engng Anal Boundary Elements*, 19:17-31.
- [26] Greengard, L. y V. Rokhlin, V. (1987) A fast algorithm for particle simulation. *Journal of Computational Physics*, 73:325-348.
- [27] Greengard, L., The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems (MIT Press, Cambridge, MA. 1988).

- [28] Guiggiani, M. (1990), Error Indicators for Adaptive Mesh Refinement in the Boundary Element Method – a New Approach, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **29**: 1247-1269.
- [29] Guiggiani, M. (1996), Sensitivity analysis for boundary element error estimation and mesh refinement, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **39**(17): 2907-2920.
- [30] Han P.S., Olsen M.D. y Johnson R.L. (1987), An adaptive boundary element method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24, 1187-1202.
- [31] Harder, R.L. y Desmarais, R.N., Interpolation using surface splines. *J. Aircraft*, 9, 189-191, 1972.
- [32] Hardy, R.L. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. *J. Geophys. Res.*, 76, 1905-1915, 1971.
- [33] Harr, M.E. (1962) *Groundwater and Seepage*, McGraw-Hill, U.S.A.
- [34] F.J. Hickernell y Hon Y.C., 'Radial basis function approximations as smoothing splines', *Appl. Math. Comput.*, 102, 1-24, (1999).
- [35] Hon, Y.C., Cheung, K.F., Mao, X.Z. y Kansa, E.J. A multiquadric solution for the shallow water equations, *ASCE Journal of Hydraulic Engineering*, Vol. 125, No. 5, pp. 524-533, 1999
- [36] Huyakorn, P.S. y Pinder, G.F. (1983) *Computational methods in subsurface flow*, Academic Press, New York.
- [37] Johnston, R. L. y Fairweather, G. (1984), The method of fundamental solutions for problems in potential flow, *Applied Mathematical Modelling*, **8**, 265-270.

- [38] Karageorghis, A. y Fairweather, G. (1999), The method of fundamental solutions for axisymmetric potential problems, *Int. J. Numer. Meth. Engng.* **44**, 1653-1669.
- [39] Kansa, E.J. y Carlson, R.E. Radial basis functions: A class of grid-free, scattered data approximations. *Computational Fluid Dynamics Journal*, 3(4), 479-496, 1995.
- [40] Karageorghis A. y Fairweather G. (1987), The method of fundamental solutions for the numerical solution of the biharmonic equation, *Journal of Computational Physics*, 69, 435-459.
- [41] Karur, S.R. y Ramachandran, P.A., Radial basis functions applied to the BEM for inhomogeneous partial differential equations, *Boundary Element Communications*, **5**, 57-61, 1994.
- [42] Karur, S.R. y Ramachandran, P.A., Augmented thin plate spline approximation in DRM, *Boundary Elements Communications*, 6, pp. 55-58, 1995.
- [43] Katsurada M. y Okamoto H. (1988), A mathematical study of the charge simulation method, *Journal of the Faculty of Science, University of Tokyo, Section 1A*, 35, 507-518.
- [44] Katsurada M (1990), Asymptotic error analysis of the charge simulation method in a Jordan region with an analytic boundary, *Journal of the Faculty of Science, University of Tokyo, Section 1A*, 37, 635-657.
- [45] Katsurada, M. y Okamoto, H. (1996), The Collocation Points of the Fundamental Solution Method for the Potential Problem *Computers Math. Applic.* **31**(1), 123-137.
- [46] Kitagawa T. (1988), On the numerical stability of the method of fundamental solutions applied to Dirichlet problem, *Japan Journal of Applied Mathematics*, 35, 507-518.

- [47] Kitagawa T. (1991), Asymptotic stability of the fundamental solution method, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 38, 263-269.
- [48] Kupradze V.D. y Aleksidze M.A. (1964), The method of functional equations for the approximate solution of certain boundary value problems, *U.S.S.R. Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 4, 82-126.
- [49] Lapidus, L. y Pinder, G.F. (1982) *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*, John Wiley & Sons.
- [50] Leathrum, J. F., Board, J. A. (1992) *The Parallel Fast Multipole Algorithm in Three Dimensions*, Technical Report 92-001, Duke University Department of Electrical Engineering.
- [51] Leontiev, A. y Huacasi, W. (2001) Mathematical programming approach for unconfined seepage flow problem, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 25, 49-56.
- [52] Liggett, J A., Location of Free Surface in Porous Media, *Journal of the Hydraulics Division, ASCE*, Vol. 103, No HY4, Abril 1977, pp 353-365.
- [53] Madych, W.R. y Nelson, A., Multivariate interpolation: A variational theory, *Technical report, Iowa State University*, 1983.
- [54] Mammoli, A. A. y Ingber, M. S. (1999) Stokes flow around cylinders in a bounded two-dimensional domain using multipole-accelerated boundary element methods', *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(7): 897-917.
- [55] Micchelli, C.A., Interpolation of scattered data: Distance matrices and conditionally positive definite functions, *Constr. Approx.*, **2**, 11-22, 1986.

- [56] Neter, Kutner, Nachtsheim y Wasserman (1996) Applied Linear Statistical Models, 4th edition, WCB McGraw-Hill, Boston.
- [57] Pinder, G.F. y Gray, W.G. (1977) Finite element simulation in surface and sub-surface hydrology, Academic Press, New York.
- [58] Polubarinova–Kochina, P.Y. (1962) Theory of Groundwater Movement, Princeton University Press, Princeton, New Jersey.
- [59] Popov, V., Power, H. (2001) An $O(N)$ Taylor series multipole boundary element method for three-dimensional elasticity problems. *Engng Anal Boundary Elements*, 25:7-18.
- [60] Press, W.H., Teukolsky, S.A. and Vetterling, W.T. (1992.), *Numerical Recipes in Fortran*, Cambridge University Press, Cambridge, Chap. 2, 15.
- [61] Paige C., Saunders M. (1982), LSQR, An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **8**(1): 43-71.
- [62] Partridge, P.W., Brebbia, C.A. y Wrobel, L.C., *The dual reciprocity boundary element method*, Computational Mechanics Publications, Southampton y Elsevier, New Youk, 1992.
- [63] Powell M.J.D., The uniform convergence of thin plate spline interpolation in two dimensions, *Numerische Mathematik* **68/1**, 107-128, 1994.
- [64] Rank, E. y Werner, H. An Adaptive Finite Element Approach for the Free Surface Seepage Problem, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **23**, 1217-1228, 1986.
- [65] Rokhlin, V. (1985) Rapid solution of integral equations of classical potential theory. *Journal of Computational Physics*, 60:187-207.

- [66] Saad, Y., Shultz, M.H. (1986), GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM, J. Sci. Stat. Comput.*, **7**(3).
- [67] Saavedra, I. y Power, H., "Adaptive Refinement in Method of Fundamental Solutions for Bidimensional Laplace Problems" *Boundary Element Communications*, 12(1):3-11, 2001.
- [68] Saavedra, I. y Power, H. "Adaptive refinement scheme for the least-squares fundamental solution method of three-dimensional harmonic problems", *Engineering Analysis with Boundary Elements* (aceptado para publicación, 2003)
- [69] Saavedra, I. y Power, H. "Multipole fast algorithm for the least-squares approach of the method of fundamental solutions for three-dimensional harmonic problems", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 19(6):828-845, 2003.
- [70] Schaback R., Multivariate interpolation and approximation by translates of a basis function, *Approximation Theory VIII*, Charles K. Chui y Larry L. Schumaker (Editors), 1-8, 1995.
- [71] Schaback, R. y Wendland, H., Numerical techniques based on radial basis functions. En Cohen A., Rabut C., Schumaker L., eds, *Curve and Surface Fitting*. Vanderbilt University Press, Nashville, TN, 2000
- [72] Sharan, M. y Kansa, E.J. Application of the multiquadric method for numerical solution of elliptic partial differential equations. *App. Math. and Comp.* 84, 275-302,1997.
- [73] Stead, S., Estimation of gradients from scattered data: Rocky Mount., *J. Math.* **14**, 265-279, 1984.

- [74] Zhang, Y. y Zhu, S., On the choice of interpolation functions used in the Dual Reciprocity Boundary element Method, *Eng. Analysis with Boundary Elements*, **13**, 387-396, 1994.